

文章编号: 1000-5862(2016)01-0043-04

可逆多分子饱和反应动力系统的极限环及其数值模拟

曾广洪¹, 刘华祥², 吴庆初¹

(1. 江西师范大学数学与信息科学学院, 江西 南昌 330022; 2. 广东海洋大学理学院数学系, 广东 湛江 524088)

摘要: 应用微分方程定性理论研究了一类具有2重饱和反应速度的生物化学反应动力系统, 得到了关于存在唯一极限环的显著不同的参数区域, 并用深度优先搜索算法编程进行了计算机数值模拟, 发现其存在Hopf分支现象.

关键词: 饱和反应; 极限环; 深度优先搜索; 数值模拟

中图分类号: O 175.12 文献标志码: A DOI: 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2016.01.08

0 引言

文献[1-2]讨论了具有米氏(Michaelis-Menten)饱和反应速度的生物化学模型

$$\begin{cases} dx/dt = a - bx - xy^2, \\ dy/dt = bx + xy^2 - cy/(y+k), \end{cases} \quad (1)$$

给出模型(1)存在唯一极限环的充分条件, 由结论可知反应速度可能会显著影响生化反应. 在生物化学反应中, 除了米氏饱和和反应速度 $V = v_m [B_0]/(k_m + [B_0])$ 外, 还有多重饱和和态(multiple-saturation)现象, 其反应速度为 $V = v_m [B_0]^n/(k_m + [B_0]^n)$. 本文在此基础上探讨具有2重饱和反应速度的生物化学反应模型

$$\begin{cases} dx/dt = (a-b)x - xy^3, \\ dy/dt = bx + xy^3 - cy^2/(y^2+k), \end{cases} \quad (2)$$

其中 $\min\{a, b, c, k\} > 0$. 进一步地, 通过计算机代数系统进行可视化验证, 发现其存在Hopf分支现象, 并得到其现实意义. 基于系统的实际意义, 只需在区域 $G = \{(x, y) | x \geq 0, y \geq 0\}$ 上进行探讨. 由于当 $a \leq b$ 时, 在区域 G 内, 系统(2)无正奇点, 因而也无极限环, 故总约定 $a > b$.

1 平衡点的分析

为了讨论平衡点的性态, 作时间变换 $dt = (y^2 + k)d\tau$, 仍记 $d\tau = dt$, 则系统(2)拓扑等价于系统

$$\begin{cases} dx/dt = (ax - bx - xy^3)(y^2 + k), \\ dy/dt = (bx + xy^3)(y^2 + k) - cy^2. \end{cases} \quad (3)$$

利用计算机代数系统计算可知, 当 $a > b$ 时, 在区域 G 内, 系统(3)存在唯一的正奇点 $M(x_0, y_0)$, 其中 $x_0 = cy_0^2/[a(y_0^2 + k)]$, $y_0 = \sqrt[3]{a-b}$. 从而, 在平衡点 $M(x_0, y_0)$ 处的 Jacobian 矩阵的特征方程为

$$\lambda^2 - \frac{x_0}{y_0}(3y_0^5 + ky_0^3 - 2bk)\lambda + 3ax_0y_0^2(y_0^2 + k)^2 = 0.$$

因为 $3ax_0y_0^2(y_0^2 + k)^2 > 0$, 故 $M(x_0, y_0)$ 为其初等平衡点, 且不是鞍点. 记 $\Delta = 3y_0^5 + ky_0^3 - 2bk$, 当 $\Delta = 0$ 时, 利用文献[3]提出的中心和焦点判别程序, 再在计算机代数系统中可得细焦点量为

$$C_6 = -\frac{\sqrt{3}}{12} \cdot \frac{(k^2 + 3k(a-b)^{2/3} + 10(a-b)^{4/3})}{(a-b)^{1/3} \sqrt{c((a-b)^{2/3} + k)}} < 0.$$

于是根据张芷芬定理^[4], 有如下结论.

定理1 当 $\Delta > 0$ 时, $M(x_0, y_0)$ 是系统(3)的不稳定焦点或结点; 当 $\Delta < 0$ 时, $M(x_0, y_0)$ 是系统(3)的稳定焦点或结点; 当 $\Delta = 0$ 时, $M(x_0, y_0)$ 是系统(3)的稳定细焦点.

2 极限环的存在唯一性

先证明极限环的存在性.

定理2 当 $\Delta > 0$ 时, 在区域 G 内至少存在1个极限环包围系统(3)的奇点 $M(x_0, y_0)$.

证 用广义Poincare-Bendixson(P-B)环域定理^[4]证明.

如图1所示, 显然 $x = 0$ 和 $y = 0$ 分别是系统

收稿日期: 2015-11-25

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(61203153), 江西省教育厅科学技术研究课题(GJJ13219)和江西师范大学科研计划课题(20124556)资助项目.

作者简介: 曾广洪(1972-), 男, 江西吉安人, 副教授, 主要从事常微分方程与非线性动力系统的研究.

(3) 的积分曲线和无切曲线. 在 $y = 0$ 上任意取一点 $N(x_1, 0)$ 其中 $x_1 > x_0$. 过点 N 作直线 $NP: x - x_1 - 2ay/b = 0$ 其中 $P(x_1 + 2ay_0/b, y_0)$; 过点 P 作 $y = 0$ 的垂线 PQ 其中 $Q(x_1 + 2ay_0/b, y_1)$; 过点 Q 作直线与 $x = 0$ 交于点 $R(0, x_1 + 2ay_0/b + y_1)$.

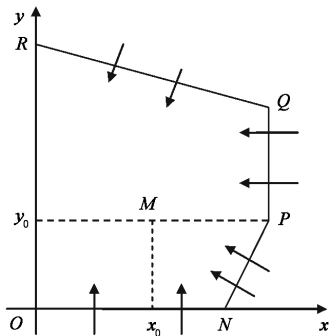


图1 系统(3)的外境界线

容易求得 $d \overline{ON}/dt > 0$, $d \overline{NP}/dt < 0$, $d \overline{PQ}/dt < 0$, $d \overline{QR}/dt < 0$, $d \overline{RO}/dt = 0$. 即闭曲线 \overline{ONPQRO} 的向量场方向均由外部指向内部(见图1), 于是构成了广义 P-B 环域的外境界线, 又由 $\Delta > 0$ 可知奇点 M 是系统(3)的不稳定的非鞍初等平衡点, 从而由广义 P-B 环域定理知定理 2 得证.

再证明极限环的唯一性.

引理 1^[5] 若系统

$$\begin{cases} dx/dt = \varphi(y) - \int_{x^*}^x f(u) du \\ dy/dt = -g(x) \end{cases}$$

满足:

(i) $\varphi'(y) > 0$;

(ii) $g(x)$ 有唯一的零点 x^* , 且当 $x \neq x^*$ 时, 有 $(x - x^*)g'(x - x^*) > 0$;

(iii) 当 $x \neq x^*$ 时, $f(x^*)(f(x)/g(x))' < 0$, 则该系统至多存在 1 个极限环; 若极限环存在, 则该极限环必是稳定的.

定理 3 当 $\Delta > 0$ $\mu > (12y_0^2 + 5k)b/(6y_0^2 + k)$ 时, 系统(3)在区域 G 至多存在 1 个极限环; 若极限环存在, 则该极限环必是稳定的.

证 思路是将系统(3)转化为符合引理 1 条件的 Lienard 方程. 作变换, 令 $x' = x - x_0$, $y' = y - y_0$, $(x' + x_0)(y' + y_0)^2 dt = d\tau$, 仍记 $x' = x$, $y' = y$, $d\tau = dt$, 则系统(3)拓扑等价于系统

$$\begin{cases} dx/dt = -c/x_0 + (b + (x + y_0)^3)((x + y_0)^2 + k)/(x + y_0)^2 + cy/x_0(y + x_0), \\ dy/dt = -((x + y_0)^3 - y_0^3)((x + y_0)^2 + k)/(x + y_0)^2. \end{cases} \quad (4)$$

对照引理 1, 引入记号

$$\varphi(y) = cy/[x_0(y + x_0)],$$

$$\int_{x^*}^x f(u) du = c/x_0 - (b + (x + y_0)^3)((x + y_0)^2 + k)/(x + y_0)^2,$$

$$g(x) = ((x + y_0)^3 - y_0^3)((x + y_0)^2 + k)/(x + y_0)^2.$$

下面验证系统(4)恰是满足引理 1 的 3 个条件的 Lienard 方程.

(i) $\varphi'(y) = c/(y + x_0)^2 > 0$;

(ii) $g(x)$ 有唯一的零点 $x = 0$, 且当 $x > 0$ 时, 有 $xg'(x) > 0$;

(iii) 对 $\int_{x^*}^x f(u) du$ 表达式两边求导得

$$f(x) = -\frac{3(x + y_0)^5 + k(x + y_0)^3 - 2kb}{(x + y_0)^3},$$

$$\text{故 } f(0) = -(3y_0^5 + ky_0^3 - 2kb)/y_0^3 = -\Delta/y_0^3.$$

显然, 当 $\Delta > 0$ 时, 有 $f(x^*) = f(0) < 0$. 因为

$$\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{f'(x)g(x) - f(x)g'(x)}{[g(x)]^2},$$

要证条件(iii)满足, 只需证 $f'(x)g(x) - f(x)g'(x) > 0$. 事实上, 有

$$f'(x)g(x) - f(x)g'(x) = (x + y_0)^{-6} [3(x + y_0)^{10} + 6y_0^3(x + y_0)^7 + k^2(x + y_0)^6 + 6kby_0^3(x + y_0)^2 + 2k^2y_0^3b + 12k(a - 2b)(x + y_0)^5 + 2k^2(a - 5b)(x + y_0)^3],$$

注意到 x, y_0, k, μ, b 均为正数, 要使得 $f'(x)g(x) - f(x)g'(x) > 0$, 则 $12k(a - 2b)(x + y_0)^5 + 2k^2(a - 5b)(x + y_0)^3 > 0$, 解之得

$$a > [12(x + y_0)^2 + 5k]b/[6(x + y_0)^2 + k],$$

再由不等式性质知, 特别地, 取 $a > (12y_0^2 + 5k)b/(6y_0^2 + k)$, 则满足条件(iii).

综上所述, 由引理 1 可得到定理 3 成立.

再由定理 2 和定理 3 可得到存在唯一极限环的充分条件.

定理 4 当 $\Delta > 0$ $\mu > (12y_0^2 + 5k)b/(6y_0^2 + k)$ 时, 系统(3)在区域 G 内存在唯一稳定的极限环.

3 数值模拟

本部分利用数学软件 Maple 的符号计算功能与定性分析对极限环进行数值模拟, 下面介绍具体流程和算法.

3.1 探测极限环的流程

定义 1 一般地, 对于系统

$$\begin{cases} dx/dt = P(x, y), \\ dy/dt = Q(x, y). \end{cases} \quad (5)$$

称 $\vec{V}(x, y) = (P(x, y), Q(x, y))$ 为该系统的向量场, 向量微分算子 $\vec{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$, 称 $\partial P/\partial x + \partial Q/\partial y$ 为向量场在点 (x, y) 处的通量密度或散度, 记作 $\text{div} \vec{V}(x, y)$, 即 $\text{div} \vec{V}(x, y) = \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = \partial P/\partial x + \partial Q/\partial y$.

由定理 2 及其证明可知, 定义 1 的几何意义非常明显, 即 $\text{div} \vec{V}(x, y)$ 可视为向量场所对应的不可压缩的平面流形在点 (x, y) 处的源头强度^[6-7]. 当 $\text{div} \vec{V}(x, y) > 0$ 时, 向量场的方向均由内部指向外部, 即流形由该点朝外扩散, 出现稳定的极限环, 该点为稳定的焦点或结点(物理学中也称为正源); 当 $\text{div} \vec{V}(x, y) < 0$ 时, 向量场的方向均由外部指向内部, 即流形向内朝该点汇集, 出现不稳定的极限环, 该点为不稳定的焦点或结点(物理学中也称为负源或汇); 当 $\text{div} \vec{V}(x, y) = 0$ 时, 该点为鞍点(物理学中也称为无源点). 换句话说, 设 G 是单连通区域, 点 $A(x, y) \in G$, $U(A)$ 是点 A 的一个充分小邻域, $\partial U(A)$ 是该邻域边界, 则 $\text{div} \vec{V}(x, y)$ 在点 A 处的正号或负号代表着沿着邻域边界 $\partial U(A)$, 向量场对应的流形的流出或流入方向. 从而在邻域 $U(A)$ 内, 若 $\text{div} \vec{V}(x, y) = 0$, 则称向量场 $\vec{V}(x, y)$ 为无源场. 于是根据上述直观几何意义, 可得如下结论.

定理 5 系统 (5) 中 $P(x, y), Q(x, y) \in C^1(G)$. 若通量密度曲线 $L: \text{div} \vec{V}(x, y) = 0$ 不通过系统 (5) 的平衡点 M , 且 $\partial U(M) \cap L = \emptyset$, 则在邻域 $U(M)$ 内系统 (5) 无封闭轨线.

证(反证法) 因为通量密度曲线 L 不通过平衡点 M , 所以在 $U(M)$ 内 $\text{div} \vec{V}(x, y) > 0$ (或 < 0). 假设系统 (5) 有封闭轨线 Γ , 设 Ω 是由 Γ 所围成的区域, 由 Green 公式得

$$\oint_{\Gamma} Pdy - Qdx = \iint_{\Omega} (\partial P/\partial x + \partial Q/\partial y) dx dy.$$

又因为沿着 Γ , $Pdy = Qdx$ 恒成立, 所以上式左边为 0; 但右边不为 0, 矛盾, 故定理 5 得证.

定理 5 为探测极限环提供了理论依据, 具体流程为: 在 $U(M)$ 内可以通过 $\text{div} \vec{V}(x, y)$ 的正、负号来初步判定系统的无封闭轨线邻域, 称之为无极限环

邻域. 像定理 2 那样取外境界线^[8], 从而可以在某平衡点的无极限环邻域内和外境界线上分别取内、外探测源(点), 用计算机代数系统编程绘制分别经过探测源的内、外探测流形(轨线), 只要存在包围该平衡点的封闭轨线(极限环), 那么探测流形必将如前所述那样流出或流入而逼近极限环, 并且流出或流入的方向可以得到极限环的稳定性, 这也会导致系统发生 Hopf 分支现象.

3.2 流程的算法及实现

根据上述流程, 下面给出确定极限环的深度优先搜索算法^[9-12]. 在程序中, 命名本文所考察的生化反应系统为 BCRS, 记 BCRS 为根节点(root node); 通过绘制通量密度曲线来构造无极限环邻域为根节点的第 1 代子节点(first child node div); 在无极限环邻域内和外境界线上搜索内、外探测源为第 2 代子节点(second child node probe); 通过分析探测流形的性质来确定极限环为目标状态(goal limit cycle); 堆栈数据结构(stack) 为 Visit manifold, 存放下一个要访问的探测源及流形; 表数据结构(list) 为 Visited manifold, 存放每个已经访问了的探测源及流形, 如图 2 所示.

Hopfbifurcation depth-first-search

```

Node root BCRS, Node current trajectory, Goal goal
limit cycle, Stack Visit manifold, List Visited manifold.
while div > 0 or div < 0
    Visit manifold → current trajectory
    remove first child node probe from Visit manifold
    put second child node probe on Visit manifold
    if current trajectory = goal limit cycle
        add current trajectory to Visited manifold
    end if
    for each inside and outside manifold encounter
        then ODEplot goal limit cycle and return SUCCESS
    end for
end while

```

图 2 确定极限环的深度优先搜索算法

以此算法为指导思想和基本框架, 编制了 Maple 程序进行计算机仿真^[13-15]. 取 $a = 5$, $b = 1$, $c = 2$, $k = 0.1$ 得内探点 $(0.084\ 731\ 904\ 3, 1.887\ 401\ 052)$, $(0.684\ 731\ 904\ 3, 4.787\ 401\ 052)$ 以及外探点 $(0.484\ 731\ 904\ 3, 0)$, $(1.484\ 731\ 904\ 3, 0)$ 相应的内外探轨都正向无限盘旋地趋于 1 个极限环且相

遇 如图 3 所示.

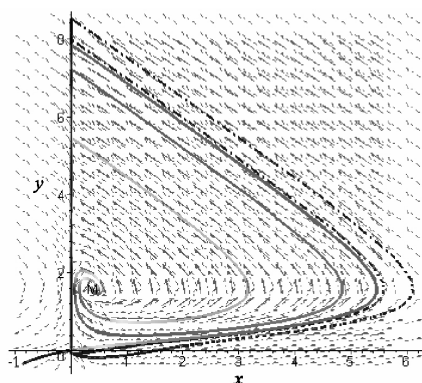


图 3 系统(2)的拓扑结构仿真

4 结论

与文献[1-2]讨论的具有 Michaelis-Menten 饱和反应速度的生化系统不同,本文讨论的是具有 2 重饱和态(double-saturation)的生化反应系统,其拓扑结构有显著差异,即本文所考察的系统(2)拓扑等价于 6 次系统,故本文采用与文献[1-2]不同的方法,既得到了关于存在唯一极限环的显著不同的参数区域,又用计算机代数系统适当地选择参数区域,从而精确地探测到系统(2)的 Hopf 分支现象.本文的理论定性分析结果和计算机代数系统模拟结果同时显示,在该生化反应系统中 2 重饱和态(double-saturation)改变了极限环的拓扑性质,从而改变了发生 Hopf 分支现象(即生化反应出现孤立等幅振荡现象)的参数区域,本文所得的这些理论和可视化结果为优化此类反应的实验参数设计提供参考.

5 参考文献

- [1] 阳平华, 胡宝存. 一类生化反应系统的定性分析 [J]. 生物数学学报, 1998, 13(3): 361-364.
- [2] 陈兰荪, 陈键. 非线性生物动力系统 [M]. 北京: 科学出版社, 1993.
- [3] 曾广洪, 刘华祥. 关于中心和焦点判别问题的一个计算机程序 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2004, 28(5): 440-443.
- [4] 张芷芬, 丁同仁, 黄文灶, 等. 微分方程定性理论 [M]. 北京: 科学出版社, 1997.
- [5] Coppel W A. Some quadratic systems with at most one limit cycle [J]. Dynamics Reported, 1989, 2: 61-88.
- [6] 陈维桓. 微分方程初步 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2002.
- [7] Matthews P C. Vector calculus [M]. London: Springer, 1998.
- [8] 叶彦谦. 极限环论 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1984.
- [9] George F Luger. 人工智能: 复杂问题求解的结构和策略 [M]. 史忠植, 张银奎, 赵志崑, 等, 译. 北京: 机械工业出版社, 2006.
- [10] 房佳, 杜震洪, 张丰, 等. 应用于城市道路网的启发式深度优先有向搜索算法 [J]. 浙江大学学报: 理学版, 2013, 40(4): 469-474.
- [11] Otten L, Dechter R. Anytime AND/OR depth-first search for combinatorial optimization [J]. Ai Communications, 2012, 25(3): 211-227.
- [12] 马知恩, 周义仓, 李承治. 常微分方程定性理论与稳定性方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2015.
- [13] 曾广洪, 刘华祥, 吴庆初. 应用计算机实现规范型的自动化简 [J]. 南昌大学学报: 理科版, 2008, 32(2): 115-118.
- [14] 雷锦誌. 生化反应系统的建模与分析 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2015, 39(3): 230-239.
- [15] 卢克英, 龚霁虹, 仲文林, 等. 关于具有二次相关性收获率的捕食与被捕食系统极限环的存在性分析 [J]. 纯粹数学与应用数学, 2015(4): 414-421.

The Limit Cycle and Its Numerical Simulation of Dynamical System with Reversible Multiple Molecules and Saturated Reaction

ZENG Guanghong¹, LIU Huaxiang², WU Qingchu¹

(1. College of Mathematics and Informatics, Jiangxi Normal University, Nanchang Jiangxi 330022, China;

2. Department of Mathematics, Guangdong Ocean University, Zhanjiang Guangdong 524088, China)

Abstract: By using the qualitative theory of ordinary differential equation (ODE), a nonlinear system in bio-chemical reaction with multiple molecules saturation is studied and the significantly different parameter region of existence and uniqueness of limit cycle is obtained. Numerical simulation of Hopf bifurcation phenomenon was showed on computer by using depth-first-search algorithm of Artificial Intelligence. The results can provide references for optimizing design of experimental parameters in such reactions.

Key words: saturated reaction; limit cycle; depth-first-search; numerical simulation

(责任编辑: 曾剑锋)