数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考：教材一第7章，教材二第1章。

2 变化率模型和稳定性的应用分析

It is on the strength of observation and reflection that one finds a way. So we must dig and delve unceasingly.

——Claude Monet

第一章我们提到了以常微分方程初值问题给出的变化率模型。我们简单回顾一下：令 $\boldsymbol{x}(t) = (x_1(t), \cdots, x_n(t)) \in \mathbb{R}^n$ 为某个系统的状态变量向量, 这个系统的问题由下面的数学模型给出

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t), \quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0. \tag{2.1}$$

这里，每个变量 x_i 的变化率函数为 $f_i(\boldsymbol{x}, t)$, 即

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(\boldsymbol{x}, t),$$

而我们记 $\boldsymbol{f} = (f_1, \cdots, f_n)$。注意，每个 f_i 可能依赖于所有状态变量和时间。

如果变化率函数显含时间 t, 这样的系统是非自治的，而方程的解受到外部给定的依赖于时间的影响。而这一章里，我们只研究自治系统

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0. \tag{2.2}$$

在这类系统中，变化率函数只依赖于当前解的状态（取值），一般用来刻画系统的“自然”的不受外力状态下的固有行为，也往往是研究更复杂系统的出发点。

值得注意的是，在一些简单的问题中，我们甚至可以在不构造方程的解的情况下，单纯的利用变化率方程来得到系统的一些特征性质。

2.1 化学反应的动力学模型

2.1.1 质量作用定律

在化学系统中，将化学反应转化为变化率模型的基本科学原理是质量作用定律（law of mass action）。在简单的反应中，反应物（reactant）和生成物（product）之间的关系可以表示为

$$\text{reactants} \xrightarrow{k} products,$$

生成物的产生率跟反应物的浓度和一个反应常数 k 有关。

我们用 $A(t)(\geq 0)$ 来表示物质 A 的浓度，那么生成 A 的总速率跟所有相关的化学反应中 A 的生成和消耗都有关，

$$\frac{dA}{dt} = +\sum_n (\text{creation rate})_n - \sum_m (\text{consumption rate})_m.$$

在一组反应中，我们对每一种物质都能建立一个变化率方程，因为这些变化率方程会形成一个一阶系统。而变化率函数往往会以各种物质浓度的多项式的形式给出。近代实验证明，质量作用定律只适用于基元反应（只经过一个暂态 (transtion state) 的反应）。基于质量作用定律，我们下面学习几种基本化学反应的形式和他们对应的变化率函数：

1. **Constant supply.** A 被以恒定速率 k 加入系统

   $$(\text{source}) \xrightarrow{k} A \quad \Rightarrow \quad \frac{dA}{dt} = k.$$

   这被称为零阶反应，因为变化率不依赖于反应物的浓度，即 $k = kA^0$。

2. **Decay.** A 以恒定速率 k 损耗（分解，并被移出系统）

   $$A \xrightarrow{k} (\text{waste}) \quad \Rightarrow \quad \frac{dA}{dt} = -kA.$$

   这被称为一阶反应，因为变化率线性依赖于反应物浓度。

3. **Transformation.** A 被消耗，并生成 B

   $$A \xrightarrow{k} B \quad \Rightarrow \quad \frac{dA}{dt} = -kA, \quad \frac{dB}{dt} = +kA.$$

   这是最简单的反应系统：一种反应使得两种不同的物质的浓度发生变化。注意，我们的反应式表明，**一个 A 分子转化成了一个 B 分子**。

4. **Reversible transformation.** A 和 B 会相互转化。这样的关系可以显式地分成正向反应和逆向反应:

   $$A \underset{k_1}{\overset{k_2}{\leftrightarrows}} B \quad \Rightarrow \quad \left\{ \quad A \xrightarrow{k_1} B \quad \text{and} \quad B \xrightarrow{k_2} A \quad \right\}$$

   $$\Rightarrow \quad \frac{dA}{dt} = -k_1 A + k_2 B, \quad \frac{dB}{dt} = +k_1 A - k_2 B.$$

   在这个系统中，每种物质的净变化率是所有生成该物质的反应里的该物质生成率之和减去所有消耗该物质的反应里的消耗率之和。注意，我们的反应式表明，**一个 A 分子和一个 B 分子之间会相互转化**。

5. **Compound formation.** 化合反应：物质 A 和 B 反应，生成另一种物质 C

   $$A + B \xrightarrow{k} C \quad \Rightarrow \quad \frac{dA}{dt} = -kAB, \quad \frac{dB}{dt} = -kAB, \quad \frac{dC}{dt} = kAB.$$

   C 的生成率正比于两种反应物浓度的乘积，这是基于相互独立的分子碰撞的概率表述。我们不难看出，C 的生成率会随着 A 或者 B 的浓度的提升而增加，但是某种反应物耗尽时，反应即停止。注意，我们的反应式表明，**一个 A 分子和一个 B 分子转化成了一个 C 分子**。

   我们注意下面一个特殊情况，当 A 和 B 是同一种物质时，我们有

   $$A + A = 2A \xrightarrow{k} C \quad \Rightarrow \quad \frac{dC}{dt} = kA^2 \quad \left(\text{but} \quad \frac{dA}{dt} \neq -kA^2 \right).$$

   需要小心的是，如果 $\frac{dC}{dt} = kA^2$，那么 $\frac{dA}{dt} = -kA^2$ 是一个错误的命题。我们下面反证。如果 $\frac{dA}{dt} = -kA^2$ 是对的，那么 $\frac{d}{dt}(A + C) = 0$，这与两个 A 分子转化成一个 C 分子的事实矛盾。而这种误解是重复计算（double counting）的一个典型。为了避免此类错误，我们在下面这个类型中对于反应率将做出更精准的定义。

6. **Multiple products.** n 个 A 分子和 m 个 B 分子发生化学反应，生成 p 个 C 分子和 q 个 D 分子，

$$nA + mB \xrightarrow{k} pC + qD.$$

为了避免重复计算，我们引入如下的反应率定义

$$\begin{aligned}\text{Reaction Rate} &= -\text{rate of consuming one unit of reactant}\\ &= +\text{ rate of creating one unit of product.}\end{aligned}$$

于是，我们有

$$\text{Rate} = -\frac{1}{n}\frac{dA}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dB}{dt} = \frac{1}{p}\frac{dC}{dt} = \frac{1}{q}\frac{dD}{dt} = kA^nB^m,$$

注意，上式的最后一个等号表明，生成率是基于相互独立的分子碰撞的概率表述。于是我们得到如下的反应速率方程

$$\frac{dA}{dt} = -nkA^nB^m, \quad \frac{dB}{dt} = -mkA^nB^m,$$

$$\frac{dC}{dt} = pkA^nB^m, \quad \frac{dD}{dt} = qkA^nB^m.$$

特别地，对于上一部分提到的反应 $2A \xrightarrow{k} C$，正确的反应速率方程为

$$\frac{dC}{dt} = kA^2, \quad \frac{dA}{dt} = -2kA^2.$$

注意，对于无源无损的化学反应，通过反应速率方程，我们能够推出很多守恒律。而且我们还能做一些熵估计。（参考作业题目）

2.1.2 米氏酶动力学理论简介

很多非基本的化学反应无法直接用质量作用定律直接刻画，而这些反应往往包含了很多隐藏的中间步骤，例如

$$nA + mB \to (???) \to \cdots \to pC + qD.$$

而这些中间反应的生成物通常不稳定，所以只在系统中短暂存在。

这里我们考虑一个简单的酶催化的化学反应过程

$$S + E \underset{k_1}{\overset{k_2}{\leftrightarrows}} C \xrightarrow{k_3} P + E. \tag{2.3}$$

这里的 S 是底物 ("substrate" reactant) 的浓度，P 是最终产物的浓度。而酶（Enzyme，或称催化剂 catalyst）的作用是，它能引起了中间反应，并使得整体反应

$$S \to P$$

发生，或者它能够加速一个没有酶也能发生的反应。需要注意的是，酶在整个反应过程中没有被消耗。我们这里用 E 来表示酶的浓度。而 C 是中间产物的浓度，这种中间产物不稳定，而且在发生反应之前不存在于系统之内。

我们可以将整个化学反应 (2.3) 分成三个基本反应

$$S + E \xrightarrow{k_1} C, \quad C \xrightarrow{k_2} S + E, \quad C \xrightarrow{k_3} P + E.$$

根据质量作用定律，我们得到反应速率方程组

$$\frac{dP}{dt} = k_3 C, \quad \frac{dC}{dt} = k_1 SE - k_2 C - k_3 C.$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 SE + k_2 C, \quad \frac{dE}{dt} = -k_1 SE + k_2 C + k_3 C.$$

我们进一步假设，最初系统里只有底物和酶，因为，我们给出如下的初值

$$S(0) = S_0, \quad E(0) = E_0, \quad C(0) = 0, \quad P(0) = 0.$$

不难看出，我们现在的系统是冗余的，所以可以根据守恒律来减少微分方程的个数。比如，我们注意到

$$\frac{d}{dt}(C + E) = 0, \quad \Rightarrow \quad C(t) + E(t) = E_0, \quad \Rightarrow \quad E(t) = E_0 - C(t).$$

所以，我们可以弃掉 E 满足的变化率方程，并把其他方程里边的 E 用 $E_0 - C$ 替换。

2.2 稳定性理论简介

虽然动态过程的变化规律一般要用动态模型来描述，但是，对于某些实际问题，建模的主要目的并不是要寻求动态过程每个瞬时的性态，而是研究某种意义下稳定状态的特征，特别是当时间充分长以后，动态过程的变化趋势。

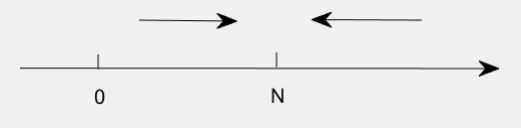
稳定性模型的分析离不开微分、差分方程的稳定性理论，甚至动力系统的其他知识。本章节中，我们只简单介绍稳定性理论的一些结论，而重点研究这些结论的在具体模型问题中的应用。由于差分方程的理论和微分方程的理论有很多的相似之处，我们在本章中忽略对差分方程的讨论。

2.2.1 种群生长的logistic模型和一维系统的稳定性简介

当某个自然环境中只有一种生物的群体（生态学上成为种群）生存时，人们常用logistic模型来描述这个种群数量的演变过程，即

$$\dot{x}(t) = r x\left(1 - \frac{x}{N}\right).$$

这里，$x(t)$是种群在时刻t的数量，r是固有增长率，N是环境资源容许的种群最大数量。从方程里，我们可以直观看出，当$t \to \infty$，我们有几种可能性：$x(t) \to 0$ 或者 $x(t) \to N$ 或者 $x(t) \to \infty$。如果最终$x(t)$有限，这两个平衡解在“稳定性”上有所不同吗？



通过简单的相图分析，我们认为$x = N$是一个“稳定”的平衡解，$x = 0$是一个“不稳定”的平衡解。下面，我们正式定义平衡解的稳定性。

设有微分方程

$$\dot{x}(t) = f(x), \tag{2.4}$$

方程右端不显含自变量t，称为自治方程。而代数方程

$$f(x) = 0$$

的根$x = x_0$称为(2.4)的平衡点（或奇点），显然也是(2.4)的解。

若存在 x_0 的某个邻域，使得如果(2.4)的解 $x(t)$ 从这个邻域内的任意点 $x(0)$ 出发，都有

$$\lim_{t\to\infty} x(t) = x_0,$$

则称平衡点x_0是稳定的（稳定性理论中称渐近稳定）；否则，称x_0是不稳定的（注意，很多教材关于不稳定有其他的定义）。

事实上，可以不求解方程就讨论平衡点的稳定性。

将$f(x)$在x_0点作Taylor展开，只取一次项，(2.4)近似为

$$\dot{x}(t) = f'(x_0)(x - x_0). \tag{2.5}$$

(2.5)称为(2.4)的近似线性方程，x_0也是(2.5)的平衡点。我们有如下的结论：

- 若$f'(x_0) < 0$，则x_0对于(2.4)和(2.5)都是稳定的。
- 若$f'(x_0) > 0$，则x_0对于(2.4)和(2.5)都是不稳定的。
- 若$f'(x_0) = 0$，则x_0是退化的平衡点，需要看第一个非零的高阶导数。（练习）

在很多问题中，系统的解依赖于一个参数。因为系统的平衡点的位置依赖于这个参数。特别地，平衡点的个数和性质会随着参数的变化而发生了改变，这种解的结构的定性改变叫做**分岔**。例如，

$$\frac{dx}{dt} = h(x) - k = x - x^3 - k.$$

这个方程的平衡解的个数会随着 k 的变化发生变化，你能具体讨论一下吗？（练习）

2.3 相互竞争模型和二维系统的稳定性简介

如果有甲乙两个种群，他们独立的在一个自然环境中生存时，数量的演变分别遵从logistic规律。记$x_1(t)$和$x_2(t)$是两个种群的数量，r_1和r_2是他们的固有增长率，N_1和N_2是他们的最大容量。于是对于两个种群，我们有

$$\dot{x}_1(t) = r_1 x_1\left(1 - \frac{x_1}{N_1}\right), \quad \dot{x}_2(t) = r_2 x_2\left(1 - \frac{x_2}{N_2}\right).$$

这里，因子$\left(1 - \frac{x_k}{N_k}\right), k = 1,2$ 代表了各种群消耗有效资源而对他们本身的生长产生的阻滞作用。

如果甲乙这两个种群，不仅在一个自然环境中生存，而且消耗同一种有限资源的时候，他们各自的消耗会同时对甲乙两种种群的生长产生阻滞作用。不过需要注意的是，两种种群对这同一种资源的消耗水平可能是不同的。我们考虑下面的相互竞争模型

$$\dot{x}_1(t) = r_1 x_1\left(1 - \frac{x_1}{N_1} - \sigma_1\frac{x_2}{N_2}\right), \quad \dot{x}_2(t) = r_2 x_2\left(1 - \sigma_2\frac{x_1}{N_1} - \frac{x_2}{N_2}\right).$$

这里，$\sigma_{1/2}$是相对的阻滞系数。

比如，当 $\sigma_1 > 1$ 时，在消耗供养甲的资源中，乙消耗的多于甲，因而乙对甲的阻滞作用要大于甲对自己的阻滞作用。这可以被解读为，乙的竞争力要大于甲。一般来说，σ_1和σ_2没有确定的关系。

为了研究两个种群的相互竞争的结局，即$t \to \infty$时，$x_1(t), x_2(t)$ 的趋向，我们不需要求解方程，只需要分析它们的平衡点。解下面的代数方程

$$r_1 x_1\left(1 - \frac{x_1}{N_1} - \sigma_1\frac{x_2}{N_2}\right) = 0, \quad r_2 x_2\left(1 - \frac{x_2}{N_2} - \sigma_2\frac{x_1}{N_1}\right) = 0.$$

我们得到4个平衡点：

$$P_1(N_1,0),\quad P_2(0,N_2),\quad P_3\left(\frac{N_1(1-\sigma_1)}{1-\sigma_1\sigma_2},\frac{N_2(1-\sigma_2)}{1-\sigma_1\sigma_2}\right),\quad P_4(0,0).$$

因为仅当平衡点在第一象限($x_1,x_2\geq 0$)时才有实际意义，所以对于P_3，我们需要σ_1,σ_2同时大于1或者小于1。

为了讨论这些平衡点的稳定性，我们在下一节学习微分方程稳定性的基本理论。需要说明的是，由于大家的常微分方程的知识有限，所以我们会避开通过求解方程的方法来研究系统的稳定性。

2.4 二维常微分方程稳定性理论

二维常微分方程的平衡点及稳定性

考虑一阶微分方程组

$$\begin{cases}\dot{x}_1(t)=f(x_1,x_2),\\ \dot{x}_2(t)=g(x_1,x_2).\end{cases}\tag{2.6}$$

我们只考虑有段不显含t的情况，即自洽方程。代数方程组

$$\begin{cases}f(x_1,x_2)=0,\\ g(x_1,x_2)=0,\end{cases}$$

的解$x_1=x_1^0,x_2=x_2^0$称为(2.6)的平衡点，记为$P_0(x_1^0,x_2^0)$。

若存在某个邻域，使(2.6)的解$x_1(t),x_2(t)$ 从这个邻域的某个 $(x_1(0),x_2(0))$ 出发，满足

$$\lim_{t\to\infty}x_1(t)=x_1^0,\quad \lim_{t\to\infty}x_2(t)=x_2^0,$$

则称平衡点P_0是稳定的）；否则，称P_0是不稳定的（注意，很多教材关于不稳定有其他的定义）。

为了讨论(2.6)的平衡点的稳定性，我们可以用近似线性方法判断其平衡点$P_0(x_1^0,x_2^0)$。在P_0点将f和g作Taylor展开，只取一次项，我们得到(2.6)的近似线性方程

$$\begin{cases}\dot{x}_1(t)=f_{x_1}(x_1^0,x_2^0)(x_1-x_1^0)+f_{x_2}(x_1^0,x_2^0)(x_2-x_2^0),\\ \dot{x}_2(t)=g_{x_1}(x_1^0,x_2^0)(x_1-x_1^0)+g_{x_2}(x_1^0,x_2^0)(x_2-x_2^0).\end{cases}\tag{2.7}$$

这里，我们记系数矩阵

$$A=\left[\begin{array}{cc}f_{x_1}&f_{x_2}\\ g_{x_1}&g_{x_2}\end{array}\right]\Bigg|_{P_0}$$

并且我们记

$$p=-(f_{x_1}+g_{x_2})|_{P_0},\quad q=\det A.$$

关于P_0点的稳定性，我们有如下结论。

如果 (2.7) 的特征值实部不为0，则P_0对于 (2.6) 的稳定性与对于近似方程 (2.7) 的稳定性相同。若$p>0,q>0$，则平衡点稳定，若$p<0$或$q<0$,则平衡点不稳定。

需要注意的是

- 平衡点及其稳定性的概念只适用于自治方程。
- 对于临界情况 ($f'(x_0)=0$ 或者 $p,q=0$) 非线性方程和它的线性近似方程可以不一致。

再访种群竞争模型

跟据本节的理论，经过直接的计算，我们很容易得到P_3, P_4这两个平衡点的稳定性条件：P_3的稳定条件是$\sigma_1<1, \sigma_2<1$, 而P_4一定是不稳定的。

为了进一步研究P_1和P_2的稳定性，我们引入下面的相轨线分析。

记

$$\phi = 1-\frac{x_1}{N_1}-\sigma_1\frac{x_2}{N_2}, \quad \psi = 1-\frac{x_2}{N_2}-\sigma_2\frac{x_1}{N_1}.$$

则方程可以表示为

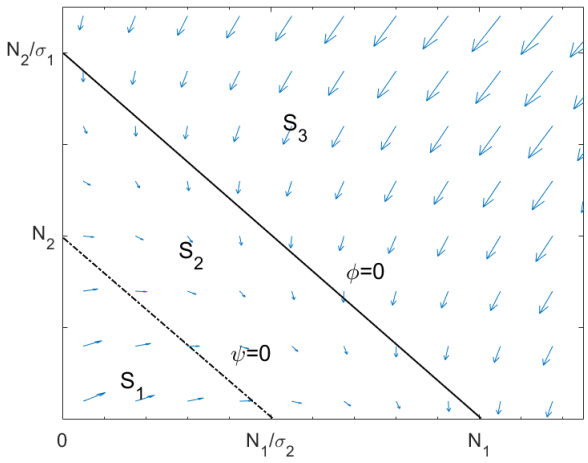
$$\dot{x}_1(t) = r_1x_1\phi, \quad \dot{x}_2(t) = r_2x_2\psi.$$

根据$\phi=0$和$\psi=0$在相平面（$x_1, x_2\geq 0$）的相对位置不同，我们可以分成四种情况。

1. $\sigma_1<1, \sigma_2>1$. 如图，$\phi=0$和$\psi=0$将相平面分成了三个区域

$$S_1: \quad \dot{x}_1>0, \quad \dot{x}_2>0; \qquad S_2: \dot{x}_1>0, \quad \dot{x}_2<0; \qquad S_3: \quad \dot{x}_1<0, \quad \dot{x}_2<0.$$

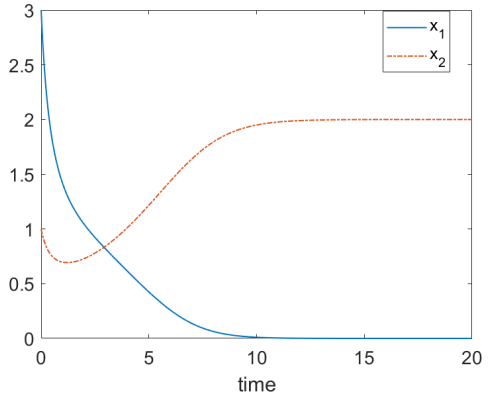
可以证明，无论轨线从哪个区域的任何一点出发，$t\to\infty$都将趋于$P_1(N_1,0)$。这时候，我们也称P_1是全局稳定的。

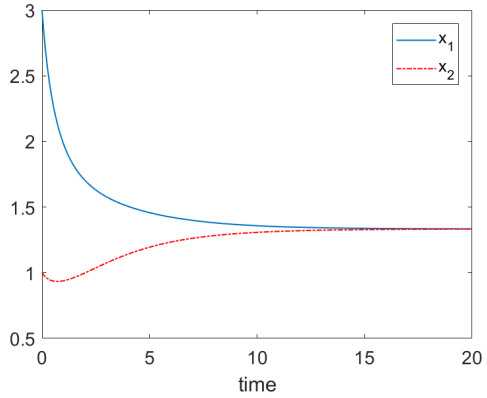


2. $\sigma_1>1, \sigma_2<1$. 可证P_2是全局稳定的。（参考下面左图）

3. $\sigma_1<1, \sigma_2<1$. 可证P_3是全局稳定的。（参考下面右图）

4. $\sigma_1>1, \sigma_2>1$. 可证P_3是不稳定的，P_1, P_2是局部稳定的。





2.5 种群的相互依存模型

自然界中，相互依存共生的现象是普遍存在的。比如，植物可以独立生存，但是昆虫的授粉可以提高植物的生长率；昆虫以花粉为食物，但是不能离开植物单独存活。

我们假设

- 环境对甲乙种群的最大容量分别为 N_1, N_2。
- 种群甲可以独立成活，按照 logistic 规律生长，自然生长率为 r_1。种群乙有助于甲的生长，

$$\dot{x}_1 = r_1 x_1 (1 - \frac{x_1}{N_1} + \sigma_1 \frac{x_2}{N_2}).$$

注意，这里 $\sigma_1 > 0$，为表示乙对甲的促进强度的系数。

- 种群乙无法独立存活，自然死亡率为 r_2；种群甲会促进种群乙的生长；当乙增长时，又会受到自身的阻滞作用，

$$\dot{x}_2 = r_2 x_2 (-1 + \sigma_2 \frac{x_1}{N_1} - \frac{x_2}{N_2}).$$

这里，$\sigma_2 > 0$，为表示甲对乙的促进强度的系数。

容易算出，系统的平衡点如下：

$$P_1(N_1, 0), \quad P_2\left(\frac{N_1(1-\sigma_1)}{1-\sigma_1\sigma_2}, \frac{N_2(\sigma_2-1)}{1-\sigma_1\sigma_2}\right), \quad P_3(0,0).$$

显然，只有 P_2 跟两个种群的相互依存有关。类似之前的计算，我们可以得到，平衡点 P_2 有实际意义（位于相平面的第一象限）且稳定的条件是

$$\sigma_1 < 1, \quad \sigma_2 > 1, \quad \sigma_1\sigma_2 < 1.$$

2.6 Volterra 食饵(Prey)-捕食者(Predator)模型（P-P系统）

食饵和捕食者在时刻t的数量分别记作$x(t), y(t)$。设没有捕食者时，食饵独立生存时按照指数规律增长，增长率为r, 即$\dot{x} = rx$。而捕食者的存在使得食饵的增长率减少，设减小的程度与捕食者的数量成正比，于是$x(t)$满足

$$\dot{x}(t) = x(r - ay) = rx - axy. \tag{2.8}$$

比例系数a反映了捕食者掠取食饵的能力。

捕食者离开食饵无法生存，设它独自存在时死亡率为d, 即$\dot{y} = -dy$。而食饵的存在使得捕食者增长，设这种作用与食饵的数量成正比，于是$y(t)$满足

$$\dot{y}(t) = y(-d + bx) = -dy + bxy. \tag{2.9}$$

比例系数b反映了食饵对捕食者的供养能力。

容易求得，P-P系统的两个平衡点是

$$P_1\left(\frac{d}{b}, \frac{r}{a}\right), \quad P_2(0,0).$$

利用上节p, q的判别法，我们可以验证，P_2是不稳定的，而P_1是临界情况(p=0)，不能推断出这个点的稳定性。下面我们通过分析相轨线来进一步判断。

通过P-P系统的两个方程，可以得到

$$\frac{dx}{dy} = \frac{x(r-ay)}{y(-d+bx)}.$$

通过求解我们得知，该方程的相轨线为

$$x^d e^{-bx} y^r e^{-ay} = c,$$

这里常数c由初值条件决定。事实上，此相轨线为一个封闭曲线。

如果我们令

$$f(x) = x^d e^{-bx}, \quad g(y) = y^r e^{-ay}.$$

将他们的极值点记为x_0, y_0, 极大值记为f_m, g_m, 则不难知道

$$x_0 = \frac{d}{b}, \quad y_0 = \frac{r}{a}.$$

显然，(x_0, y_0)恰好是平衡点P_1.

于是对于给定的c, 我们考察相轨线的形状。

- 当$c = f_m g_m$时，相轨线退化成平衡点P_1。
- 当c由最大值$f_m g_m$减小时，相轨线是一族从P_1向外扩张的封闭曲线。（P_1称为中心。）

固定的相轨线等价于$x(t)$和$y(t)$是周期函数（参考下图），我们记周期为T。事实上，我们可以求出$x(t), y(t)$在一个周期内的平均值, 记为$\bar{x}, \bar{y}$。

我们可以将(2.9)改写成，

$$x = \frac{1}{b}\left(\frac{\dot{y}}{y} + d\right)$$

利用$y(0) = y(T)$, 我们求得

$$\bar{x} = \frac{1}{T}\int_0^T x(t)dt = \frac{d}{b}.$$

类似的，我们可以得到$\bar{y} = \frac{r}{a}$。也就是说，$\bar{x}, \bar{y}$正是轨线中心P_1的坐标。

