arXiv:2304.02303v1 [math.DS] 5 Apr 2023

三反应二次质量作用系统中的振荡

MuradBanaji[1], Bal´azs Boros*[2]，和 Josef Hofbauer[2]

[1]设计、工程与数学系，英国伦敦米德尔塞克斯大学[2]数学系，奥地利维也纳大学

摘要

已知秩二双分子质量作用系统不具有极限环。为了理解哪些小型质量作用系统会产生振荡，本文研究具有双分子源复合物的秩二网络，但允许目标复合物具有更高的分子数。由于我们的目标是寻找规模最小的振荡网络，我们聚焦于具有三个反应的网络，这是产生振荡所需的最少反应数。不过，我们的一些中间结果在更一般的情形下也成立。

一个关键发现是，在具有双分子源复合物的三反应、三分子质量作用系统中，不可能出现孤立周期轨道。事实上，我们刻画了这一类中所有允许存在周期轨道的网络；在每种情况下，所有邻近轨道也都是周期轨道。除了众所周知的Lotka 反应和Ivanova 反应外，我们还确定了这一类中另一个允许存在中心的网络。这个新网络表现出垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。

此外，我们刻画了所有具有双分子源的二物种、三反应网络，这些网络在质量作用动力学下允许发生安德罗诺夫–霍普夫分岔。其中包括两族允许发生超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔的网络，因而具有稳定的极限环。这些网络的目标复合物的分子数必然至少为四；而且，恰好有四个这样的网络是四分子反应网络。

1 引言

有两个著名的小型反应网络会出现振荡：Lotka 反应 [20] 和 Ivanova 反应 [28, 页 630]。这些网络及其对应的质量作用微分方程如下：

$$\begin{aligned} \mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 2\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 2\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= \kappa_2 xy - \kappa_3 y \end{aligned} \tag{1}$$

and

$$\begin{aligned} \mathsf{Z}+\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 2\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 2\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} 2\mathsf{Z} \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 xz - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= \kappa_2 xy - \kappa_3 yz, \\ \dot{z} &= \kappa_3 yz - \kappa_1 xz, \end{aligned} \tag{2}$$

分别地。这两个网络都是双分子网络，即每个源复合物和目标复合物的分子数至多为二。两者的秩均为二，即它们的反应向量张成一个二维空间；对于 Ivanova

*BB 的工作得到了奥地利科学基金项目 P32532 的资助。

反应；这由质量守恒关系 $\dot{x}+\dot{y}+\dot{z}=0$得出。在两个系统中，所有正的非平衡解都是周期性的，并且除去平凡物种的加入（将在下文定义）外，这些是唯一能够容许周期解的三反应、双分子、秩二质量作用系统。事实上，即使反应数目任意，也不存在能够容许孤立周期轨道的双分子秩二系统 [22], [23], [9, 定理 4.1]。

因此，在寻找具有孤立周期轨道的小型质量作用系统时，研究双分子秩三网络或三分子秩二网络是很自然的。前者曾在例如 [29] 和 [10], 中得到研究，并在 [3] 和 [4]中得到了更系统的研究。后者的例子包括 Selkov 的糖酵解振荡器 [25], 、Brusselator [18], 以及 Schnakenberg 网络 [24]。

在本文中，我们研究具有双分子源复合物、但允许更高生成物分子数的网络。对于文献中此类网络的实例，参见例如 [15] 或 [12]。双分子源复合物在化学上比具有更高分子数的源复合物更为现实，在数学处理上也更为容易，因为相应的质量作用微分方程仅为二次。从下文开始，为简便起见，我们将具有双分子源复合物的网络称为“二次”网络。例如，三分子二次网络是指源复合物分子数至多为二、生成物分子数至多为三的网络。

由于我们的目标是在小型网络中寻找或排除振荡，因此我们聚焦于含有三步反应的网络，这是产生振荡所需的最少反应数。以下定理是我们的主要结果之一。它直接由定理 10 推出，证明见第 5 节。

定理1。三反应、三分子、二次质量作用系统不允许存在孤立周期轨道。

我们指出，定理1并未对所涉及的物种数量作出假设：无论物种数量是多少，只要一个三反应、三分子、二次质量作用系统具有周期轨道，其所有邻近轨道也都是周期轨道。事实上，我们证明了，属于这一类且具有周期轨道的系统必然属于以下三个族之一：一类与Lotka系统（1）有关，一类与Ivanova系统（2）有关，另一类与Lifted LVA有关。

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X} & \dot{x}&=\kappa_1 x^2-\kappa_2 xy,\\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 2\mathsf{Y}+\mathsf{Z} & \dot{y}&=\kappa_2 xy-\kappa_3 yz,\\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 & \dot{z}&=\kappa_2 xy-\kappa_3 yz, \end{aligned} \tag{3}$$

一种通过向洛特卡–沃尔泰拉–自催化器（LVA）[12, Eq. (8)], [26, Eq. (1)], 中添加一个新物种而获得的质量作用系统，并且以保持网络的秩为二的方式进行添加。Lifted LVA 具有垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔：当 $\kappa_2=\kappa_3>\kappa_1$ 时，它具有一个二参数族的周期轨道，而在其他情况下没有周期轨道。这与洛特卡系统和伊万诺娃系统形成对比，在这些系统中，对于所有 κ_1、 κ_2、 κ_3，每个正的非平衡态解都是周期性的，并且不发生分岔。

在定理1的启示下，具有孤立周期轨道的三反应、二次质量作用系统必须具有一个分子数至少为四的目标复合物。我们发现，有四个平面三反应、四分子、二次质量作用系统可以实现超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔，从而产生一个线性稳定的极限环，其中最简单的一个是

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X}+\mathsf{Y} & &\\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} \mathsf{Y} & \dot{x}&=\kappa_1 x^2-\kappa_2 xy,\\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 & \dot{y}&=\kappa_1 x^2-\kappa_3 y. \end{aligned} \tag{4}$$

另外三个可通过将式(4)中第二个反应的目标复合物分别替换为 2Y、3Y 或4Y得到。事实上，恰好有两个三反应平面二次质量作用系统族具有超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔。第一个族（源复合物为 2X、X + Y、Y）包括

上文提到的四分子示例。在第二类（源复合物为 2X、X +Y、0）中，每个网络都有一个分子数至少为七的目标复合物。这些结果，以及关于允许周期轨道的平面二次质量作用系统的进一步结果，将在第4节中讨论。

本文其余部分安排如下。第 2节介绍基本符号和术语之后，我们将在第3节介绍一些侧重于分析秩二质量作用系统的工具。第4 节研究双物种三反应系统，第 5节讨论具有任意数量物种的三反应网络。最后，我们将在第 6 节作出总结并提出一些观察。

2 预备知识

我们整理了后文所需的一些基本符号、术语和已知结果。

符号 $\mathbb{R}_+$、 $\mathbb{R}_{\geq 0}$和 $\mathbb{R}_-$ 分别表示正的、非负的和负的实数集合。相应地， $\mathbb{R}_+^n$、 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$和 $\mathbb{R}_-^n$ 分别表示正的、非负的和负的正交象限。对于正的或非负的整数集合，我们也使用类似的记号。我们将$\mathbb{R}_+^n$ 的子集称为正的。

给定一个非负整数行向量 $a = [a_1, \ldots, a_n]$，我们采用标准约定，x^a 是单项式 $x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n}$ 的简写。因此，若 A 是一个非负整数 $m \times n$ 矩阵，且 $a_{j\cdot}$ 是其第 j 行（$j = 1, \ldots, m$），则 x^A 表示列向量 $[x^{a_{1\cdot}}, \ldots, x^{a_{m\cdot}}]^\top$。

该symb ol $\circ$表示两个大小相同的向量或矩阵的逐元素乘积 e.

对于 u、$v \in \mathbb{R}^n$，我们将 u 与 v 的标量积记为 $u \cdot v$。当 $n = 3$时，我们将 u 与 v 的叉积记为 $u \times v$。

2.1 化学反应网络

我们首先介绍（化学）物种、（化学）复合物、（化学）反应以及（化学反应）网络。有关更详细的阐述，读者可以参考例如 [30]。

给定物种X_1、.....、X_n，复合物是形式和 $\sum_{i=1}^n a_i \mathsf{X}_i$，其中系数 a_i被假定为非负整数。反应对应于将称为源复合物（或简称源）的复合物转化为另一个称为目标复合物（或简称目标）的复合物：因此，反应可以被视为复合物的有序对。网络是反应的集合。

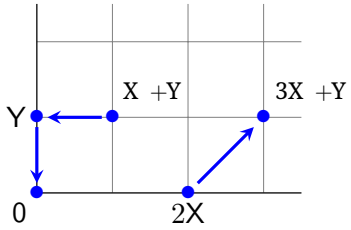
为便于引入更多术语，考虑 m-反应网络

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} \mathsf{X}_i \longrightarrow \sum_{i=1}^n (a_{ij} + c_{ij}) \mathsf{X}_i \quad \text{for } j = 1, \ldots, m. \tag{5}$$

矩阵 $\Gamma = [c_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times m}$称为该网络的化学计量矩阵，而 $\Gamma_l = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times m}$称为其源矩阵。 Γ 的每一列都是对应反应的反应向量。 Γ的像记为 $\operatorname{im}\Gamma$，称为该网络的化学计量子空间；集合 $(x_0 + \operatorname{im}\ \Gamma) \cap \mathbb{R}_{\geq 0}^n$（其中 $x_0 \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n$）和 $(x_0 + \operatorname{im}\ \Gamma) \cap \mathbb{R}_+^n$（其中 $x_0 \in \mathbb{R}_+^n$）分别是该网络的化学计量类和正化学计量类。最后，按定义，该网络的秩为 $\operatorname{rank}\Gamma$。

若对于所有 $j = 1, \ldots, m$，都有 $c_{ij} = 0$，则称物种 X_i 为平凡物种。在所有合理的反应网络模型中，平凡物种的浓度沿每条轨迹保持不变。

一个反应网络可以等同于其在 [11]中定义的欧几里得嵌入图。这是一个有向图，通过将每个复形等同于 $\mathbb{Z}_{\geq 0}^n$中的一个点，并将每个反应等同于一条弧而得到，该弧的尾是反应的源，头是反应的生成物。例如，在(4)中容许超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔的四分子网络的欧几里得嵌入图为：



2.2 分子数

复形 $\sum_{i=1}^{n} a_i \mathrm{X}_i$ 的分子数是非负整数 $\sum_{i=1}^{n} a_i$。若一个网络的每个复形的分子数至多为二、三、四等，则称该网络为双分子、三分子、四分子等。例如，网络(5)为双分子当且仅当对 $j = 1, \ldots, m$有 $\sum_{i=1}^{n} a_{ij} \leq 2$与 $\sum_{i=1}^{n}(a_{ij} + c_{ij}) \leq 2$。

如果一个网络的每个源复合物的分子数至多为二，我们就称其为二次网络。例如，如果网络 (5) 满足 $\sum_{i=1}^{n} a_{ij} \leq 2$ and $\sum_{i=1}^{n}(a_{ij} + c_{ij}) \leq 3$ for $j = 1, \ldots, m$，我们就称其为“三分子、二次网络”。就欧几里得嵌入图而言，这种网络的源复合物仅限于 $\{a \in \mathbb{Z}^n_{\geq 0}\colon \sum_{i=1}^{n} a_i \leq 2\}$，而其生成物仅限于$\{a \in \mathbb{Z}^n_{\geq 0}\colon \sum_{i=1}^{n} a_i \leq 3\}$。

2.3 动力学非平凡网络

如果 $\ker \Gamma \cap \mathbb{R}^m_+ \neq \emptyset$ or equivalently, $\mathrm{im}\Gamma^\top \cap \mathbb{R}^m_{\geq 0} = \{0\}$，我们就称该网络为动力学非平凡网络；否则称其为动力学平凡网络。这两个定义等价，源于 Stiemke 定理[27], ，它是 Farkas 引理的一种变体。在对反应速率作出较弱假设的情况下， $\Gamma^\top$ 的像中存在非零非负向量，等价于存在一个针对 $\mathbb{R}^n_+$ 的线性 Lyapunov 函数；对于相应的微分方程，该函数沿 $\mathbb{R}^n_+$ 中的所有轨道严格递增（见[2, 第 3.3]节）。因此，动力学平凡网络不允许存在正的极限集。特别地，只有动力学非平凡网络才可能在$\mathbb{R}^n_+$中具有平衡态或周期轨道。我们指出，一些作者将动力学非平凡网络称为一致网络 [1], ，类似的思想早已出现在 [14,第 5] 节。

注意到，我们可以将网络动力学非平凡的条件理解为：其反应向量必须是正依赖的： $\mathbb{R}^n$ 中的零向量可以表示为 m 反应向量的正组合。特别地，具有 m 个反应的动力学非平凡网络的秩至多为 $m - 1$。此外，正如我们将在下一小节中看到的，具有 m个反应且秩为 m 的质量作用系统不具有周期轨道，无论这些周期轨道是否为正的。由于本文关注的是具有三个反应且具有产生周期轨道潜力的网络，因此所关注的网络的秩至多为二。另一方面，由于我们研究的微分方程是自治的，并且对于 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$中的每个初始条件都有唯一解，周期解只能出现在秩至少为二的网络中。因此，我们主要关注秩二网络。在第3节中，我们讨论秩二质量作用系统的一些性质。

2.4 质量作用系统

假设采用质量作用动力学，每个反应都关联一个称为速率常数的正数。物种浓度 $x \in \mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 随后随时间按照自治常微分方程演化

$$\dot{x} = \Gamma(\kappa \circ x^{\Gamma_l^\top}), \tag{6}$$

其中 $\kappa \in \mathbb{R}_+^m$ 是速率常数向量。所谓质量作用系统，是指带有速率常数的网络，或微分方程(6)本身；这不应引起混淆。

可以证明，在（6）作用下，正正交象限 $\mathbb{R}_+^n$ 和非负正交象限 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$ 都是前向不变的。事实上，对于任意 $t \geq 0$，具有正初始条件的解始终局限于该初始条件所属的正化学计量类中。众所周知，对于 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$ 的任意（相对开）面 F，定义在 F 上的质量作用向量场要么处处不与 F 相切，要么处处与 F 相切；在后一种情况下， F 局部不变且前向不变。若将注意力限制在任意这样的局部不变面上，那么移除在该面上浓度为零的物种以及涉及这些物种的反应后，我们得到的要么是一个涉及较少物种的质量作用系统，要么是一个“空”系统，其中没有反应发生，因此 F 完全由平衡态构成。

之前的构造有时使我们能够将关于正正交象限的断言扩展到整个非负正交象限。例如，我们注意到，一个具有 m 反应且秩为 m （即具有线性无关的反应向量）的质量作用系统必然禁止周期轨道。由于网络在动力学上是平凡的，因此禁止正的周期轨道是显然的。然而，在 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$的任何局部不变面上也禁止周期轨道：将注意力限制在这样的面上，我们得到的要么是一个再次具有线性无关反应向量、因而在动力学上是平凡的系统；要么是一个没有反应进行且所有点都是平衡点的系统。我们可以推断，具有周期轨道的三反应质量作用系统必然具有秩为二。

2.5 质量作用系统的约化雅可比行列式

我们将具有 n 个物种、 m 个反应且秩为 r 的网络称为（n， m， r）网络。一个（n， m， r）质量作用系统的雅可比矩阵在 $\mathbb{R}_{\geq 0}^n$的每一点处都是一个秩至多为 r的 $n \times n$ 矩阵。我们关注此类系统限制在化学计量类上的动力学，因此也关注其雅可比矩阵在化学计量子空间上的作用。固定任意一个 $x_0 \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n$，系统在 x_0 处的约化雅可比行列式，是将 x_0 处的雅可比矩阵视为化学计量子空间上的线性变换时所得的行列式。给定化学计量子空间的任意一组基，我们都可以写出该线性变换的矩阵表示。由于所有此类矩阵均相似，我们约定将其中任意一个称为系统在 x_0处的约化雅可比矩阵。约化雅可比行列式就是任意约化雅可比矩阵的行列式。等价地，它是与化学计量子空间相关的雅可比矩阵的 r 个特征值之积。在更一般的背景下， [6, 第 2 节2]给出了若干等价表述。若质量作用系统的平衡态处的约化雅可比行列式不为零，我们就称该平衡态为非退化平衡态。

2.6 非退化（n， $n+1$， n）网络

（n， $n+1$， n）网络类将在 [4, 第 3] 节中分析。若一个动力学非平凡的（n， $n+1$， n）网络的源复合物仿射无关，则称该网络为非退化；否则称为退化。以下结果说明了这一术语的由来（参见 [4, 引理 3.1 和注 3.2]）。

引理 2. 考虑一个动力学非平凡的（n， $n+1$， n）网络。则以下结论成立。

(a) 若该网络是非退化的，则对于任意速率常数取值，相应的质量作用系统都有唯一的正平衡态，且该平衡态是非退化的。

(b) 若该网络是退化的，则相应的质量作用系统没有孤立正平衡点。

我们指出，作为下面引理3的一个推论，源复合物的仿射独立性是任何 (n,3, 2)质量作用系统发生振荡的必要条件。因此，网络的非退化性是 (2, 3, 2) 网络发生振荡的必要条件。

3 秩二质量作用系统

在本节中，我们推导出一些质量作用系统的性质，这些系统的基础网络的秩为二，重点关注周期轨道或孤立周期轨道的必要条件。

3.1 秩二质量作用系统中的周期轨道

如果某个质量作用系统在某组速率常数下存在周期轨道，我们就称该系统“具有”周期轨道。注意，在不含任何平凡物种的秩二质量作用系统中，周期轨道必然是正的（因此，该系统必定是动力学非平凡的）。这是由一个简单观察得出的：除非在 F 上处处浓度为零的所有物种都是平凡物种，否则任一化学计量类与真面 F of $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 的交集维数必定小于二。

我们将秩二质量作用系统的正平衡点称为鞍点，条件是该平衡点处的约化雅可比行列式为负。等价地，与该平衡点相关的非平凡特征值中，一个为正，另一个为负。秩二系统中的周期轨道在其所在的化学计量类上，其内部必须至少包含一个平衡态，而且这些平衡态不可能全都是鞍点（例如参见 [13, 第 3.5] 节）。因此，如果某个秩二质量作用系统的所有正平衡点都是鞍点，则可以排除正周期轨道。此外，若该网络不含平凡物种，那么（根据上一段的观察）也可以排除 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 边界上的周期轨道。我们将经常利用这些观察来排除质量作用系统中的周期轨道。

3.2 位于直线上的源复合物

我们对源复合物位于同一直线上的秩二质量作用系统作一观察。这里不对物种数、反应数或复合物的分子数作任何假设。

引理 3. 源复合物位于同一直线上的秩二质量作用系统不存在周期轨道。

证明. 由于正正交象限 $\mathbb{R}^n_+$ 是正向不变的，周期轨道要么完全位于 $\mathbb{R}^n_+$ ，要么位于 $\mathbb{R}^n_+$的边界上。在后一种情况下，周期轨道必定完全位于某个相对开真面内（见第 2.4 节）。

我们首先证明该系统在 $\mathbb{R}^n_+$中不存在周期轨道。具有 n 个物种和 m 个反应的网络的质量作用微分方程的一般形式为

$$\dot{x}_i = \sum_{j=1}^{m} \beta_{ij} x^{\alpha_j} \quad (i = 1, \ldots, n),$$

其中， $\alpha_j \in \mathbb{R}^n$ 表示第 j个源复合物（$j = 1, \ldots, m$）。由于所有源复合物都位于同一直线上，存在 $s_1, \ldots, s_m \in \mathbb{R}$ 和 $\alpha \in \mathbb{R}^n$，使得 $\alpha_j = \alpha_1 + s_j \alpha$ （此处 $s_1 = 0$）。因此，除以正标量函数 x^{α_1} 后，得到

$$\dot{x}_i = f_i(x^{\alpha}) \quad (i = 1, \ldots, n),$$

一个右端项仅通过标量 x^{α}依赖于 $x \in \mathbb{R}^n_+$ 的微分方程。由于网络的秩为二，正正交象限被二维不变线性流形——正化学计量类——分叶。根据 [21, 命题 1], ，其中没有一个包含周期轨道。

最后，我们论证 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 的边界上也不可能存在周期轨道。为证伪，假设 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 的某个真 k 维（相对开）面 F 包含一条周期轨道。显然， $k \geq 2$ ；根据第 2.4 节中的说明，面 F 必须是局部不变的。将注意力限制在 F 上（我们将其视为 $\mathbb{R}^k_+$），并移除在 F 上浓度为零的物种，并且

涉及这些物种的反应，我们可以将该系统视为一个作用于 k 物种、秩至多为二且具有一条现位于 $\mathbb{R}_+^k$ 中的周期轨道的质量作用系统。但这被第 2.4 节和上一段中的论证排除了。证明至此。

□

3.3 三反应系统的约化雅可比行列式

本文主要研究的系统类别是三反应、秩为二的质量作用系统。本小节将推导此类系统在任意正平衡点处的约化雅可比行列式公式，并说明如何应用该公式排除振荡。

由于动力学平凡的网络不存在正平衡点，我们考虑一个动力学非平凡的 (n,3, 2) 质量作用系统，不对复合物的分子数作任何假设。不失一般性，我们可以假设化学计量矩阵 $\Gamma \in \mathbb{R}^{n\times 3}$ 的第一行和第二行（记为 $[c_1, c_2, c_3]$ 和 $[d_1, d_2, d_3]$）构成其行空间的一组基，并写作

$$\Gamma = \widetilde{\Gamma} \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ d_1 & d_2 & d_3 \end{bmatrix},$$

其中 $\widetilde{\Gamma} \in \mathbb{R}^{n\times 2}$ 的秩为二，且其顶端的 2×2 块是单位矩阵。定义 $c = [c_1, c_2, c_3]^\top$ 和 $d = [d_1, d_2, d_3]^\top$， Γ 的核由 $u = c \times d$ 张成（即 $u_1 = c_2 d_3 - c_3 d_2$、 $u_2 = c_3 d_1 - c_1 d_3$、$u_3 = c_1 d_2 - c_2 d_1$）。由于该网络是动力学非平凡的，$u \in \mathbb{R}_+^3 \cup \mathbb{R}_-^3$。固定 $\kappa \in \mathbb{R}_+^3$，并令 $\bar{x} \in \mathbb{R}_+^n$ 为一个平衡态，即对于某个非零标量 μ，有 $\kappa \circ \bar{x}^{\Gamma_l^\top} = \mu u$。我们可以用 $\widetilde{\Gamma}$ 按自然方式定义 $\bar{x}$ 的化学计量类上的局部坐标，并得到 $\bar{x}$ 处的约化雅可比矩阵：

$$J_{\text{red}} = \mu \begin{bmatrix} c^\top \\ d^\top \end{bmatrix} \Delta_u \Gamma_l^\top \Delta_{1/\bar{x}} \widetilde{\Gamma},$$

其中， $\Delta_u \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ 和 $\Delta_{1/\bar{x}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 分别是对角线上依次为u_j ($j = 1$,2,3)和 $1/\bar{x}_i$ ($i = 1, ..., n$)的对角矩阵（更多详情请参见 [6, 附录A] 和 [4, 第2 节及 3]）。记$a_{i\cdot}$ 为 Γ_l的第 i行，应用柯西–比内公式可得

$$\det J_{\text{red}} = \mu|\mu||u_1 u_2 u_3| \sum_{i<j} \frac{\widetilde{\Gamma}[\{i,j\},\{1,2\}]}{\bar{x}_i \bar{x}_j} (\mathbf{1} \cdot (a_{i\cdot} \times a_{j\cdot})), \tag{7}$$

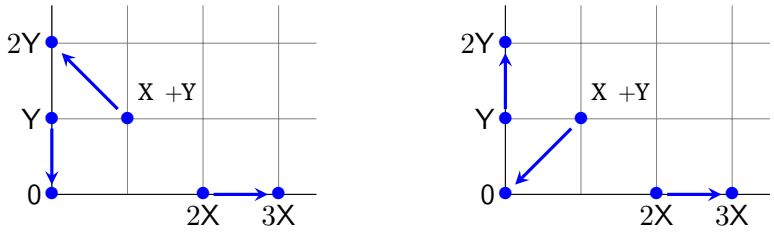
其中， $\widetilde{\Gamma}[\{i,j\},\{1,2\}]$ 是由 Γ 的第 i行和第 j行组成的 2×2 子矩阵的行列式，1是 $\mathbb{R}^3$中的全1向量，并且我们还使用了 $\mu u_k = |\mu u_k|$这一事实。注意， $\mathbf{1}\cdot(a_{i\cdot} \times a_{j\cdot})$的符号反映了投影到第（$i$， j）个坐标上的三个源复合物的方向。我们指出，对特权物种的任何选择都必须得到相同的 $\det J_{\text{red}}$值。

在特殊情形 $\mu = 2$ 时，化雅可比行列式就是其本身。因此，

$$\det J = \frac{\mu|\mu||u_1 u_2 u_3|}{\bar{x}_1 \bar{x}_2} (\mathbf{1} \cdot (a_{1\cdot} \times a_{2\cdot})). \tag{8}$$

从这个表达式可以看出，要使 J 的行列式非零，三个源复合物必须仿射无关（即它们必须张成一个三角形）。此外，由于 $\mathbf{1}\cdot(c \times d)$与 μ同号，当且仅当三个反应向量 $[c_1, d_1]^\top$、 $[c_2, d_2]^\top$、 $[c_3, d_3]^\top$张成的三角形与三个源复合物张成的三角形方向相同时，$\det J > 0$为正。如果由源复合物张成的三角形与由反应向量张成的三角形方向相反，那么$\det J < 0$，且该平衡态是一个鞍点。我们用下面两个网络说明这两种可能性：左侧是 LVA（见下文 (19)）；右侧是一个具有相同复合物的网络

与 LVA 相同，但反应向量不同。后一个网络的任意正平衡点必然是鞍点。



为说明 $n \geq 3$ 情况下的公式 (7)，考虑 (4, 3, 2) 网络

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\longrightarrow 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\longrightarrow \mathsf{Z}+\mathsf{W} \\ \mathsf{Z}+\mathsf{W} &\longrightarrow \mathsf{Y} \end{aligned}$$

这将在下文的引理 12 中发挥作用。这里，

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \Gamma_l = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

因此，采用这种物种排序时，$u_1 = u_2 = u_3 = -1$ 和 $\mu < 0$。由于子式$\sim\Gamma[\{i,j\},\{1,2\}]$ 在 $2 \leq i < j \leq 4$ 时消失，只有选择 $i = 1$ 和 $j = 2$、3、4 才会在 (7) 中产生非零项。我们得到

$$\det J_{\text{red}} = \mu|\mu| \left(\frac{2}{\bar{x}\bar{y}} + \frac{1}{\bar{x}\bar{z}} + \frac{1}{\bar{x}\bar{w}} \right),$$

由于 $\mu < 0$，其为负。因此，每个正平衡点在其化学计量类内都是鞍点，并且根据第 3.1 节中的观察，该网络不允许存在周期轨道。

3.4 二次系统中存在孤立周期轨道所必需的反应

在本小节中，我们运用散度论证和 Bendixson–Dulac判别法，证明在秩二二次质量作用系统中，某些反应的存在是出现孤立周期轨道的必要条件。对于第一个结果，我们不对系统中的反应数量作任何假设。

引理 4. 假设一个不含平凡物种的秩二二次网络中没有形如

$$2\mathsf{X}_j \longrightarrow (2+c_j)\mathsf{X}_j + \sum_{i \neq j} c_i \mathsf{X}_i \ \textit{with}\ c_j > 0 \ \textit{and}\ c_i \geq 0 \ \textit{for}\ i \neq j. \tag{9}$$

的反应。假设其关联的质量作用系统存在一个周期轨道。那么，该网络含有两个或三个物种，且其质量作用微分方程为以下形式之一：

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1(r_1 + b_{12}x_2) \\ \dot{x}_2 &= x_2(r_2 + b_{21}x_1) \end{aligned} \qquad \textit{or} \qquad \begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1(b_{12}x_2 + b_{13}x_3) \\ \dot{x}_2 &= x_2(b_{21}x_1 + b_{23}x_3) \\ \dot{x}_3 &= x_3(b_{31}x_1 + b_{32}x_2) \end{aligned} \tag{10}$$

其中 $r_1 r_2 < 0$、$r_1 b_{12} < 0$、$r_2 b_{21} < 0$

其中 $b_{12}b_{13} < 0$、$b_{21}b_{23} < 0$、$b_{31}b_{32} < 0$

$\textit{and}\ b_{12}b_{23}b_{31} + b_{13}b_{21}b_{32} = 0$

因此，不含平凡物种且不包含形式为 (9) 的反应的秩二二次质量作用系统，不存在孤立周期轨道。

证明。考虑一个满足引理假设的质量作用系统。根据第 3.1 节中的说明，该系统的每条周期轨道都必须是正的。记 f 为将系统的右端乘以 Dulac函数 $(x_1 \cdots x_n)^{-1}$ 后在 $\mathbb{R}^n_+$ 上得到的向量场。我们考察散度 $\operatorname{div} f = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_j}$。对于固定的 $j \in \{1, \ldots, n\}$，反应 $\sum_{i=1}^n a_i \mathrm{X}_i \xrightarrow{\kappa} \sum_{i=1}^n (a_i + c_i)\mathrm{X}_i$ 对 f_j 的贡献项为 $c_j \kappa x_1^{a_1 - 1} \cdots x_n^{a_n - 1}$。因此，此类反应对 $\operatorname{div} f$ 的贡献在 $a_j = 1$ 或 $c_j = 0$ 时为零；而在 $a_j = 0$ 且 $c_j > 0$，或 $a_j = 2$ 且 $c_j < 0$ 时为负。这是仅有的两种可能，因为形式为 (9) 的反应已被排除，因此没有任何反应会对 $\operatorname{div} f$ 产生正贡献。显然，如果存在某个产生负项的反应，则 $\operatorname{div} f$ 在 $\mathbb{R}^n_+$ 上处处为负；如果不存在这样的反应，则 $\operatorname{div} f$ 在 $\mathbb{R}^n_+$ 上恒为零。

如果 f 在 $\mathbb{R}^n_+$ 中处处为负，则根据Bendixson–Dulac判别法，$\mathbb{R}^n_+$ 中的周期轨道将被排除，参见 [19,定理3，备注（3）]。

另一方面，如果 $\operatorname{div} f \equiv 0$ 在 $\mathbb{R}^n_+$，那么上述讨论意味着，对于所有 j，$c_j \neq 0$ 则 $a_j = 1$。等价地，质量作用微分方程是一个没有对角项的 Lotka–Volterra方程（即，单项式 x_j^2 不会出现在 $\dot{x}_j$ 的表达式中）：

$$\dot{x}_j = x_j \left(r_j + \sum_{k \neq j} b_{jk} x_k \right) \text{ for } j = 1, \ldots, n.$$

情形 $n = 2$。为了容纳一个周期轨道，该系统必须容纳一个不是鞍点的正平衡点，由此很容易得到 $r_1 r_2 < 0$, $r_1 b_{12} < 0, r_2 b_{21} < 0$，正如所述。

情形 $n = 3$。由于该网络的秩为二，存在非零的 $d \in \mathbb{R}^3$，使得 $d_1 \dot{x}_1 + d_2 \dot{x}_2 + d_3 \dot{x}_3 = 0$。因此，$d_1 r_1 = d_2 r_2 = d_3 r_3 = 0$ 并

$$\begin{bmatrix} b_{12} & b_{21} & 0 \\ b_{13} & 0 & b_{31} \\ 0 & b_{23} & b_{32} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

这意味着 $b_{12} b_{23} b_{31} + b_{13} b_{21} b_{32} = 0$。此外，所有 d_i 都必须非零，否则系统要么含有平凡物种，要么某些物种浓度沿正轨线严格递增，从而排除周期轨道的存在（参见定理 4.1] 的 [9, 证明）。我们得出结论：$r_1 = r_2 = r_3 = 0$。正平衡点的存在继而意味着 $b_{12} b_{13} < 0, b_{21} b_{23} < 0, b_{31} b_{32} < 0$。

情形 $n \geq 4$。事实上可以发现，不存在没有平凡物种的秩二网络，其质量作用微分方程是不含对角项的 Lotka–Volterra方程。详见 [9, 定理 4.1] 的证明以了解详情。

由以下事实可直接得出，式 (10) 中的系统不存在孤立周期轨道：两个向量场分别在 $\mathbb{R}^2_+$ 和 $\mathbb{R}^3_+$ 上具有（非线性的）首次积分；事实上，将它们限制在二维不变集上时，它们是哈密顿系统。守恒量分别为 $r_1 \log y - r_2 \log x + b_{12} y - b_{21} x$（在双物种情形中）和 $d_1 d_2 b_{23} \log x + d_2 d_3 b_{31} \log y + d_1 d_3 b_{12} \log z$（在三物种情形中）。□

注意，形如（9）的唯一三分子反应是 $2\mathrm{X}_j \longrightarrow 3\mathrm{X}_j$。因此，我们得到以下结果，这是朝着证明我们的主要结果之一，即定理1，迈出的重要一步。

推论5. 如果一个不含平凡物种的秩二、三分子、二次质量作用网络存在孤立周期轨道，那么存在 $j \in \{1, \ldots, n\}$ 使得 $2\mathrm{X}_j \longrightarrow 3\mathrm{X}_j$ 是该网络中的一个反应。

如果将引理 4 的适用范围限定为三反应情形，我们便能刻画出那些会导出式 (10) 中微分方程的网络。Lotka 反应 (1) 和 Ivanova 反应 (2) 就是这样的

实例。此外，我们还发现了一个推广 Lotka 反应的二物种网络二参数族，以及一个新的三物种网络二参数族；它们都能导出形式如式 (10) 的微分方程。

引理6. 假设一个不含平凡物种的三反应二次网络没有形如 (9) 的反应。那么，其对应的质量作用系统存在周期轨道，当且仅当该网络经物种置换后，要么是 Ivanova 反应，要么属于以下两个参数为 $c, d \geq 1$ 的族之一：

$$\begin{aligned} \mathsf{X} &\longrightarrow (1+c)\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\longrightarrow (1+d)\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} &\longrightarrow 0 \end{aligned} \tag{11}$$

and

$$\begin{aligned} \mathsf{Z}+\mathsf{X} &\longrightarrow (1+c)\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\longrightarrow 0 \\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\longrightarrow (1+cd)\mathsf{Y}+(1+d)\mathsf{Z} \end{aligned} \tag{12}$$

对于 Ivanova 反应以及 (11) 中的网络，任意速率常数下，每个化学计量类都包含唯一的正平衡点，且该平衡点是其化学计量类中的全局中心。对于 (12) 中的网络，视速率常数而定，要么不存在周期轨道；要么在某些化学计量类上存在唯一的正平衡点，且该平衡点是全局中心。

证明。考虑一个满足引理假设的反应网络。回顾第 2.4 节，存在周期轨道的三反应系统的秩必为二。由引理 4 可知，该网络有两个或三个物种，且其质量作用微分方程具有 (10) 中的某种形式。双物种情形很直接：读者可以验证，任何不含平凡物种、且产生 (10) 左侧微分方程的三反应网络都必须具有 (11) 中的形式。任何这样的网络都存在一个第一积分 $d\kappa_2 x + \kappa_2 y - \kappa_3 \log x - c\kappa_1 \log y$ on $\mathbb{R}^2_+$，其等值集有界，并在唯一的正平衡点处取得全局最小值。因此，该平衡点显然是全局中心。下面重点讨论稍难一些的三物种情形。

容易看出，如果一个三反应、三物种网络导出右侧 (10) 中的微分方程，那么它必然具有如下形式

$$\begin{aligned} \mathsf{Z}+\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} (1+c_{31})\mathsf{Z}+(1+c_{11})\mathsf{X} \qquad & \dot{x} &= x(\kappa_1 c_{11} z + \kappa_2 c_{12} y), \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} (1+c_{12})\mathsf{X}+(1+c_{22})\mathsf{Y} \qquad & \dot{y} &= y(\kappa_2 c_{22} x + \kappa_3 c_{23} z), \\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} (1+c_{23})\mathsf{Y}+(1+c_{33})\mathsf{Z} \qquad & \dot{z} &= z(\kappa_3 c_{33} y + \kappa_1 c_{31} x) \end{aligned}$$

其中 $c_{ij} \geq -1$，且 $\operatorname{sgn} c_{ii} = -\operatorname{sgn} c_{i,\,i+1} \neq 0$。因此，六个 c_{ij} 中有三个等于 -1，另外三个是正整数。经过简短计算可知，当且仅当$c_{11}c_{22}c_{33} = -c_{12}c_{23}c_{31}$时，该网络的秩为二。如果 c_{ii} 中没有负数，那么 $c_{12} = c_{23} = c_{31} = -1$ 且 $c_{11} = c_{22} = c_{33} = 1$，从而得到 Ivanova 反应。如果 c_{ii} 中恰有一个是负数，那么（由于物种具有循环对称性）不失一般性，我们可以假设 $c_{22} = -1$，且 $c_{11} > 0$ 和 $c_{33} > 0$。因此，$c_{12} = c_{31} = -1$，并且根据秩条件，$c_{23} = c_{11}c_{33}$，从而得到 (12) 中的网络族。c_{ii} 中有两个或三个为负数的情况，可以通过交换两个物种化归为已经讨论过的情况。

伊万诺娃质量作用系统的行为已广为人知 [28, 页 630]。一些直接的计算表明，对于某些速率常数，(12)中的网络确实会在某些化学计量类中产生具有中心的微分方程。正平衡点的集合是

射线 $t(\kappa_1\kappa_3 cd, \kappa_1 c, \kappa_2)$ 对于 $t > 0$，正化学计量类由 $\mathcal{P}_D = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3_+$ 给出：$x - y + cz = D\}$ 对于 $D \in \mathbb{R}$，且系统具有守恒量 $d\kappa_3 \log x - \kappa_1 \log y + \kappa_2 \log z$。对系统的分析揭示了以下内容。

- 当 $\kappa_1 > \kappa_2 + \kappa_3 d$ 时，$\mathcal{P}_D$ 中存在正平衡点，当且仅当 $D < 0$。此时，平衡态是唯一的，且为全局中心，因为当 $D < 0$ 时，守恒量在 $\mathcal{P}_D$ 上的等值集是紧的。

- 当 $\kappa_1 = \kappa_2 + \kappa_3 d$ 时，整条正平衡点射线都位于 $\mathcal{P}_0$ 中。事实上，经过原点的 $\mathcal{P}_0$ 中每条射线都是不变的，因此该系统没有周期轨道。

- 当 $\kappa_1 < \kappa_2 + \kappa_3 d$ 时，$\mathcal{P}_D$ 中存在正平衡点，当且仅当 $D > 0$。此时，平衡态是唯一的，且为鞍点。因此，根据第 3.1 节中的讨论，该系统没有周期轨道。

□

我们指出，(11) 中的网络族恰好就是 [12,式 (5)]。

4 二次 (2,3,2) 系统的分析

本节关注含两个物种、三个反应的二次质量作用系统。关于这类系统，我们的第一个主要结果是定理7：当目标分子数不超过三时，这些系统不具有孤立周期轨道。之后，我们将在定理 10 中把这一结果推广到物种数任意的质量作用系统；不过，较简单的平面情形本身也值得研究，其证明还有助于证明更一般的结果。

定理7. 含三个反应、两个物种的三分子二次质量作用系统不具有孤立周期轨道。

定理7的证明在第4.3节完成。在第4.5节，我们将得到关于平面系统的第二个主要结果——定理9，并找出所有具有任意目标分子数的三反应平面二次质量作用系统中，哪些系统会发生安德罗诺夫–霍普夫分岔。结果表明，有两类网络会发生超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔，另有一类网络会发生垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。这些网络中恰有四个是四分子网络，而其余发生安德罗诺夫–霍普夫分岔的网络，其目标复合物的分子数至少为五。

4.1 设定

为便于阅读，我们在双物种情形下采用了与一般情形略有不同的记号，遵循 [8, 第 5]节。在本节中，我们一直在分析三反应质量作用系统

$$\begin{aligned} a_1\mathsf{X} + b_1\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_1} (a_1 + c_1)\mathsf{X} + (b_1 + d_1)\mathsf{Y} \\ a_2\mathsf{X} + b_2\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} (a_2 + c_2)\mathsf{X} + (b_2 + d_2)\mathsf{Y} \\ a_3\mathsf{X} + b_3\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} (a_3 + c_3)\mathsf{X} + (b_3 + d_3)\mathsf{Y} \end{aligned} \tag{13}$$

及其相关微分方程

$$\begin{aligned} \dot{x} &= c_1\kappa_1 x^{a_1} y^{b_1} + c_2\kappa_2 x^{a_2} y^{b_2} + c_3\kappa_3 x^{a_3} y^{b_3}, \\ \dot{y} &= d_1\kappa_1 x^{a_1} y^{b_1} + d_2\kappa_2 x^{a_2} y^{b_2} + d_3\kappa_3 x^{a_3} y^{b_3} \end{aligned} \tag{14}$$

其中 a_i、 b_i、 $a_i + c_i$、 $b_i + d_i$ ($i = 1$、2、3) 为非负整数。

由引理 3 可知，如果三个源复合物 (a_1, b_1)、(a_2, b_2)、(a_3, b_3) 共线，则方程 (14) 不可能存在周期轨道。因此，从现在起，我们假设 that

$$(a_1, b_1),\ (a_2, b_2) \text{ and } (a_3, b_3) \text{ span a triangle, which is positively oriented.} \tag{15}$$

显然，关于方向的假设不失一般性。

该网络的化学计量矩阵是

$$\Gamma = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ d_1 & d_2 & d_3 \end{bmatrix}.$$

由于我们关注的是寻找周期轨道，因此假设秩 $\Gamma = 2$ 且网络具有动态非平凡性。因此，借助 $c = [c_1, c_2, c_3]^\top$ 和 $d = [d_1, d_2, d_3]^\top$， Γ 的核由$u = c \times d \in \mathbb{R}^3_+ \cup \mathbb{R}^3_-$张成。在此，

$$\begin{aligned} u_1 &= c_2 d_3 - c_3 d_2, \\ u_2 &= c_3 d_1 - c_1 d_3, \\ u_3 &= c_1 d_2 - c_2 d_1. \end{aligned} \tag{16}$$

根据引理 2，在所述假设下，质量作用系统 (14) 具有唯一的正的平衡态 $(\bar{x}, \bar{y})$。如第3.3节所述，存在非零的 $\mu \in \mathbb{R}$，使得 $\mu u_i = \kappa_i \bar{x}^{a_i} \bar{y}^{b_i}$ ($i = 1, 2, 3$)，并且在该平衡态处的雅可比矩阵记为 J，其表示为

$$J = \mu \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^3 a_i c_i u_i & \sum_{i=1}^3 b_i c_i u_i \\ \sum_{i=1}^3 a_i d_i u_i & \sum_{i=1}^3 b_i d_i u_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\bar{x} & 0 \\ 0 & 1/\bar{y} \end{bmatrix}.$$

根据引理 2，$\det J \neq 0$。事实上，由于源复合物按假设具有正的定向，公式 (8) 表明

$$\operatorname{sgn} \det J = \operatorname{sgn} \mu = \operatorname{sgn} u_1 = \operatorname{sgn} u_2 = \operatorname{sgn} u_3. \tag{17}$$

当 $\det J < 0$，或等价地 $u \in \mathbb{R}^3_-$ 时，该平衡态为鞍点，并且根据第 3.1 节中的讨论，质量作用系统 (13) 不存在周期轨道。

为后续使用，正平衡点处雅可比矩阵的迹为

$$\operatorname{tr} J = \mu \left(\frac{1}{\bar{x}} \sum_{i=1}^3 a_i c_i u_i + \frac{1}{\bar{y}} \sum_{i=1}^3 b_i d_i u_i \right). \tag{18}$$

4.2 Lotka–Volterra–自催化器

鉴于推论 5，满足定理7假设且不含反应$2\mathrm{X}_j \longrightarrow 3\mathrm{X}j$ 的三分子网络不可能具有孤立周期轨道。这促使我们研究含有 $2\mathrm{X}_j \longrightarrow 3\mathrm{X}j$的网络。

从 Lotka 反应 (1) 出发，并将线性自催化步骤 $\mathsf{X} \longrightarrow 2\mathsf{X}$ 替换为二次自催化步骤 $2\mathsf{X} \longrightarrow 3\mathsf{X}$，我们得到系统

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X} + \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 2\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= \kappa_2 xy - \kappa_3 y, \end{aligned} \tag{19}$$

该系统称为 Lotka–Volterra–自催化器（LVA） [12, 式 (8)], [26, 式 (1)]。如 [12] 利用李雅普诺夫函数所示，正平衡点是全局排斥的，因此该系统不可能存在周期轨道。LVA 属于一个网络族，我们称之为“广义 LVA”，即

$$\begin{array}{c} 2\mathsf{X} \xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} \xrightarrow{\kappa_2} (d+1)\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} \xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{array} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= d\kappa_2 xy - \kappa_3 y, \end{aligned} \tag{20}$$

其中 $d \geq 1$。由 (17)和(18)，我们发现，在广义 LVA系列中任意系统的唯一正平衡点处，$\det J > 0$ 和 $\operatorname{tr} J > 0$，因此它是排斥子。事实上，通过使用Dulac函数 $\frac{1}{xy}$ （如引理4的证明中所述），可以看出，(20) 中的网络不可能具有周期轨道。

广义 LVA 的独特之处将在下文的引理 8 中显现出来 .

4.3 定理7的证明

为证明定理7，考虑一个具有两个物种、三个反应、三分子且为二次网络的网络。还假设该网络秩为二、动力学非平凡，并且源复合物张成一个三角形（如第4.1节所述，这些都是相关质量作用微分方程具有周期轨道的必要条件）。现在我们区分两种情况。一方面，如果 2X $\longrightarrow$ 3X和2Y $\longrightarrow$ 3Y均不存在，那么注意到，一个包含两个物种的秩为二网络显然没有平凡物种，由推论 5 可知，该系统不具有孤立周期轨道。另一方面，如果其中一个反应存在，那么根据下面的引理8，该系统不具有周期轨道。因此，只要证明引理 8，定理7的证明就完成了。

引理 8. 假设一个 (2, 3, 2) 网络 (13) 包含反应 2X $\longrightarrow$ 3X，并满足上述条件（即它是二次、三分子、动力学非平凡的，且其源复合物张成一个正向定向三角形）。设 J 为相应质量作用系统在唯一正平衡点处的雅可比矩阵。那么，或者

(a) $\det J < 0$ （该平衡态是一个鞍点）；或

(b) $\det J > 0$，且该网络属于广义 LVA 族 (20)。

因此，该系统不存在周期轨道。

证明。引理的假设意味着 $c_1 = 1$ 和 $d_1 = 0$，因此微分方程 (14) 可写为

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 + c_2\kappa_2 x^{a_2} y^{b_2} + c_3\kappa_3 x^{a_3} y^{b_3}, \\ \dot{y} &= \qquad d_2\kappa_2 x^{a_2} y^{b_2} + d_3\kappa_3 x^{a_3} y^{b_3}. \end{aligned}$$

如果 $\det J < 0$，那么系统不具有周期轨道（见第 3.1 节）。现在假设 $\det J > 0$。那么$u \in \mathbb{R}^3_+$，见（17）。由于 $c_1 = 1$ 和 $d_1 = 0$，由（16）可得，$u_2 = -d_3 > 0$ 和 $u_3 = d_2 > 0$。根据（15），源(a_3, b_3) 是(0, 0)、(1, 0) 或(0, 1) 中的一个，但只有在后一种情况下 d_3 才可能为负。因此，(a_3, b_3) =(0, 1) 且 $d_3 = -1$。此外，还可推出 $c_3 \geq 0$。于是 $u_1 = c_2 d_3 - c_3 d_2 > 0$ 意味着$c_2 < 0$，因此 (a_2, b_2) =(1,1)且 $c_2 = -1$（这里再次使用了（15））。那么 $u_1 = 1 - c_3 d_2 > 0$，从而 $c_3 = 0$。因此，该网络属于广义 LVA族（20），并且根据第 4.2 节中的讨论，该系统不具有周期轨道。 □

4.4 关于定理7的讨论

根据下面的定理 10，定理7的结论对具有任意数量物种的系统均成立。然而，正如我们现在通过示例说明的那样，对反应数量以及（源和生成物）分子数的限制不能被取消。以下三个平面网络中的每一个

$$\begin{aligned} 2X &\xrightarrow{\kappa_1} 3X \\ X+Y &\xrightarrow{\kappa_2} 2Y \\ Y &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \\ Y &\xrightarrow{\kappa_4} X \end{aligned} \qquad \begin{aligned} 0 &\xrightarrow{\kappa_1} X \\ X+2Y &\xrightarrow{\kappa_2} 3Y \\ Y &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} 2X &\xrightarrow{\kappa_1} 3X+Y \\ X+Y &\xrightarrow{\kappa_2} Y \\ Y &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned}$$

存在超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔，从而存在稳定极限环。左侧是通过向LVA（19）添加一个反应而得到的四反应二次三分子质量作用系统；中间是称为塞尔科夫振荡器 [25]的三反应三次质量作用系统；右侧是曾作为（4）出现的三反应二次四分子质量作用系统，并且是

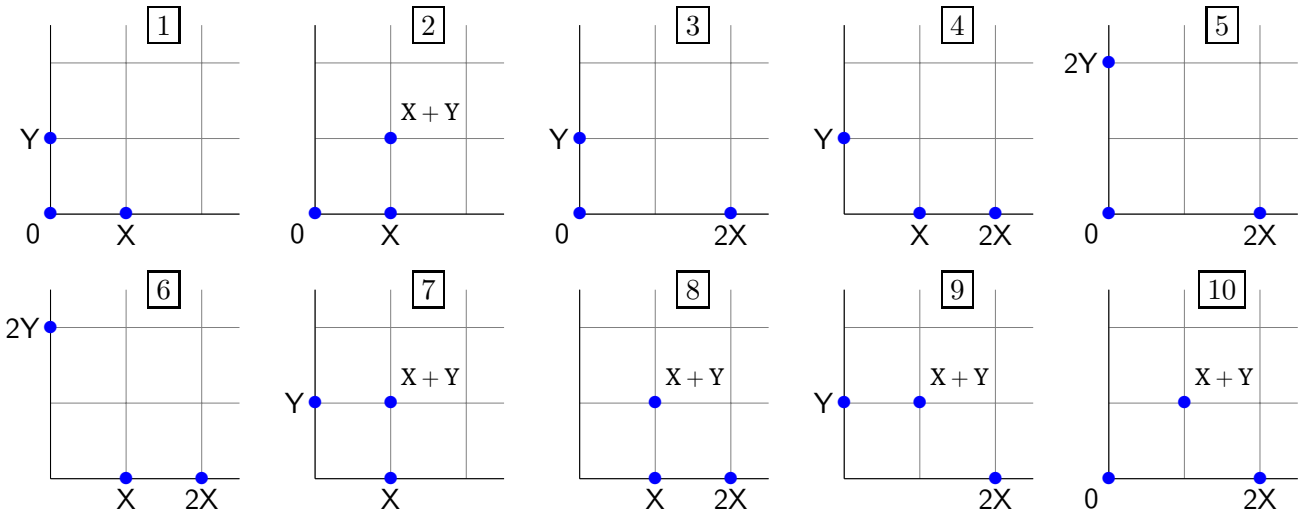
下文族（22）中最简单的成员。这些网络中的分岔分别发生在 $\kappa_3 = \kappa_4$、 $\kappa_2 = \kappa_3\overline{\kappa_1^2}$和 $\kappa_1 = \kappa_2$处。对这[3]三个系统的分析均在 [7]中进行。

4.5 安德罗诺夫–霍普夫分岔

本小节致力于找出所有存在安德罗诺夫–霍普夫分岔的三反应平面二次质量作用系统，其中一对复共轭特征值随参数变化穿过虚轴，参见例如 [13, 第7.2] 节或 [17, 第3.4]节。根据定理7，允许此类分岔的网络必然具有分子数至少为四的目标复合物。若该分岔是超临界的，则会诞生一个稳定极限环。在退化情形中（例如在线性系统 [17, 图3.9]中），在临界分岔参数处存在周期解的单参数族（一个中心），我们将这一现象称为垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。

我们首先枚举两个物种上所有可能的（至多）双分子源复合物构型。然后，对于每种构型，我们找出满足上述振荡必要条件的网络，包括网络必须是动力学非平凡的，以及雅可比矩阵在正平衡点处的行列式和迹所满足的条件。对于具有给定源复合物且满足这些必要条件的网络集合非空的情形，我们找出其中哪些网络存在安德罗诺夫–霍普夫分岔，并确认该分岔是否为非退化分岔。

除交换X 和 Y外，选择三个不共线的双分子源复合物共有十种方式。这些方式如下图所示：



下文的定理9分析了这十种可能性，可以将其视为我们关于三反应平面二次网络的第二个主要结果。我们发现，在情形 1 至 6中，质量作用系统不具有周期轨道。在情形7 至 10 中，我们找到了具有周期轨道的系统，但只有在情形9 和10 中，这些周期轨道才是孤立的。注意，在定理关于情形7至10 的表述中，我们列出源复合物，使得它们张成一个正向定向三角形。

定理9。 对于三反应平面二次质量作用系统，以下结论成立。 .

- 情形 1 至 6。该系统不存在周期轨道。
- 情形 7 X,X +Y, Y。系统对于所有 κ 都有一个作为中心的正平衡点，如果

$$c_3 = 0,\ d_1 = 0,\ \operatorname{sgn} c_1 = -\operatorname{sgn} c_2 = -\operatorname{sgn} d_1 = \operatorname{sgn} d_2 \neq 0.$$

  否则，该系统不存在周期轨道。

- 情形 8 2X, X + Y, X. 系统存在周期轨道，当且仅当

$$c_1 > 0,\ c_2 = -1,\ c_3 > 0,\quad d_1 > 0,\ d_2 = -1,\ d_3 \geq 0,\quad \frac{d_3}{c_3} < 1 < \frac{d_1}{c_1},\ and\ \kappa_1 c_1 + \kappa_2 d_2 = 0.$$

  在这种情况下，系统具有一个中心的正平衡点，并且通过改变比值 $\frac{\kappa_1}{\kappa_2}$，可以得到一个垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。

- 情形 9 2X, X + Y, Y。系统发生安德罗诺夫–霍普夫分岔，当且仅当

$$c_1 > 0,\ c_2 = -1,\ c_3 > 0,\quad d_1 > 0,\ d_2 \geq -1,\ d_3 \geq -1,\quad \frac{1}{2}\left(\frac{d_3}{c_3} + \frac{d_1}{c_1}\right) < \frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}\ or$$
$$c_1 > 0,\ c_2 = -1,\ c_3 = 0,\quad d_1 > 0,\ d_2 \geq -1,\ d_3 = -1,\quad \frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}.$$

  此外，安德罗诺夫–霍普夫分岔是超临界的。

- 情形 10 2X, X +Y, 0。当且仅当系统存在安德罗诺夫–霍普夫分岔

$$c_1 > 0,\ c_2 = -1,\ c_3 > 0,\quad d_1 > 0,\ d_2 = -1,\ d_3 \geq 0,\quad \frac{1}{2}\left(\frac{d_3}{c_3} + \frac{d_1}{c_1}\right) < \frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}.$$

  此外，安德罗诺夫–霍普夫分岔是超临界的。

证明。我们首先注意到，只要情形 1 至 10 中的网络是动力学非平凡的，它们就是非退化的，并且根据引理 2，每个相应的质量作用系统对于任意速率常数的选择都具有唯一的正的平衡点。另一方面，如果一个网络在动力学上是平凡的，那么相应的质量作用系统不可能存在周期轨道。

- 情形 1至 6。反设系统存在一个周期轨道。首先，我们证明不存在形如 (9)的反应。然后我们论证该微分方程不是形如 (10)的，因此得出矛盾。在情形1 和2 中，网络显然不可能含有形如 (9) 的反应。在情形 3至6中，令第一个源为2X，第二个源为Y（情形3和4）或2Y（情形5和6）。在所有情形中，$a_2 = b_1 = b_3 = 0$，从而， c_2、 d_1、 $d_3 \geq 0$。由于根据假设存在一个周期轨道，网络必须是动力学非平凡的，因此 $d_2 < 0$ 成立。此外，在唯一正平衡点处计算的雅可比行列式必须为正的，因此

因此， $0 < u_3 = c_1 d_2 - c_2 d_1$ (见(16))，这意味着 $c_1 < 0$。由于 c_1 和 d_2 均为负数，事实上不存在形如(9)的反应。

然后，根据引理 4，相关的质量作用系统是没有对角项的 Lotka–Volterra型系统。特别地，只有源为 Y或 X +Y 的反应才能对 $\dot{y}$ 作出贡献。然而，由于在全部六种情况下最多只有一个这样的源，即 $\dot{y} \geq 0$ 或 $\dot{y} \leq 0$。

• 情形 7 X, X +Y, Y. 微分方程为

$$\dot{x} = c_1\kappa_1 x + c_2\kappa_2 xy + c_3\kappa_3 y,$$
$$\dot{y} = d_1\kappa_1 x + d_2\kappa_2 xy + d_3\kappa_3 y$$

其中 c_3、 $d_1 \geq 0$。乘以Dulac函数（xy）$^{-1}$后，散度为 $-c_3\kappa_3 x^{-2} - d_1\kappa_1 y^{-2}$，这是非正的，且仅当 $c_3 = d_1 = 0$时为零。因此，若 $c_3 = d_1 = 0$ 不成立，则根据Bendixson–Dulac判别法，该系统不具有周期轨道。情形$c_3 = d_1 = 0$ 是标准的：参见引理 4和引理6的证明。

• 情形 8 2X, X +Y, X. 除以 x 后，微分方程为

$$\dot{x} = c_1\kappa_1 x + c_2\kappa_2 y + c_3\kappa_3,$$
$$\dot{y} = d_1\kappa_1 x + d_2\kappa_2 y + d_3\kappa_3$$

其中 $d_1 \geq 0$ 且 $d_3 \geq 0$ （因为 $b_1 = 0$ 且 $b_3 = 0$）。该线性系统具有一个周期轨道（事实上是一个中心），当且仅当存在唯一的正平衡点，在该点 $\det J > 0$，且 $\operatorname{tr} J = 0$。

假设该系统存在一个周期轨道。则 $d_2 < 0$ （否则 $\dot{y} \geq 0$ 在 $\mathbb{R}^2_+$中）。由于$\operatorname{tr} J = c_1\kappa_1 + d_2\kappa_2$，我们得到 $c_1 > 0$。因此，由 $u_3 > 0$ （见（17））可得 $c_2 d_1 < 0$，这意味着$d_1 > 0$ 和 $c_2 < 0$。由 $u_2 > 0$ 可知 $c_3 > 0$。事实上，由于另外还有 c_2， $d_2 \geq -1$（因为 $a_2 = b_2 = 1$）， c_2 和 d_2 都等于 -1。这给出了定理陈述中关于 c_i、 d_i 的所有符号条件。不等式$\frac{d_3}{c_3} < 1 < \frac{d_1}{c_1}$等价于 u_1、 u_2、 $u_3 > 0$。因此，陈述中的条件对于周期解的存在性而言是充分且必要的。

显然，通过变化 通过比值 $\frac{\kappa_1}{\kappa_2}$，在 $\frac{\kappa_1}{\kappa_2} = -\frac{d}{c}$ 处得到一个垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。 $\frac{2}{1}$.

• 情形92X,X + Y,Y.对于 (14) 中的安德罗诺夫–霍普夫分岔，必须存在唯一的正平衡点$(\bar{x}, \bar{y})$，在该点处 $\det J > 0$且 $\operatorname{tr} J = 0$成立。由 (18)可得， $\operatorname{tr} J = \mu\left(\frac{1}{\bar{x}}(c_1 u_1 - c_3 u_3) - \frac{1}{\bar{y}} d_1 u_1\right)$，其中我们使用了一般性观察，即 $\sum_{i=1}^3 c_i u_i = 0$ 且 $\sum_{i=1}^3 d_i u_i = 0$ （回忆 $u = c \times d$）。情形 $d_1 = 0$。在此情形下，当且仅当 $c_1 u_1 = c_3 u_3$时，$\operatorname{tr} J = 0$。因此， $c_1 > 0$ 且 $c_3 > 0$ （$c_3 \geq 0$ 已给出，因为 $a_3 = 0$）。因此， $c_2 = -1$ （因为 $c_2 \geq -1$ 且 $c_2 < 0$）。此外， $d_3 = -1$，因为 $u_2 > 0$意味着 $d_3 < 0$。此外， $d_2 > 0$，因为 $u_3 > 0$。因此， $0 < c_3 d_2 < 1$，因为 $u_1 > 0$。然而，这没有整数解。

情形 $d_1 > 0$。于是 $c_1 u_1 > c_3 u_3$，因此， $c_1 > 0$ 与 $c_2 < 0$ （事实上， $c_2 = -1$）。若 $c_3 = 0$，我们发现 $u_i > 0$ 等价于 $d_1 > 0$、 $d_3 < 0$ 和 $\frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}$。若 $c_3 > 0$，我们发现 $u_i > 0$ 与 $c_1 u_1 > c_3 u_3$ 等价于 $\frac{1}{2}\left(\frac{d_3}{c_3} + \frac{d_1}{c_1}\right) < \frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}$。

为看出安德罗诺夫–霍普夫分岔是非退化的，且事实上是超临界的，可计算第一焦点值并发现其为负。计算详见 Mathematica 笔记本 [7] 。

• 情形 10 2X, X +Y, 0。与情形 9 的证明一样，要使安德罗诺夫–霍普夫分岔发生，必须存在唯一的正平衡点 $(\bar{x}, \bar{y})$，使得 $\det J > 0$与 $\operatorname{tr} J = 0$ 成立。

根据式（18），$\operatorname{tr} J = \mu\left(\frac{1}{\bar{x}}(c_1 u_1 - c_3 u_3) + \frac{1}{\bar{y}} d_2 u_2\right)$，其中我们使用了 $\sum_{i=1}^3 c_i u_i = 0$（回想一下， $u = c \times d$）。

由于 d_1、d_2 或 d_3 中至少有一个必须为负（因为网络必须是动力学非平凡的），我们得到 $d_2 = -1$。随后，$c_1u_1 > c_3u_3$ 意味着 $c_1 > 0$。因此，$c_2 = -1$。由于 $u_1 > 0$，我们还得到 $c_3 > 0$。然后，如同证明情形9 时一样，我们发现，系统存在安德罗诺夫–霍普夫分岔，当且仅当 $\frac{1}{2}\left(\frac{d_3}{c_3} + \frac{d_1}{c_1}\right) < \frac{d_2}{c_2} < \frac{d_1}{c_1}$成立。

第一焦点值为负这一点在 [7] 中再次得到证明。因此，安德罗诺夫–霍普夫分岔是超临界的。

□

4.6 定理9中振荡系统的实现

在情形 7 中，除交换 X 和 Y 外，对于所有 κ 具有中心的质量作用系统由

$$\begin{aligned} \mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} (1+c)\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} (1+d)\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 cx - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= \kappa_2 dxy - \kappa_3 y \end{aligned} \tag{21}$$

其中 c、$d \geq 1$。注意，这是引理6中得到的网络族之一，即（11），该网络族也出现在 [12, 方程（5）] 中。对于 $c = d = 1$，该网络是双分子网络，事实上就是 Lotka反应（1）。由于对于所有 κ，定性图景都相同，因此当 κ 发生变化时，这些系统不会出现分岔。

在情形8中，没有任何四分子网络会发生垂直安德рон诺夫–霍普夫分岔。五分子示例为

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X}+2\mathsf{Y} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 0 \\ \mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_3} (1+c)\mathsf{X}+d\mathsf{Y} \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy + c\kappa_3 x, \\ \dot{y} &= 2\kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy + d\kappa_3 x, \end{aligned}$$

其中 $0 \leq d < c$ 和 $c + d \leq 4$。

情形 9 中能够发生安德罗诺夫–霍普夫分岔的四分子网络为

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X}+\mathsf{Y} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} (1+d)\mathsf{Y} \\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy, \\ \dot{y} &= \kappa_1 x^2 + d\kappa_2 xy - \kappa_3 y \end{aligned} \tag{22}$$

其中 $d = 0$、1、2、3。

在情形 10 中，没有六分子网络能够发生安德罗诺夫–霍普夫分岔。七分子实例为

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 4\mathsf{X}+3\mathsf{Y} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 0 \\ 0 &\xrightarrow{\kappa_3} c\mathsf{X}+d\mathsf{Y} \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= 2\kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy + c\kappa_3, \\ \dot{y} &= 3\kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy - d\kappa_3, \end{aligned} \tag{23}$$

其中 $c > 0$、$d \geq 0$、$c + d \leq 7$ 和 $\frac{d}{c} < \frac{1}{2}$。

5 三反应二次三分子系统的分析

本节的主要目标是将定理7推广到任意数量的物种，从而得到定理1，即不存在具有孤立周期轨道的三反应、二次、三分子质量作用系统。事实上，我们在定理 10 中证明了更强的结果，完整刻画了这一类中存在周期轨道的质量作用系统。

由第 2.4 节可知，一个容许周期轨道的三反应质量作用系统必须具有秩为二。因此我们关注 (n, 3, 2) 系统。在第 5.1 节中，我们通过一个例子表明，带有 $n \geq 3$ 的 (n, 3, 2) 质量作用系统在一个化学计量类中可以有多个孤立正平衡点，这一现象在 $n = 2$ 时不会出现，并使一般情形略为更加复杂。在第5.2 节中，我们研究一个与广义 LVA (20) 相关的网络族，它在定理 10 中起重要作用。在第 5.3 节中，我们陈述并证明我们的主要结果，即定理 10。该证明使用了三条在第 5.4 节中陈述并证明的引理。

5.1 平衡点的数量

对于 (2, 3, 2) 网络，根据引理 2，只要存在一个孤立正平衡点，对于 κ 的每种取值，就恰好存在一个正平衡点。对于具有 $n \geq 3$ 的 (n, 3, 2) 网络，孤立正平衡点的数量可能取决于所讨论的正化学计量类。事实上，即使某个平衡态在其化学计量类中唯一，它也可能是退化的。为说明这些结论，考虑双分子 (3, 3, 2) 质量作用系统。

$$\begin{aligned} \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_1} 2\mathsf{Z} & \dot{x} &= 2\kappa_2 z^2 - \kappa_1 xy, \\ 2\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_2} 2\mathsf{X} & \dot{y} &= \kappa_3 z - \kappa_1 xy, \\ \mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} \mathsf{Y} & \dot{z} &= 2\kappa_1 xy - 2\kappa_2 z^2 - \kappa_3 z. \end{aligned}$$

正平衡点的集合是双曲线 $\{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3_+ : \ xy = \frac{\kappa_3^2}{2\kappa_1\kappa_2}、\ z = \frac{\kappa_3}{2\kappa_2}\}$，而正化学计量类是 $\mathcal{P}_C = \{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3_+ : \ x+y+z = C\}$ 对于 $C > 0$。对于任意固定的速率常数， $\mathcal{P}_C$ 中的正平衡点数量为0、1或 2，具体取决于 C。事实上，该系统存在平衡点的折叠分岔，而对于 (2,3,2) 质量作用系统则排除了这种现象。

5.2 Lifted LVA

我们在本小节研究的网络在主要结果定理 10 中发挥着特殊作用。我们考虑这一族质量作用系统。

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X} & \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy, \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} (d+1)\mathsf{Y} + d\mathsf{Z} & \dot{y} &= d\kappa_2 xy - \kappa_3 yz, \\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 & \dot{z} &= d\kappa_2 xy - \kappa_3 yz \end{aligned} \tag{24}$$

其中 $d \geq 1$。该族中的每个成员都是通过向广义LVA族（20）中的网络添加一种新物种 Z，同时保持网络的秩而得到的。 $d = 1$ 的情形对应于 Lifted LVA（3），因此我们将（24）中的网络称为“ LiftedLVA 族”。请注意，Lifted LVA 是该族中唯一的三分子网络。

注意到，Lifted LVA 族中的网络显然没有平凡物种，因此相应质量作用系统的任何周期轨道都必定是正的（见第 3.1 节），我们可以将讨论限制在正正交象限内。方程 (24) 的正平衡点集合为射线 $\{(t, \frac{\kappa_1}{\kappa_2}t, \frac{\kappa_2 d}{\kappa_3}t) : \ t > 0\}$。由于 $\dot{y} = \dot{z}$，化学计量类由平面 $z = y + C$ 给出。因此，在

一个正化学计量类的局部坐标中，微分方程 (24) 化简为二维 Lotka–Volterra 系统

$$\begin{aligned}\dot{x} &= x(\kappa_1 x - \kappa_2 y),\\ \dot{y} &= y(d\kappa_2 x - \kappa_3(y + C)).\end{aligned} \tag{25}$$

为分析 (25)，我们应用坐标变换 $v = \frac{y}{x}$, $w = \frac{1}{x}$，它将 $\mathbb{R}^2_+$ 变为 $\mathbb{R}^2_+$；再乘以 w后，将 (25) 化为 Lotka–Volterra 系统

$$\begin{aligned}\dot{v} &= v((d\kappa_2 - \kappa_1) + (\kappa_2 - \kappa_3)v - \kappa_3 C w),\\ \dot{w} &= w(-\kappa_1 + \kappa_2 v).\end{aligned} \tag{26}$$

当且仅当 $C > 0$ 和 $d\kappa_2^2 > \kappa_1\kappa_3$时，方程 (26) 存在正平衡点；此时正平衡点 $(\bar{v}, \bar{w})$ 唯一，且系统在该平衡点处的雅可比行列式为正。对于 $C > 0$，捕食者–猎物系统 (26) 有一个李雅普诺夫函数 $V(v, w) = \kappa_2(v - \bar{v}\log v) + \kappa_3 C(w - \bar{w}\log w)$，该函数为凸函数，在 $(\bar{v}, \bar{w})$ 处取得唯一的最小值，并满足$\dot{V} = \kappa_2(\kappa_2 - \kappa_3)(v - \bar{v})^2$，（例如参见 [16, 第 2.7] 节）。因此，当 $\kappa_2 < \kappa_3$ 时，正平衡点是全局渐近稳定的（在 $\mathbb{R}^2_+$ 上）；当 $\kappa_2 = \kappa_3$ 时，它是全局中心；当 $\kappa_2 > \kappa_3$ 时，它是全局排斥子。因此，随着 $\frac{\kappa_2}{\kappa_3}$ 增大并经过 1，在满足 $\kappa_1 < d\kappa_2$ 的条件下，Lifted LVA 族 (24) 中的系统会发生垂直安德罗诺夫–霍普夫分岔。该现象同时发生于所有满足 $C > 0$ 的化学计量类中。特别地，该族中不可能出现孤立周期轨道。

5.3 主要结果

现在我们可以陈述主要结果了。除了已经证明的结果外，证明还依赖于三个引理，这些引理将在第 5.4 节中陈述并证明。

定理 10. 假设一个不含平凡物种的三反应、二次、三分子质量作用系统存在一个周期轨道。那么，在对物种进行置换后，其微分方程必为以下形式之一。

(I)	*(II)*	*(III)*
$\dot{x} = x(\kappa_1 c - \kappa_2 y)$	$\dot{x} = x(\kappa_1 z - \kappa_2 y)$	$\dot{x} = x(\kappa_1 x - \kappa_2 y)$
$\dot{y} = y(\kappa_2 d x - \kappa_3)$	$\dot{y} = y(\kappa_2 x - \kappa_3 z)$	$\dot{y} = y(\kappa_2 x - \kappa_2 z)$
	$\dot{z} = z(\kappa_3 y - \kappa_1 x)$	$\dot{z} = y(\kappa_2 x - \kappa_2 z)$
$\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3 > 0$	$\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3 > 0$	$0 < \kappa_1 < \kappa_2$
$c, d \in \{1, 2\}$		

注意

- 方程 (I) 是广义 Lotka 常微分方程 (21)，其唯一的正平衡点是一个全局中心，
- 方程 (II) 是 Ivanova 常微分方程 (2)，在每个正化学计量类 $x + y + z = C > 0$中，唯一的正平衡点是一个全局中心，
- 方程 (III) 是提升的 LVA 常微分方程 (3)，其中 $\kappa_2 = \kappa_3 > \kappa_1$，且每个正化学计量类 $z - y = C > 0$ 中的唯一正平衡点是一个全局中心，而正化学计量类 $z - y = C \leq 0$中不存在正平衡点。

特别是，满足该定理条件的质量作用系统不存在孤立周期轨道。

证明。回顾第 2.4 节，若一个三反应网络的质量作用系统存在周期轨道，则该网络的秩为二。因此，根据第 3.1 节中的说明，该网络必定是动力学非平凡的，并且满足该定理假设的系统的任何周期轨道都必须是正的。我们分两种情况讨论。

- 如果网络中没有反应具有$2X_i \to 3X_i$的形式，根据引理6，我们发现该网络要么是带有 c、$d \in \{1,2\}$ 的广义 Lotka 反应 (11)，从而导致(I)；要么是 Ivanova反应，从而导致 (II)。注意，(12) 中的网络均不是三分子。

- 现在假设存在反应 $2X \to 3X$。若有三个物种，则根据下文的引理 11 和第 5.2 节中的讨论，微分方程为 (III)。若有两个、四个或至少五个物种，则根据引理8、12和13，系统不存在周期轨道。

□

注意，定理1是定理 10的推论。此外，定理 10将定理7推广到了任意数量的物种。事实上，尽管定理 10中的所有网络都假设没有平凡物种，但三反应、二次、三分子的质量作用系统不具有孤立周期轨道这一结论显然在没有该假设的情况下仍然成立。基于定理10，我们可以列出所有其质量作用系统具有周期轨道的三反应、二次、三分子（n，3，2）网络（包括含有某些平凡物种的网络）：共有16个这样的网络，见图1。

$X \longrightarrow 2X$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X \longrightarrow 2X$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$	$X \longrightarrow 3X$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X \longrightarrow 3X$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$
$X \longrightarrow 2X$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X \longrightarrow 2X$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$	$X \longrightarrow 3X$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X \longrightarrow 3X$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$
$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$	$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y+W \longrightarrow W$	$Z+X \longrightarrow 2X$ $X+Y \longrightarrow 2Y$ $Y+Z \longrightarrow 2Z$
$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y \longrightarrow 0$	$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y+Z \longrightarrow Z$	$X+Z \longrightarrow 2X+Z$ $X+Y \longrightarrow 3Y$ $Y+W \longrightarrow W$	$2X \longrightarrow 3X$ $X+Y \longrightarrow 2Y+Z$ $Y+Z \longrightarrow 0$

图1：所有三反应、二次、三分子（n, 3, 2）网络的列表；对于某些速率常数，这些网络的质量作用系统具有周期轨道。此类网络共有十六个。其中四个属于族（21），八个是在这些网络中加入一个平凡物种得到的，另两个则是加入两个平凡物种得到的。后两个是唯一具有四个物种的网络。Ivanova 反应和 Lifted LVA 补全了这份列表。请注意，唯一的双分子网络是 Lotka 反应（1）和 Ivanova 反应（2）。

5.4 具有反应 2X $\rightarrow$ 3X 的网络

在本小节中，我们证明关于不含平凡物种、包含反应 2X $\rightarrow$ 3X 的二次（n,3, 2）网络的三个引理；这些结果用于上文定理 10 的证明中。引理 11 讨论 $n = 3$ 的情形，并证明能够产生周期轨道的唯一网络是 Lifted LVA 族（24）中的网络。引理 12 证明，当 $n = 4$ 时，任何正平衡点都必定是鞍点。最后，引理 13 得出，当 $n \geq 5$ 时，没有网络存在正平衡点。

引理 11. 假设一个不含平凡物种的二次(3,3,2) 质量作用系统包含反应2X $\rightarrow$ 3X，并且对于某些速率常数存在周期轨道。那么该网络是 Lifted LVA 族 (24) 的成员。

证明。考虑一个满足该引理假设的网络。任何周期轨道都必须是正的，并且该网络必须是动力学非平凡的（见第 3.1 节）；因此，每个物种至少在一个反应中增加，并且至少在一个反应中减少。在 2X $\rightarrow$ 3 X 中，一个 X增加了。不失一般性地，假设 X在第二个反应中减少。那么，该反应的源要么是X，要么是 X +Y（注意，第二个源不可能是 2X，这是由引理 3 得出的）。此外，该反应的生成物不包含 X。

假设第二个反应的源是X。由于该网络是动力学非平凡的，第三个反应必须是Y +Z $\rightarrow$ aX（对于某个 $a \geq 0$）。为保证该网络的秩为二，第二个反应随后必须是 X $\rightarrow$ bY + bZ（对于某个 $b \geq 1$）。由于ker Γ 由 $[1 - ab, 1, 1]^\top$张成，该网络是动力学非平凡的，当且仅当 $a = 0$。简短计算表明，在正平衡点（x, y, z）处，约化雅可比行列式（7）等于 $-\frac{b}{xy} - \frac{b}{xz}$，其为负。因此，任何正平衡点都是鞍点，这与周期轨道的出现相矛盾（见第 3.1 节）。

现在假设第二个反应的反应物为 X + Y，并进一步假设该反应中 Y 有所损失。那么第三个反应中 Y 有所增加。此外，第二个反应中 Z 必须有所增加，而第三个反应中 Z 必须有所损失。该网络的一般形式为

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\longrightarrow 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X} + \mathsf{Y} &\longrightarrow c\mathsf{Z} \\ \alpha\mathsf{X} + \beta\mathsf{Y} + \gamma\mathsf{Z} &\longrightarrow (\alpha + a)\mathsf{X} + (\beta + b)\mathsf{Y} + (\gamma - bc)\mathsf{Z} \end{aligned}$$

其中，化学计量系数 $\gamma - bc$ 的取值确保秩为 $\Gamma = 2$。参数满足

$$b \geq 1, c \geq 1, \gamma \geq 1, \alpha + \beta \leq 1.$$

考察化学计量矩阵可知，当且仅当 $b - a > 0$ 时，该网络是动力学非平凡的（回忆一下， $b \geq 1$）。简单计算可得，正平衡点（x、 y、 z）处的约化雅可比行列式 (7) 等于

$$-(b - a)b\left(\frac{2 - \alpha - \beta}{xy} + \frac{c\gamma}{xz}\right),$$

该值为负，即该平衡态是一个鞍点。这与周期轨道的存在相矛盾（见第 3.1 节）。

最后，假设第二个反应的反应物为 X +Y，并进一步假设该反应中 Y 有所增加。再考虑到该网络是动力学非平凡的且秩为二，该网络必属于 Lifted LVA 族 (24)。

□

引理 12. 假设一个不含平凡物种的二次(4,3, 2)质量作用网络包含反应 2X $\rightarrow$ 3X，并且具有正平衡点。那么该网络是

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\longrightarrow 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X} + \mathsf{Y} &\longrightarrow \mathsf{Z} + \mathsf{W} \\ \mathsf{Z} + \mathsf{W} &\longrightarrow \mathsf{Y} \end{aligned} \tag{27}$$

对于速率常数的任意选择，相应的质量作用系统在每个正化学计量类中恰有一个正平衡点，且该平衡点是鞍点。因此，该系统不允许存在周期轨道。

证明。考虑一个满足该引理假设的网络。在 2X $\to$ 3X 中，物种 X 被获得，因此，由于该网络容许正平衡点，从而必定是动力学非平凡的，必须存在一个失去 X 的反应。该反应的源必须是 X、2X 或 X +Y。

若第二个反应的源是 X 或 2X，则物种 Y、Z、W 只能在该反应中被获得。然而，此时 Y、Z、W 中的每一个都必须在第三个反应中失去，这在二次网络中是不可能的。

若第二个反应的源是 X + Y，则物种 Z 和 W 只能在第三个反应中失去，该反应的源必须是 Z +W。于是该网络的一般形式为

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\longrightarrow 3\mathsf{X} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\longrightarrow c\mathsf{Z}+d\mathsf{W} \\ \mathsf{Z}+\mathsf{W} &\longrightarrow a\mathsf{X}+b\mathsf{Y} \end{aligned}$$

其中 a、b、c、$d \geq 0$。我们容易发现，该网络是动力学非平凡的当且仅当 $a = 0$ 且$b = c = d = 1$，由此得到网络 (27)。通过简短计算可知，该网络在每个正化学计量类中都有唯一的正平衡点。注意，网络 (27) 在第3.3节中被用作说明性例子，我们在那里得出结论：任何正平衡点都是鞍点。因此，根据第 3.1 节中的观察，该系统不存在周期轨道。 □

引理 13. 对于 $n \geq 5$，任何不含平凡物种且包含反应 2X $\to$ 3X 的 (n, 3, 2) 网络，都必定是动力学平凡的。因此，相应的质量作用系统不允许存在周期轨道。

证明. 如引理 11 和 12 证明开头所述，第一和第二个反应的源复合物总共最多涉及两种物种。此外，由于源复合物具有双分子性，第三个反应的源复合物也至多包含两种不同的物种。因此，至少有一种物种不会出现在任何源复合物中，其浓度是非递减的。根据假设，该物种不是平凡物种，因此该网络在动力学上是平凡的，且不允许存在周期轨道（见第 3.1 节）。 □

6 结论

本文研究了含有三个反应的二次网络，并确定了此类网络中所有允许存在周期轨道的三分子质量作用系统。在所有这些系统中，周期轨道附近的任意轨道也都是周期轨道。因此，含有三个反应的二次质量作用系统若存在孤立周期轨道，则至少有一个目标复合物的分子数为四或更多。事实上，在双物种情形下（不对目标复合物的分子数作任何假设），我们对所有允许出现非退化安德罗诺夫–霍普夫分岔、进而产生极限环的网络进行了分类，见定理9中的情形 和 10。然而，情形 9 和 10 中不发生安德罗诺夫–霍普夫分岔的网络是否可能存在极限环，仍是一个开放问题。例如，我们不知道系统

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X}+2\mathsf{Y} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 0 \\ \mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_3} \mathsf{X}+\mathsf{Y} \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= \kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy + \kappa_3 y, \\ \dot{y} &= 2\kappa_1 x^2 - \kappa_2 xy \end{aligned}$$

存在一个极限环。

定理9中情形9和10所涉及的网络若允许非退化的安德罗诺夫–霍普夫分岔，则可通过添加一个新的（非平凡）物种来扩展，而网络的秩为

保留了 [5]。所得的二次(3,3,2)网络可通过 [5, 备注 6] 产生超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔。例如，这些网络

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 3\mathsf{X}+\mathsf{Y} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} \mathsf{Y}+\mathsf{Z} \\ \mathsf{Y}+\mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned} \qquad \text{and} \qquad \begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 4\mathsf{X}+3\mathsf{Y}+\mathsf{Z} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 0 \\ \mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} \mathsf{X} \end{aligned} \tag{28}$$

分别由 (22) 配合 $d = 0$ 以及 (23) 配合 $(c, d) = (1, 0)$ 得到，二者均发生超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔，从而存在稳定极限环。我们将其留作开放问题：是否存在二次 (3, 3, 2) 网络（对生成物分子数不作任何假设），其发生非退化的安德罗诺夫–霍普夫分岔，且该分岔并非如这些例子中那样从更小的网络继承而来。

有趣的是，(28) 右侧的八分子网络不仅存在超临界安德罗诺夫–霍普夫分岔，还存在博格丹诺夫–塔肯斯分岔 [17, Section 8.4]，，因此也存在同宿分岔。化学计量类由 $x - y + z = C$ 给出，其中 $C \in \mathbb{R}$；正平衡点的集合是曲线 $\left\{\left(t, \frac{3\kappa_1}{\kappa_2}t, \frac{\kappa_1}{\kappa_3}t^2\right) : \ t > 0\right\}$，它与化学计量类相交于 0、1 或 2 个点。可以验证，对于固定的 $\kappa_2 > 0$ 和 $C < 0$，超临界博格丹诺夫–塔肯斯分岔发生在

$$(\kappa_1, \kappa_3) = \kappa_2 \left(\frac{3+\sqrt{6}}{3}, \frac{-2C}{3+\sqrt{6}}\right).$$

我们以如下观察结束本段：所讨论的八分子网络的质量作用微分方程与.....的相同

$$\begin{aligned} 2\mathsf{X} &\xrightarrow{2\kappa_1} 3\mathsf{X} \\ 2\mathsf{X} &\xrightarrow{3\kappa_1} 2\mathsf{X}+\mathsf{Y} \\ 2\mathsf{X} &\xrightarrow{\kappa_1} 2\mathsf{X}+\mathsf{Z} \\ \mathsf{X}+\mathsf{Y} &\xrightarrow{\kappa_2} 0 \\ \mathsf{Z} &\xrightarrow{\kappa_3} \mathsf{X} \end{aligned}$$

这是一个包含五个反应的三分子系统，其速率常数受到限制。

上一段末尾的构造通常适用：任意二次网络的质量作用微分方程（不对生成物分子数作任何假设）都与某个三分子二次网络的质量作用微分方程完全相同，只是其速率常数受到一些限制。因此，关于具有高生成物分子数的系统的论断，通常可以归约为关于三分子系统的论断，但代价是增加反应的总数。事实上，给定任意质量作用系统，为了获得一个具有三分子生成物的等价系统，我们可以将每个形如

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \mathsf{X}_i \xrightarrow{\kappa} \sum_{i=1}^{n} (a_i + c_i)\mathsf{X}_i \quad \text{with } \sum_{i=1}^{n} (a_i + c_i) \geq 4$$

由（最多） n 个反应组成的系统

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \mathsf{X}_i \xrightarrow{\kappa|c_j|} (a_j + \operatorname{sgn} c_j)\mathsf{X}_j + \sum_{i \neq j} a_i \mathsf{X}_i \quad \text{for } j = 1, \ldots, n \text{ with } c_j \neq 0.$$

例如，三反应四分子网络 (4) 产生与……相同的质量作用微分方程

$$\begin{aligned} 2X &\xrightarrow{\kappa_1} 3X \\ 2X &\xrightarrow{\kappa_1} 2X + Y \\ X + Y &\xrightarrow{\kappa_2} Y \\ Y &\xrightarrow{\kappa_3} 0 \end{aligned}$$

它是三分子的，多一个反应，并且对其速率常数有限制。如本例和第4.4节中的第一个网络所示，存在二次、三分子的(2, 4, 2)网络，在质量作用动力学下容许非退化的安德罗诺夫–霍普夫分岔。在未来的工作中，我们计划找出所有此类网络，并确定相应的质量作用系统中哪些容许博格丹诺夫–塔肯斯分岔。

参考文献

[1] D. Angeli、P. De Leenheer和E. D. Sontag。一种研究化学反应网络中持久性的佩特里网方法。Mathematical Biosciences, 210(2):598–618, 2007.[2]M. Banaji。用NAUTY对化学反应网络进行计数，2017。https://arxiv.org/pdf/1705.10820.pdf.[3] M. Banaji。化学反应网络中振荡的继承。Applied Mathematics and Computation, 325:191–209, 2018.[4]M. Banaji和B. Boros。容许安德罗诺夫–霍普夫分岔的最小双分子质量作用反应网络。Nonlinearity, 36(2):1398–1433, 2023.[5] M. Banaji、B. Boros和J. Hofbauer。向化学反应网络添加物种：保持秩即保持非退化行为。Applied Mathematics and Computation, 426:127109, 2022.[6] M. Banaji和C. Pantea。关于化学反应网络中单射性与多稳态的若干结果。SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 15(2):807–869, 2016.[7] B. Boros。反应网络GitHub代码库，2022。https://github.com/balazsboros/reaction_

网络。

[8] B. Boros 和 J. Hofbauer。《平面缺陷一质量作用系统中的振荡》。Journal of DynamicsandDifferentialEquations，2021。[9] B. Boros和 J. Hofbauer。《质量守恒缺陷一质量作用系统中的极限环》。Electronic Journal of Qualitative Theory of DifferentialEquations, 2022(42)：1–18，2022。[10] B.Boros 和 J.Hofbauer。《一些具有极限环的最小双分子质量作用系统》。非线性分析：现实世界应用，72：103839，2023。[11] G. Craciun。《多项式动力系统、反应网络与环面微分包含》。SIAM JournalonApplied AlgebraandGeometry，3(1)：87–106，2019。[12] H.Farkas 和 Z.Noszticzius。《广义洛特卡–沃尔泰拉方案以及通过“临界”霍普夫分岔构造二维爆炸子核心及其李雅普诺夫函数》。Journal of the ChemicalSociety, FaradayTransactions 2，81：1487–1505，1985。

[13] M. Farkas。《周期运动》，应用数学科学丛书第104卷。施普林格出版社，纽约，1994年。[14] M. Feinberg。化学反应网络结构与复杂等温反应器的稳定性——I. 缺陷零定理与缺陷一定理。《化学工程科学》，42(10):2229–2268，1987年。[15] D. A. Frank-Kamenetsky 和 I. E. Salnikov。关于具有二次自催化作用的均相化学系统发生自激振荡的可能性。《物理化学杂志》，17(1):79–86，1943年。俄文。[16] J. Hofbauer 和 K. Sigmund。《进化博弈与种群动力学》。剑桥大学出版社，1998年。[17] Y. A. Kuznetsov。《应用分岔理论基础》，应用数学科学丛书第112卷。施普林格出版社，纽约，第三版，2004年。[18] R. Lefever 和 G. Nicolis。化学不稳定性与持续振荡。《理论生物学杂志》，30(2):267–284，1971年。[19] M. Y. Li。具有不变线性子空间的自治系统的 Bendixson 判据。《落基山数学杂志》，25(1):351–363，1995年。[20] A. J. Lotka。由质量作用定律导出的无阻尼振荡。《美国化学学会志》，42(8):1595–1599，1920年。[21] Z. Nitecki。由一个函数确定的周期吸引子。《微分方程杂志》，29(2):214–234，1978年。[22] G. P´ota。双组分双分子系统不可能具有极限环：完整证明。《化学物理杂志》，78(3):1621–1622，1983年。[23] G. P´ota。封闭化学系统中动力学方程的不规则行为：振荡效应。《Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2》，81(1):115–121，1985年。[24] J. Schnakenberg。具有极限环行为的简单化学反应系统。《理论生物学杂志》，81(3):389–400，1979年。[25] E. E. Sel’kov。糖酵解中的自振荡。《欧洲生物化学杂志》，4(1):79–86，1968年。[26] P. L. Simon。可逆 LVA 模型。《数学化学杂志》，9(4):307–322，1992年。.[27] E. Stiemke。关于齐次线性方程组的正解。《数学年刊》，76(2-3):340–342，1915年。[28] A. I. Vol’pert 和 S. I. Hudjaev。《不连续函数类与数学物理方程的分析》，力学：分析丛书第8卷。Martinus Nijhoff 出版社，Dordrecht，1985年。[29] T. Wilhelm 和 R. Heinrich。具有 Hopf 分岔的最小化学反应系统。《数学化学杂志》，17:1–14，1995年。[30] P. Y. Yu 和 G. Craciun。化学反应系统的数学分析。《以色列化学杂志》，58(6–7):733–741，2018年。