arXiv:2602.02374v1 [q-bio.MN] 2 Feb 2026

通过学习分岔训练、以切换动力学行为的循环神经化学反应网络

Alexander Dack [1] Tomislav Plesa[2] Thomas E. Ouldridge[1]

关键词: 化学反应网络；动力系统；人工神经网络 s.

摘要：天然和合成化学系统不仅会呈现各种非平凡的动力学，还会随着环境参数变化，在性质截然不同的动力学行为之间转变。这类转变称为分岔。本文表明，循环神经化学反应网络（RNCRN）是一类基于循环人工神经网络的化学反应网络，可通过训练重现给定的动力学行为；它们也能够通过训练呈现分岔。首先，我们展示 RNCRN 能够继承由光滑常微分方程（ODE）定义的某些分岔。其次，我们证明，RNCRN 可以通过训练推断分岔，从而在参数空间的不同区域内近似不同的目标行为，而训练过程中无需明确提供分岔本身。这些行为可以通过相对于参数不连续的目标常微分方程来指定，也可以仅通过指定参数空间某些区域内所需的特定动力学特征来指定。为实现后者，我们提出一种无常微分方程算法，用于训练 RNCRN 呈现定制振荡，例如心形极限环或两个共存的极限环。

1 引言

人们经常观察到，生物实体在处理来自环境的信息 [1] 或经历发育周期时，会在不同的动力学行为之间转换 [2]。例如，在细胞生物学中，细胞会分化，即改变类型，以专门执行特定功能，这一点众所周知 [3]。用动力系统的术语来说，细胞会在不同的动力学状态之间移动，而这些状态能够产生不同的行为并决定细胞的功能。在某些动力系统中，决定动力学状态的是称为参数的外部因素。在生物化学中，这些参数可以理解为反应速率系数，或由外源恒化器设定的浓度。

参数变化引起的动力学行为转换，是数学的一个分支——分岔理论 [4]——的研究对象。这一通用理论将各种转换类型归纳为典型形式 [4] ，并被广泛应用于理解多种生物现象，包括捕蝇草的弹射机制 [5]、生态系统中的捕食者—猎物关系 [6]，以及对大脑神经网络的建模 [7–11]。与本研究尤其相关的是，运用分岔理论的视角，从生物化学层面研究细胞调控 [12–16]。

除了用于模拟自然生物现象外，动力系统还应用于合成生物学和核酸纳米技术领域，这些领域已成功地设计出具有所需动力学行为的生物系统。实例包括神经网络分类算法 [17–24] 以及吸引子轨道 [25–27], ，它们已在多种

[1]伦敦帝国理工学院生物工程系与帝国理工学院合成生物学中心，展览路，伦敦 SW7 2AZ，英国。共同通讯作者邮箱：alex.dack14@imperial.ac.uk 或 t.ouldridge@imperial.ac.uk。[2]剑桥大学应用数学与理论物理系，数学科学中心，威尔伯福斯路，剑桥 CB3 0WA，英国。

分子介质中构建出来。鉴于单一的动力学行为已成功实现，一个自然的问题随之而来：能否将这些组成部分结合起来，设计出具有天然系统中所见复杂切换行为（即分岔）的生物系统?

在这一背景下，一方面，一些研究致力于消除工程系统中的非期望分岔 [28, 29], ，并研究动力学行为的突发且意外变化如何导致灾难性系统故障 [30]。例如，已知这类分岔会在合成生物学控制系统中引发危险事件 [31]。另一方面，人们对受分岔启发的设计范式也日益关注 [32, 33], ，因为分岔有望成为一种极为高效的解决方案，只需对输入进行微小改变，便能实现输出的大幅变化。事实上，已有实验研究 [34, 35] 和理论研究 [36–42] 探讨如何在生化系统中构造分岔。具体而言，文献 [43, 44]提出了设计化学反应网络（CRN）的数学方法；化学反应网络是化学的数学模型，能够实现给定的分岔。所有这些方法均以具有所需分岔结构且足够光滑的动力系统为输入，再将其转换为化学反应网络 [31, 45–50]。

本文提出了构建化学反应网络的方法，使其利用分岔在目标动力学区域之间进行插值；训练前只需指定所需的动力学行为。具体而言，我们的方法基于循环神经化学反应网络（RNCRN）——这是一类以循环神经网络方式运行的化学反应网络，其中快速响应的化学感知器经过训练后可近似任意动力学 [51]。

我们首先证明，当物种数量足够多时，RNCRN 可以经过调整并用于训练，从而重现给定光滑参数依赖动力系统的经典分岔，这与更精简方法的能力相符 [43, 44]。随后我们证明，还可以进一步调整并训练 RNCRN，使其近似并融合给定的、随参数发生不连续变化的动力系统中的不同动力学行为。最后，我们介绍一种训练 RNCRN 的算法，使其近似仅通过极限环形状本身指定的极限环，而无需通过生成极限环的常微分方程来指定，从而能够根据稀疏数据构建多种动力学行为。受化学分类器 [52–60], 成功的启发，我们使用该算法开发了一种扩展型 RNCRN，使其能够感知局部环境、执行非线性分类，并据此在不同动力学状态之间切换。我们指出，这些不连续且稀疏定义的目标系统展现了 RNCRN 在训练数据范围之外进行外推、并在训练数据之间进行插值的能力，从而构建出与预期动力学行为相符且自洽的向量场。

本文分为五个部分。第2节介绍一些背景理论。在第 3 节和附录 A 中，我们证明 RNCRN 可以逼近给定光滑动力系统的分岔。在第4节中，我们设计了能够逼近分段系统的 RNCRN；分段系统是指根据某些外部施加的条件呈现不同动力学行为的非光滑系统。最后，在第5节和附录 C 中，我们证明 RNCRN 可以完全根据相对稀疏的数据构建动力学行为，并展示在这种情况下不同动力学状态之间的切换。

2 背景

化学反应网络（CRN）。质量作用动力学下的化学反应网络（CRN）是一组通过一系列反应相互作用的化学物种，这些反应的速率由速率系数 [61] 参数化。这种对化学的数学抽象常用于合成生物学和 DNA 纳米技术中，对（生物）化学系统进行建模，包括基因调控网络中的双稳态开关 [62], 大肠杆菌的趋化性 [63] 以及生物图案形成 [64]。

例如，化学反应网络

$$X_1 \xrightarrow{\alpha_1} \varnothing, \quad X_1 \xrightarrow{\alpha_2} X_1 + X_1, \quad X_1 + X_1 \xrightarrow{\alpha_3} \varnothing, \tag{1}$$

描述了单一化学物种 X_1，它参与降解、自催化生成和自湮灭，其（无量纲）速率系数分别为 α_1, α_2, $\alpha_3 > 0$，其中 $\varnothing$ 表示一些无关紧要的化学物种。假设化学反应发生在充分混合容器中，且化学物种的丰度很高，则可用质量作用反应速率方程（RRE）对化学反应网络进行确定性建模——这是一组右端为多项式的常微分方程（ODE） [61]。例如，化学反应网络（1）具有相应的反应速率方程

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = (\alpha_2 - \alpha_1)x_1 - \alpha_3 x_1^2, \tag{2}$$

其中，$x_1 = x_1(t) \geq 0$ 是化学物种 X_1随时间变化的分子浓度。

循环神经化学反应网络（RNCRN）。在先前的研究中，作者提出了一种基于人工神经网络（ANN）的化学反应网络，称为循环神经化学反应网络（RNCRN） [51], ，并用它来近似行为良好的常微分方程系统的动力学。具体而言，给定一个右端（向量场）足够平滑的目标常微分方程系统，其形式为

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_i}{\mathrm{d}t} = f_i(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n), \quad \bar{x}_i(0) \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \tag{3}$$

存在一个 RNCRN，其反应速率方程为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} &= \beta_i + x_i \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} y_j, && x_i(0) \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \\
\frac{\mathrm{d}y_j}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma}{\mu} + y_j \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_{j,i}}{\mu} x_i + \frac{\theta_j}{\mu} \right) - \frac{1}{\mu} y_j^2, && y_j(0) \geq 0, \quad j = 1, 2, \ldots, M,
\end{aligned} \tag{4}$$

使得浓度 $x_i(t)$ 可以任意精确地逼近式 (3) 中的目标变量 $\bar{x}_i(t)$。具体而言，式 (4) 中的参数 β_i, $\gamma > 0$ 为正，而 $\alpha_{i,j}, \omega_{j,i}, \theta_j \in \mathbb{R}$ 可以取任意实数值；此外，参数 $\mu > 0$ 控制变量 $y_j(t)$ 相对于 $x_i(t)$ 的变化速度。当这些参数取合适的值，且 $\mu > 0$ 足够小时，也就是说，$y_j(t)$ 相较于 $x_i(t)$ 变化得足够快时，式 (4) 可以任意精确地逼近给定的目标系统 (3)。为尝试找到这样的参数值，文中在 [51] 给出了算法 1。

浓度 $x_i(t)$ 和 $y_j(t)$ 分别对应两组化学物种：执行物种 X_i，它们表现出目标动力学行为；以及化学感知器物种 Y_j，它们通过辅助反应控制执行物种的动力学行为，相关示意见图 1。化学感知器 Y_j 最初在 [56] 中引入，并被提出作为前馈化学神经网络的一种化学实现，用于分类任务：处理静态输入浓度 x_i，并达到与分类决策相对应的平衡浓度 y_j。然而，在 RNCRN 中，我们对执行物种 X_i 引入反馈反应（见图 1 图注），使单层化学感知器的输出能够决定执行物种的动力学行为，因为它们会共同演化。

参数 $\mu > 0$ 在（4）中控制快速感知器与慢速执行物种之间的时间尺度分离。由于底层化学感知器的稳定性， [56], 在

formal极限 $\mu \to 0$中，动力学由约化RNCRN的反应速率方程支配 s

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_i}{\mathrm{d}t} = g_i(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_N) = \beta_i + \tilde{x}_i \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} \sigma_\gamma \left(\sum_{k=1}^{N} \omega_{j,k} \tilde{x}_k + \theta_j \right), \quad \tilde{x}(0) \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \quad (5)$$

其中，σ_γ 是一种化学激活函数，定义为 $\sigma_\gamma(x) = (x + \sqrt{x^2 + 4\gamma})/2$。在这一简化极限下，化学感知器的运作方式与传统人工神经网络相同，每个感知器都具有一个激活函数，用以近似常用的 ReLU 激活函数，从而能够通过标准方法训练 RNCRN 的参数。简而言之， [51] 中的算法1使用标准机器学习方法寻找一个人工神经网络，使得 $g_i(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_N) \approx f_i(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_n)$，然后放宽 $\mu = 0$ 这一假设，以找到一个非零的 $\mu > 0$ ，使得完整的 RNCRN (4) 能以足够高的精度近似目标系统 (3)。

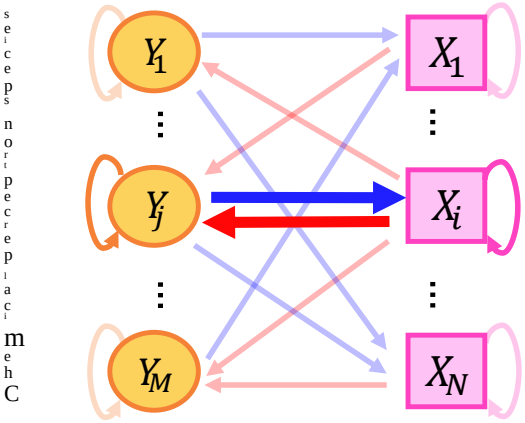


图 1：循环神经化学反应网络（RNCRN）的图示，该网络对应于反应速率方程（RRE）(4)，其介绍见 [51]。橙色圆圈表示化学感知机物种 $Y_1, \ldots, Y_M$，洋红色方块表示执行物种$X_1, \ldots, X_N$。彩色箭头表示与反应速率方程一致的化学反应：蓝色箭头表示 $X_i + Y_j \xrightarrow{|\alpha_i|, j} 2X_i + Y_j$ 或 $X_i + Y_j \xrightarrow{|\alpha_i|, j} Y_j$ （取决于 $\alpha_{i,j}$的符号函数），红色箭头表示 $X_i + Y_j \xrightarrow{|\omega_j|, i|/\mu} X_i + 2Y_j$ 或 $X_i + Y_j \xrightarrow{|\omega_j|, i|/\mu} X_i$ （取决于 $\omega_{j,i}$的符号函数），洋红色箭头表示 $\varnothing \xrightarrow{\beta_i} X_i$，橙色箭头表示三个反应 $\varnothing \xrightarrow{\gamma/\mu} Y_j$、 $2Y_j \xrightarrow{1/\mu} Y_j$，以及 $Y_j \xrightarrow{|\theta_j|/\mu} 2Y_j$ 或 $Y_j \xrightarrow{|\theta_j|/\mu} \varnothing$ 中的一个（取决于 θ_j的符号函数）。

分岔。 在 (3) 中，我们假设目标向量场 $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_N)$ 不依赖任何参数。更一般地，我们可以放宽这一假设，将实参数 λ 纳入 (3) 中进行推广，并考虑参数依赖的目标系统

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_i}{\mathrm{d}t} = f_i(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n; \bar{\lambda}), \quad i = 1, 2, \ldots, N, \quad (6)$$

其中 f_i 对 λ 的依赖足够平滑。 λ 的取值会对 (6) 的动力学行为产生深远影响。具体而言，如果随着 λ 平滑变化并经过一个临界值 $\lambda = \lambda^*$，当参数低于和高于该临界值时，系统呈现的长期行为在定性上有所不同，则称 (6) 发生了分岔 [4] 。

示例化学反应网络 (1) 表明，即使在相对简单的分子系统中，也会出现分岔。具体而言，将速率系数之差写成一个单独的参数

$\lambda = (\alpha_2 - \alpha_1)$，并令 $\alpha_3 = 1$，使其他系数均相对于 α_3 定义，相关的反应速率方程 (2) 便具有形式 (6)。我们观察到，如果 $\lambda > 0$（即 $\alpha_2 > \alpha_1$），那么从接近零处开始的分子浓度，也就是 $0 < x_1(0) \ll 1$，将趋于平衡点 λ。然而，如果 $\lambda < 0$（即 $\alpha_2 < \alpha_1$），那么从接近零处开始的分子浓度将趋于平衡点零。用动力系统的术语来说，随着参数 λ 从负值变为正值，平衡点 $x_1^* = 0$ 会从稳定变为不稳定，而另一个平衡点 $x_1^* = \lambda$ 则会从不稳定变为稳定。这种稳定性变化是分岔的一个例子；事实上，常微分方程 (2) 是跨临界分岔 [4]的标准形。

3 参数化 RNCRN 的分岔

RNCRN 在 [51]中被引入，用以逼近形式为 (3)、向量场与参数无关的目标系统。在本节中，我们将 RNCRN 推广，以逼近依赖于参数的目标系统。具体而言，现在将如下目标系统作为输入数据

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\bar{x}_i}{\mathrm{d}t} &= f_i(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n, \bar{\lambda}_1, \ldots, \bar{\lambda}_L), && \text{for } i = 1, 2, \ldots, N, \\ \frac{\mathrm{d}\bar{\lambda}_l}{\mathrm{d}t} &= 0, && \text{for } l = 1, 2, \ldots, L, \end{aligned} \tag{7}$$

其向量场 $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_N)$ 充分光滑地依赖于 L 正参数 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_L > 0$，这可视为 (6) 的推广；需要注意的是，若参数并非正数，则可通过适当地平移原参数来定义新的正参数。在 (7) 中，我们为这些参数附加平凡常微分方程，从而可将它们解释为辅助因变量。只要这些辅助变量的初始条件与目标参数值相匹配，具有参数化向量场的常微分方程，与向量场依赖于受平凡常微分方程约束的辅助变量的常微分方程，就是等价的。

参数化 RNCRN。现在我们来介绍一种广义 RNCRN，它可以在一系列参数值范围内近似以式（7）表示的参数依赖目标系统的动力学。具体而言，考虑通过以下反应速率方程定义的参数化RNCRN

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} &= \beta_i + x_i \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} y_j, && \text{for } i = 1, \ldots, N, \\ \frac{\mathrm{d}\lambda_k}{\mathrm{d}t} &= 0, && \text{for } l = 1, \ldots, L, \\ \frac{\mathrm{d}y_j}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma_j}{\mu} + \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_{j,i}}{\mu} x_i + \sum_{l=1}^{L} \frac{\psi_{j,l}}{\mu} \lambda_l + \frac{\theta_j}{\mu} \right) y_j - \frac{1}{\mu} y_j^2, && \text{for } j = 1, \ldots, M, \end{aligned} \tag{8}$$

其中 $x_i = x_i(t) \geq 0$, $y_j = y_j(t) \geq 0$, $\lambda_l = \lambda_l(t) = \lambda_l(0) \geq 0$, β_i, $\gamma_j \geq 0$ 以及 $\alpha_{i,j}$, ω_{ji}, θ_j, $\psi_{j,l} \in \mathbb{R}$。尤其是，与原始 RNCRN (4) 相比，参数化 RNCRN (8) 包含额外的执行物种 Λ_l，称为参数物种；它们由平凡常微分方程 $\mathrm{d}\lambda_l/\mathrm{d}t = 0$ 控制，因此是静态的。需要强调的是，在 (8) 中将参数表示为物种 Λ_l，意味着它们的取值由初始浓度控制，而非由速率系数控制。物种 Λ_l 会影响化学感知器 Y_j，但反之则不会；这种影响通过以下催化反应实现：

$$\Lambda_l + Y_j \xrightarrow{|\psi_{j,l}|/\mu} \Lambda_l + Y_j + \mathrm{sign}(\psi_{j,l}) Y_j, \quad j = 1, 2, \ldots, M, \;\; l = 1, 2, \ldots, L, \tag{9}$$

其中，为简洁起见，使用 sign($\psi_{j,\ l}$) 表示：当$\psi_{j,\ l}$ 为正时，产物中含有两个 Y_j 分子；当其为负时，产物中则不含该分子。参数化 RNCRN 只需稍作修改即可使用 [51] 中的算法 1 进行训练；为完整起见，我们在附录 D.1 中给出针对 (8) 的该算法。

由于参数可以像 (8) 中那样表示为具有平凡动力学的因变量，因此可以预期，能够逼近由任意光滑向量场所产生的动力学因变量的 RNCRN [51], 也能重现某些分岔。接下来，我们通过示例进行数值演示，说明 RNCRN 可以逼近两种经典分岔，即霍普夫分岔 [4] 和同宿分岔 [44, 65]。值得注意的是，这两类分岔都曾在生化背景中被观察到 [13, 14]。

3.1 霍普夫分岔

我们将 RNCRN 应用于逼近目标系统

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\bar{x}_1}{\mathrm{d}t} &= \left(\bar{\lambda}_1 - 2 - (\bar{x}_1 - 5)^2 - (\bar{x}_2 - 5)^2\right)(\bar{x}_1 - 5) - (\bar{x}_2 - 5), \\
\frac{\mathrm{d}\bar{x}_2}{\mathrm{d}t} &= \left(\bar{\lambda}_1 - 2 - (\bar{x}_1 - 5)^2 - (\bar{x}_2 - 5)^2\right)(\bar{x}_2 - 5) + (\bar{x}_1 - 5), \\
\frac{\mathrm{d}\bar{\lambda}_1}{\mathrm{d}t} &= 0,
\end{aligned} \tag{10}$$

该系统会发生霍普夫分岔 [4]。具体而言，(10) 是通过将霍普夫分岔的标准形中的目标平衡点平移至 $(\bar{x}_1,\ \bar{x}_2) = (5,\ 5)$，并将发生霍普夫分岔的临界参数值移至 $\lambda_1^* = 2$ 而得到的，从而使所关注的动力学位于正正交象限内。图 2(a) 展示了 (10) 在临界参数值处及其以上时的 $(\bar{x}_1,\ \bar{x}_2)$ 状态空间。具体而言，当 $\lambda_1 = 1 < 2$ 时，可以看到轨迹被吸引至稳定平衡点 $(\bar{x}_1,\ \bar{x}_2) = (5,\ 5)$；而当 $\lambda_1 = 3 > 2$ 时，它们则被吸引至一个孤立周期轨道，即极限环，该极限环包围着此时已不稳定的平衡点 $(\bar{x}_1,\ \bar{x}_2) = (5,\ 5)$。

在参数空间中局部复现这种行为的一种方法，是训练原始的 RNCRN (4)，使其在分岔点 $\lambda = 1$处专门逼近 (10)。此类训练的结果见附录 A.3，结果表明，对于 $\lambda_1^* = 2$附近一个小邻域内的参数值，RNCRN 在数值上复现了 (10) 的动力学。尤其值得注意的是，尽管它只在单个取值 $\lambda_1^* = 2$处接受训练，RNCRN 仍会自动在参数空间中局部复现从稳定平衡点到稳定极限环的转变。

为了在参数空间中更大的范围内复现式 (10) 的动力学，我们训练形式为式 (8) 的参数化 RNCRN，使其对所有 $1 \le \lambda_1 \le 3$ 进行近似，其中包含 $M = 5$ 个化学感知器；详情见附录 A.1。我们在图 2(b) 中展示了所得 RNCRN 的状态空间，结果表明，它继承了定性相似的动力学和分岔。需要指出的是，RNCRN 会发生霍普夫分岔，但不一定恰好发生在 $\lambda_1 = 2$，而是在数值上求得的一个略有不同的临界值 $\lambda_1 \approx 2.14$处发生。临界参数值的这一差异源于 RNCRN 的近似特性；增加化学感知器的数量和速度可以缩小这一差异。不过，本文重点研究化学感知器数量较少、但仍能产生足够行为的 RNCRN，因为物种更多的化学反应网络通常更难通过实验构建。

3.2 同宿分岔

现在我们来考虑目标系统

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\bar{x}_1}{\mathrm{d}t} &= \left(\bar{\lambda}_1 - 2 - \frac{4}{5}\right)(\bar{x}_1 - 5) + (\bar{x}_2 - 5) - \frac{6}{5}(\bar{x}_1 - 5)(\bar{x}_2 - 5) + \frac{3}{2}(\bar{x}_2 - 5)^2 \\ \frac{\mathrm{d}\bar{x}_2}{\mathrm{d}t} &= (\bar{x}_1 - 5) - \frac{4}{5}(\bar{x}_2 - 5) - \frac{4}{5}(\bar{x}_2 - 5)^2, \\ \frac{\mathrm{d}\bar{\lambda}_1}{\mathrm{d}t} &= 0, \end{aligned} \tag{11}$$

它在临界参数值 $\lambda_1^* = 2$附近的平衡点 $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (5, 5)$处发生同宿分岔。临界参数值处及其以上时，方程 (11) 的状态空间如下面的图2(c)所示。具体而言，当 $\lambda_1 = 1.9 < 2$时，状态空间中存在稳定的极限环；而当 $\lambda_1 = 2.1 > 2$时，该极限环不存在。这一转变发生在 $\lambda_1 = 2$ 处，经由一条同宿轨道——状态空间中的一条解轨道，它从平衡点 $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (5,5)$出发并返回自身。为了重现这些动力学行为，我们使用 $M = 10$化学感知器训练参数化 RNCRN (8)，使其对所有 $1.9 \leq \lambda_1 \leq 2.1$都能逼近 (10)；详情见附录 A.2。我们在图2(d)中展示了 RNCRN 呈现出所需的动力学。

在结束本节之前，我们注意到，还有其他用于设计具有分岔的化学反应网络的系统方法，[43, 44], 例如霍普夫分岔或同宿分岔；与 RNCRN 相比，这些方法通常涉及更少的物种和反应。特别是，由于 RNCRN 基于人工神经网络，其优势未必在于构建相对小型的系统，而在于能够更灵活地处理实现预期目标所需的输入数据类型。在接下来的两节中，我们将进一步探讨这种能力。

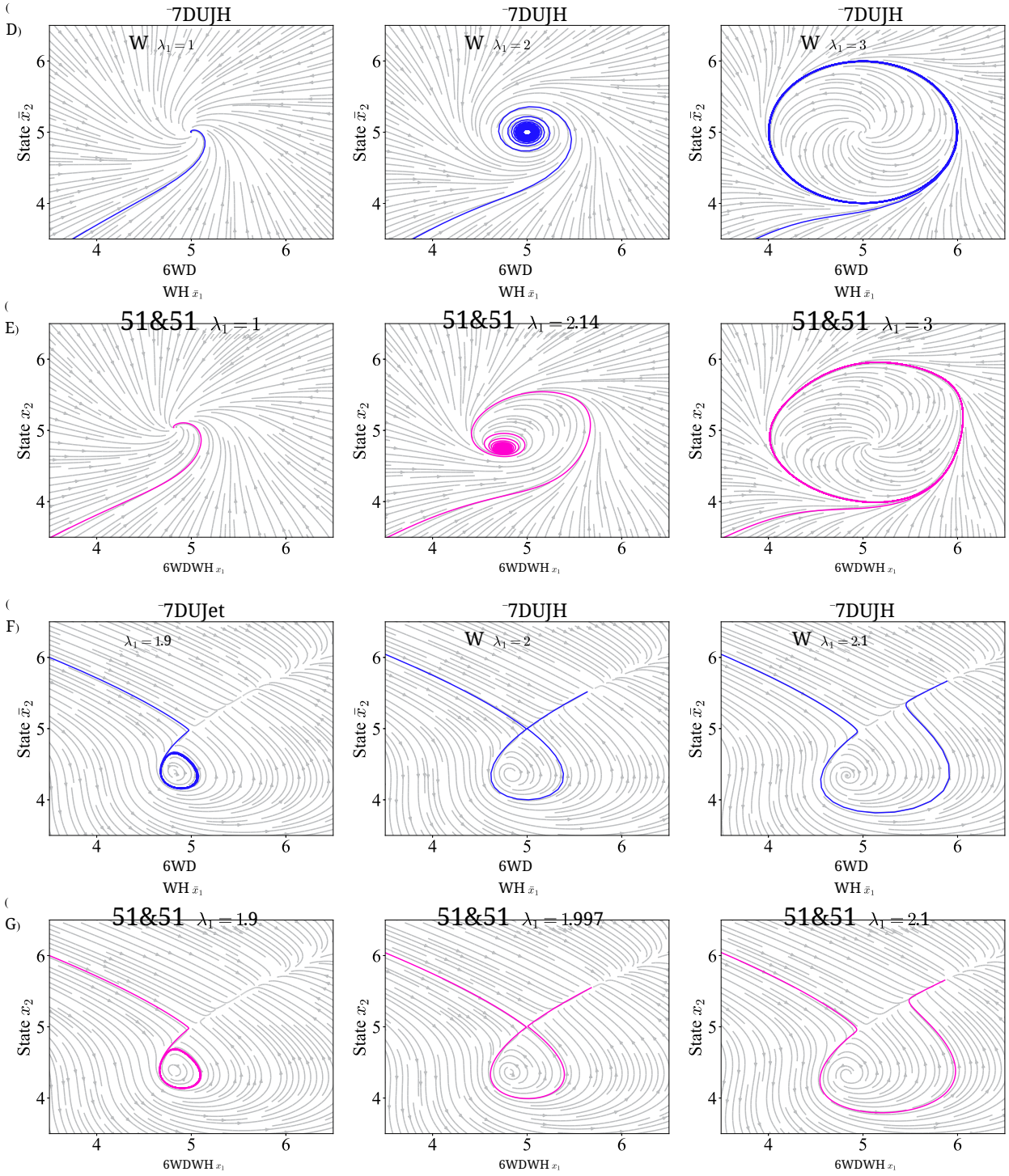


图2：使用 RNCRN 近似两个表现出分岔的常微分方程。行 (a) 展示了目标常微分方程 (10) 在参数 $\bar{r}_1$ 经过其临界值时发生霍普夫分岔。行 (b) 展示了附录 A.1 中的 $M = 5$ 化学感知器 RNCRN近似，其中 $\mu = 0.01$ 随其等效控制物种 λ_1 的变化而发生霍普夫分岔。行 (c) 展示了目标常微分方程 (11) 在参数 $\bar{r}_1$ 变化时发生同宿分岔。行 (d) 展示了附录 A.2 中的 $M = 10$ 化学感知器 RNCRN近似，其中 $\mu = 0.0075$ 发生同宿分岔。灰色箭头显示了行 (a) 和 (b) 中目标常微分方程的向量场，而在行 (b) 和 (d) 中，箭头显示了约化RNCRN 的向量场（即 $\mu = 0$）。[8]

4 Pi具有分类控制的 RNCRN 的分段系统 s

在第 3 节中，我们通过使用形式为 (7) 的参数化目标常微分方程作为输入数据，训练 RNCRN 展现预先定义的分岔；这些常微分方程本身已经呈现出所需的分岔。重要的是，要使此类常微分方程中存在经典分岔，式 (7) 中的向量场必须关于参数 [66]具有足够的光滑性。在本节中，我们放宽这一光滑性假设，允许式 (7) 中的向量场关于参数不连续。由此得到的常微分方程被称为分段系统 [67], ，并为 RNCRN 提供更加灵活的训练数据。具体而言，一方面，这种方法可以让我们直接在参数空间中逐段指定合适的动力学，从而在相关边界处隐式地强制实现所需类型的分岔，而 RNCRN 则可以自动进行插值。另一方面，在某些应用中，更重要的可能是系统在特定参数值下呈现某些动力学特征，而不是系统如何在不同状态之间过渡；分段方法无需对动力学施加不必要的正则性条件，便可实现这一点。下文将对第 3 节中的参数化 RNCRN 进行调整，使其能够在此类分段系统上进行训练：在所需参数值下复现所需的动力学，同时通过适当的分岔自动连接不同的动力学行为。

4.1 简单单稳-双稳分段系统

作为动机，我们考虑目标系统

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_1}{\mathrm{d}t} = f_1(\bar{x}_1, \bar{\lambda}_1) = \begin{cases} 30 - 6\bar{x}_1, & \text{if } \bar{\lambda}_1 = 1, \\ -(\bar{x}_1 - 2)(\bar{x}_1 - 5)(\bar{x}_1 - 8), & \text{if } \bar{\lambda}_1 = 0. \end{cases} \tag{12}$$

具体而言，当 $\lambda_1 = 1$ 时，向量场具有唯一的稳定平衡点（单稳态）；而当 $\lambda_1 = 0$ 时，它具有两个稳定平衡点（双稳态）。由于式（12）仅在参数空间中的两个孤立点处定义，因此它是一个分段系统。

我们使用 3 个化学感知器训练参数化 RNCRN（8），以复现式（12）的动力学。详细内容见附录 B.1，训练算法见附录 D.2，结果见图3。具体而言，在图 3(a)–(d) 中，我们展示了 RNCRN 分别在 $\lambda_1 = 1$ 处为单稳态、在 $\lambda_1 = 0$处为双稳态，且其平衡点与式（12）中的平衡点相当接近。

与仅在 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_1 = 0$处定义的目标系统（12）不同，RNCRN 对所有 $\lambda_1 \geq 0$ 均有定义，并且随该参数平滑变化。为分析这种依赖关系，我们在图 3(e) 中展示了分岔图，即 RNCRN 的平衡点随参数 λ_1变化的情况。可以看到，RNCRN 通过经典分岔自动实现了在 $\lambda_1 = 1$ 处的单稳态与在 $\lambda_1 = 0$ 处的双稳态之间的插值。具体而言，图 3(e) 所示的参数取值范围内始终存在一个平衡点，而另外两个平衡点则在所有 $\lambda_1 \in [0, \lambda_1^*)$ 的情况下存在，直到某个$\lambda_1^* < 10^{-2}$，随后经由鞍结分岔消失 [4]。

4.2 分类控制的 RNCRN

现在考虑一个一般形式如下的目标分段系统

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_i}{\mathrm{d}t} = f_i^{(p)}(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_N) \text{ for all } \bar{\boldsymbol{\lambda}} \in \mathbb{L}_p,\ i = 1, \ldots, N,\ p = 1, \ldots, P, \tag{13}$$

其中 $\bar{\boldsymbol{\lambda}} = (\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \ldots\ldots, \bar{\lambda}_L) \in \mathbb{R}^L$ 是参数向量， $\mathbb{L}_1$， $\mathbb{L}_2$，……， $\mathbb{L}_P \subset \mathbb{R}^L$ 是参数空间中的适当不相交集合， $f_i^{(p)}$ 是适当光滑的函数。特别是，当

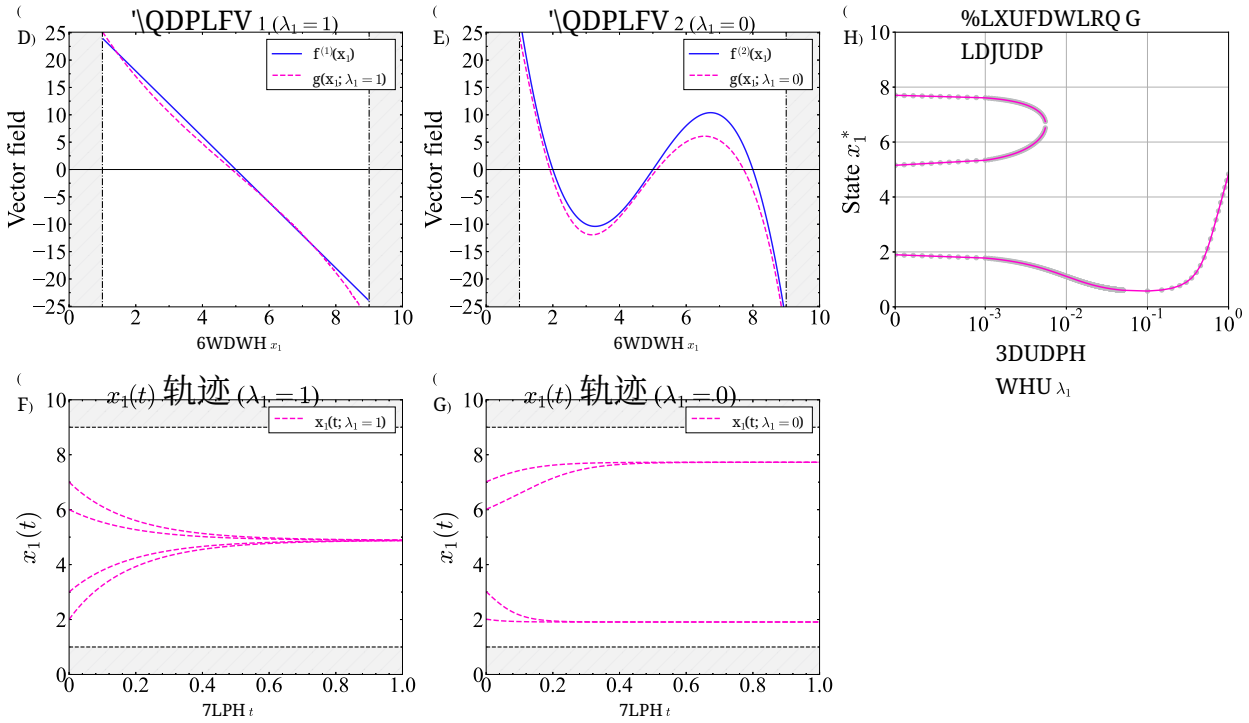


图3：当RNCRN在参数物种的离散浓度上训练时，通过插值涌现分岔。由附录 B.1中规定的参数化 RNCRN (33) 对 (12) 进行近似。图 (a) 显示第一种动力学状态（ $\lambda_1 = 1$）中的动力学。目标动力学 $d\bar{x}_1/dt = 30 - 6\bar{x}_1$ 以蓝色显示，而RNCRN近似的约化向量场（即当 $\mu = 0$时）以品红色显示。图(b)显示第二种动力学状态（$\lambda_1 = 0$）中的动力学。蓝色为目标动力学 $d\bar{x}_1/dt = -(\bar{x}_1 - 2)($ $\bar{x}_1 - 5)(\bar{x}_1 - 8)$，品红色为RNCRN近似的约化向量场。图(c)–(d)显示在多种执行物种初始条件下，每种动力学状态中完整RNCRN的 $x_1(t)$时间轨迹， $x_1(0) = 2,3,6,7$，其中 $\mu = 0.1$ 且所有化学感知器初始条件为零$y_1(0) = y_2(0) = y_3(0) = 0$。图(e)以品红色显示当参数 λ_1 在中间值范围内变化时RNCRN近似的分岔图。在约 $\lambda_1 = 10^{-2}$处观察到一个分岔。

参数 $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ 被选为属于集合 $\mathbb{L}_p$时，常微分方程由向量场 $\mathbf{f}^{(p)}$支配。需要指出的是，集合 $\mathbb{L}_p$ 可以是一个点。例如，系统 (12) 是 (13) 的一个特例，其中包含一个单参数 λ_1，以及两个单点参数区域 $\mathbb{L}_1 = \{1\}$ 和 $\mathbb{L}_2 = \{0\}$。

参数化 RNCRN (8) 足以近似在孤立参数值处定义的分段系统 (12)。为了近似具有更复杂参数空间结构的更一般的分段系统 (13)，我们现在对 RNCRN 进行修改。具体而言，考虑具有以下反应速率方程的参数化 RNCRN

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} &= \beta_i + x_i \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} y_j, && i = 1, 2, \ldots, N, \\
\frac{\mathrm{d}y_j}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma_j}{\mu} + y_j \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_{j,i}^{(y)}}{\mu} x_i + \frac{\theta_j^{(y)}}{\mu} + \frac{\psi_j}{\mu} r \right) - \frac{\tau_j}{\mu} y_j^2, && j = 1, 2, \ldots, M,
\end{aligned} \tag{14}$$

其形式为 形式为 (8)，仅含一个参数 r，其本身由反应速率方程控制

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\lambda_l}{\mathrm{d}t} &= 0, && l = 1, 2, \ldots, L, \\
\frac{\mathrm{d}z_k}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma}{\mu} + z_k \left(\sum_{l=1}^{L} \frac{\omega_{k,l}^{(z)}}{\mu} \lambda_l + \frac{\theta_l^{(z)}}{\mu} \right) - \frac{1}{\mu} z_k^2, && k = 1, 2, \ldots, K, \\
\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma}{\mu} + r \left(\sum_{k=1}^{K} \frac{\omega_k^{(r)}}{\mu} z_k + \frac{\theta_0^{(r)}}{\mu} \right) - \frac{1}{\mu} r^2,
\end{aligned} \tag{15}$$

其中包含浓度为 z_1、z_2、……、z_K 的辅助化学感知器。我们将对应于反应速率方程 (14)–(15) 的 RNCRN 称为分类控制的 RNCRN，并在图4中加以说明。请注意，这个 RNCRN 与原始 RNCRN (4) 一样，只包含两个时间尺度：慢物种 X_i 和 Λ_l，以及快物种 Y_j、Z_k 和 R。

宽泛地说，(14) 旨在逐点实现 (13) 的动力学，而 (15) 则将这些动力学组装起来／分类到参数空间的相应部分。具体而言，在参数化 RNCRN (8) 中，化学感知器的常微分方程关于参数 λ_l呈线性，而 (14) 中的感知器仅通过辅助变量r隐式依赖于 λ_l。重要的是，由 (15) 可知，对于每个足够小的 $\mu > 0$,

$$z_k \approx \sigma_\gamma \left(\sum_{l=1}^{L} \omega_{k,l}^{(z)} \lambda_l(0) + \theta_k^{(z)} \right) \quad \text{and} \quad r \approx \sigma_\gamma \left(\sum_{k=1}^{K} \omega_k^{(r)} z_k + \theta_0^{(r)} \right), \tag{16}$$

其中 $\sigma_\gamma(x)$ 是 (5) 中定义的激活函数。因此，(16) 的作用相当于一个双层人工神经网络，第二层中只有一个感知器，它在参数 $\boldsymbol{\lambda}$ 与逐点控制参数 r之间建立映射。

基于这种模块化设计，我们分两步训练分类控制的反应网络化学反应网络。第一步中，我们不考虑参数空间的精确结构，只逐点训练参数化 RNCRN (14)，使其在某个 $r = r_p$ 处呈现由向量场 $\mathbf{f}^{(p)}$ 所诱导的动力学行为，对每个 $p = 1$，2，……，P 均如此。然后，在第二步中，我们通过使用标准前馈人工神经网络训练方法，经由 (16) 训练 (15)，将参数空间的精确结构纳入考虑，使其从 (λ_1，λ_2，……，λ_L) 空间中的给定 $\mathbb{L}_p$ 集映射到相应的 r_p 值。我们在附录 D.3 中给出了这一训练过程的算法。

4.3 异或门控单稳态-双稳态分段系统

现在考虑一个目标分段系统，其参数空间结构比 (12) 更复杂¯ ¯，它取决于两个参数 λ_1，λ_2，并由下式给出

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_1}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} 30 - 6\bar{x}_1, & \text{for all } (\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2) \in \mathbb{L}_1 = (\mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_2) \cup (\mathbb{K}_2 \times \mathbb{K}_1), \\ -(\bar{x}_1 - 2)(\bar{x}_1 - 5)(\bar{x}_1 - 8), & \text{for all } (\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2) \in \mathbb{L}_2 = (\mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_1) \cup (\mathbb{K}_2 \times \mathbb{K}_2), \end{cases} \tag{17}$$

其中 $\mathbb{K}_1 = [0, 1)$ 且 $\mathbb{K}_2 = [1, 2]$。粗略来说，如果在定义域 $[0, 2] \times [0, 2]$ 上，一个参数处于较大的区域，而另一个参数处于较小的区域，那么分段系统 (17) 为单稳态；否则为双稳态。这种依赖关系可以解释为异或运算符，并在参数空间中不同动力学区域之间形成一条非线性边界。

为了近似式（17）的动力学，我们使用算法 4 训练分类控制的反应网络化学反应网络（14）–（15），具体细节见附录B.2。特别是，在第一步中

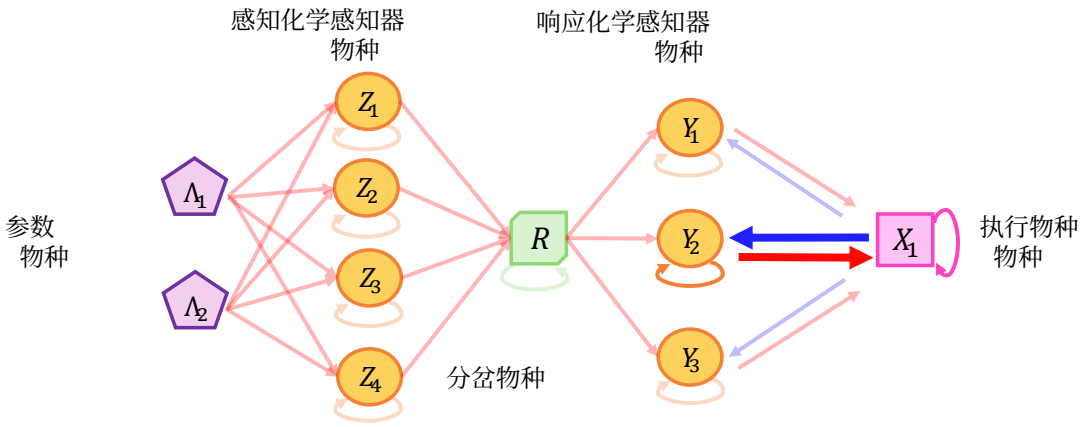


图4：用于近似方程（17）的分类控制的反应网络化学反应网络示意图。紫色部分显示参数物种 Λ_1 和 Λ_2 与感知化学感知器物种相互作用，这些物种执行非线性分类，并以分岔物种 R的大小呈现输出。随后，分岔物种 R 作为响应化学感知器物种中的参数；这些物种经过训练，可在执行物种中诱导预期的动力学。

，我们直接重复使用附录 B.1 中的参数化 RNCRN，该网络此前已在第 4.1 节中构建，用于近似系统（12）。在第二步中，我们再训练分类模块（15），以实现式（17）中的参数空间结构。

在图5中，我们绘制了所得 RNCRN 的双参数分岔图，展示了参数空间（λ_1， λ_2）中不同点处的代表性轨迹 $x_1(t)$。可以看出，它与目标分段系统（17）相当吻合：当（λ_1， λ_2） $\in([0,1.0]\times[1.1,2.0])\cup([1.1,2.0]\times[0,1.0])$时，RNCRN 近似为单稳态；当（$\lambda_1$， λ_2） $\in([0,1.0]\times[0,1.0])\cup([1.1,2.0]\times[1.1,2.0])$时，则为双稳态。此外，RNCRN 随参数（$\lambda_1$， λ_2）平滑变化，并通过鞍结分岔在参数空间边界之间插值动力学（如图3(e)所示）。

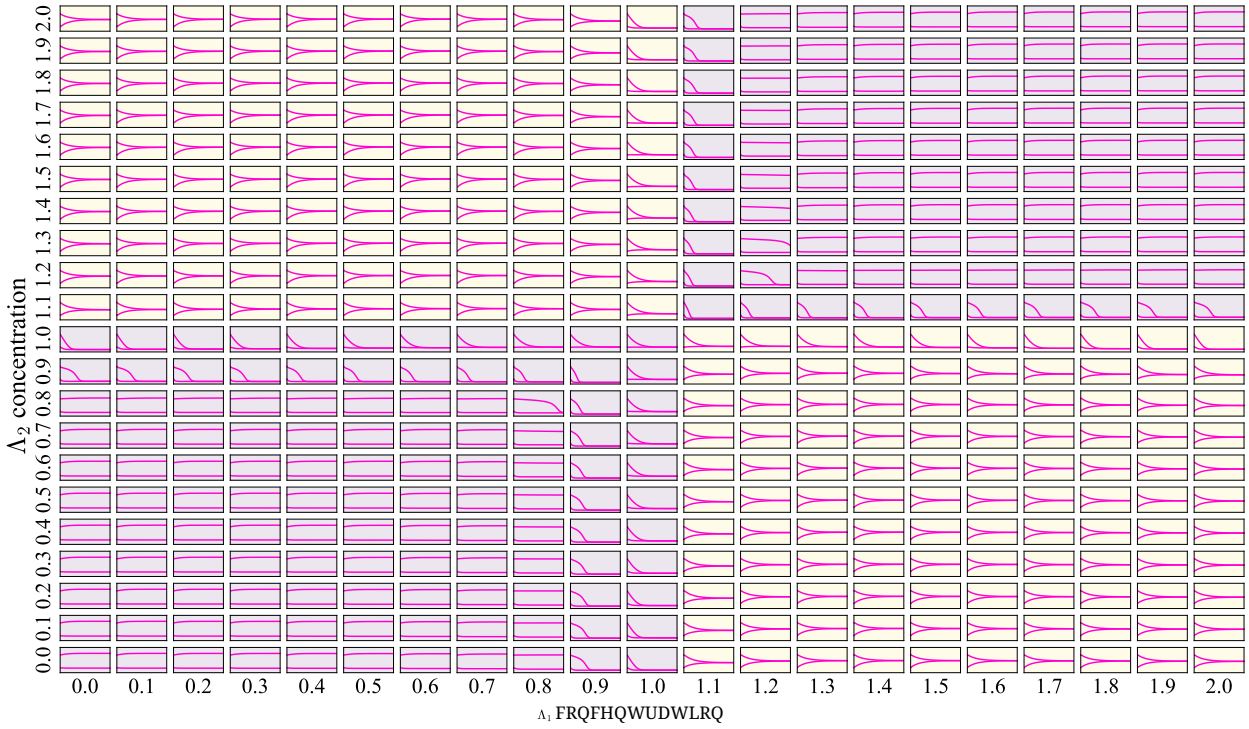


图5：针对不同浓度的 Λ_1 和 Λ_2，展示一组 $x_1(t)$ 轨迹的面板，其中显示了非线性的异或分类边界；该边界将双稳态与单稳态分隔开来。这里的 RNCRN 近似于方程 (17) 中的目标分段系统。相关的分类控制的反应网络化学反应网络（即方程 (14)）使用四个感知型化学感知机、一个分岔型化学感知机和三个响应型化学感知机，根据两个参数物种 Λ_1 和 Λ_2的状态，在一个执行物种中诱导预期的动力学。每个面板包含两条时间轨迹，总模拟时间为 $\Delta t = 1$，使用 $\mu = 0.001$；所有化学感知机值均从零开始，唯一的执行物种取值分别为 $x_1(0) = 2$ 和 $x_1(0) = 7$。每个面板的色调表示分段系统中预期的动力学行为：黄色应对应单稳态，粉色应对应双稳态。本例中反应的完整详情见附录B.2。

5 数据定义的极限环与切换

在第3节和第4节中，RNCRN均基于具有适当规则向量场的常微分方程形式的数据进行训练。在本节中，我们利用底层基于神经网络的方法的插值和外推能力，展示RNCRN也可以以无常微分方程的方式，从相对稀疏的数据中进行训练：即状态空间中的一组点。更确切地说，我们专注于生成这样一类数据，使RNCRN能够以无常微分方程的方式，将二维极限环纳入其状态空间。

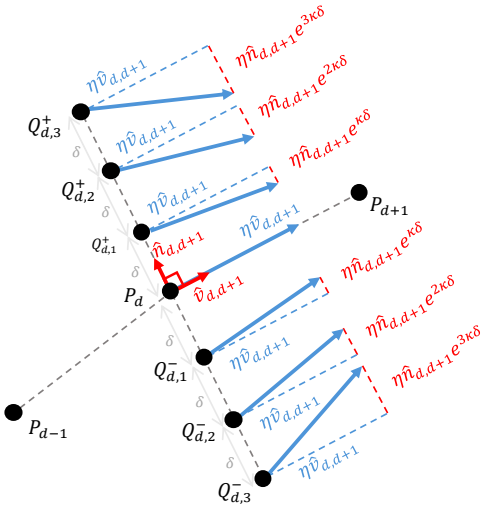
为此，我们在状态空间中给定闭曲线上以及其邻域内采样有限个点。随后，我们为这些点中的每一个赋予一个具有适当方向的向量：闭曲线上的向量沿曲线方向指向（对应极限环），而其余向量则全部指向闭曲线或远离闭曲线（分别对应稳定性或不稳定性）。由此得到一个仅定义在有限个状态上的局部向量场，该向量场可用于训练RNCRN，使其能够外推网格之外的行为。生成此类数据的算法作为算法1给出。需要注意的是，在该算法中，极限环附近的向量场随状态呈指数变化；在附录 C.3中，我们展示了也可以采用线性变化。还需注意的是，该算法可以推广到更高维度；有关三维版本及示例，请参见附录 C.6。

算法1： 用于生成训练数据的算法，用来训练 RNCRN，使其呈现由点集 $\{P_1, P_2, \ldots, P_D, P_{D+1}\}$ 定义的二维稳定极限环。

在执行物种空间 $\{P_1, P_2, \ldots, P_D, P_{D+1}\}$ 中固定一个有序点集，其中 $P_d \in \mathbb{R}^2_>$for $d = 1,\ 2,\ \ldots,\ D,\ D+1$，并且满足 $P_{D+1} = P_1$，其中 $\mathbb{R}^2_>$ 为正象限。另外，固定填充数量 K、填充距离 $\delta > 0$、衰减尺度 $\kappa > 0$ 和向量大小 $\eta > 0$。

(a) 填充点。对于每个点 P_d，计算单位法向量 $\hat{n}_{d,\ d+1}$，它垂直于 $\hat{v}_{d,\ d+1}$；$\hat{v}_d$ 是从 P_d 指向 P_{d+1} 的单位向量。创建 $2K$ 个对称的填充点 $Q_{d\ ,\ k}^{\pm} = P_d \pm k\delta\hat{n}_{d,\ d+1}$，其中 $k = 1,\ 2,\ \ldots,\ K$。

(b) 局部向量场。将向量 $\eta\hat{v}_{d,\ d+1}$ 赋给P_d，并将向量 $(\eta\hat{v}_{d,\ d+1} \mp \eta\hat{n}_{d,\ d+1}\exp(\kappa\delta k))$ 赋给 $Q_{d\ ,\ k}^{\pm}$。



5.1 圆形极限环

考虑一个 半径为 $a > 0$、中心位于 $(b_1,\ b_2)$ 的圆 $\in \mathbb{R}^2_>$，其参数方程为 b y

$$x_1(s) = a\cos(s) + b_1,$$
$$x_2(s) = a\sin(s) + b_2, \tag{18}$$

其中 $s \in [0, 2\pi)$。下文中，我们选择 $a = 1$ 和 $(b_1, b_2) = (2, 2)$。通过对 $d = 1, \ldots..629, 630$，取式（18）中的 $s = s_d = 0.01(d-1)$，我们采样得到一组有序点 $P_d = (x_1(s_d)\ x_2(s_d))$。使用算法1以及 $K = 20$、$\delta = 0.01$、$\kappa = 1$ 和 $\eta = 1$，我们生成用于训练 RNCRN (4) 的输入数据，其中包含 $M = 5$ 个化学感知器，使其在状态空间中呈现一个接近圆形的稳定二维极限环。该训练通过适当调整 [51]，中的算法1来完成，具体如算法 5 和附录C.1所示；另请参阅附录 C.2，其中给出了一个极限环近似为圆形但不稳定的 RNCRN 示例。

我们在图6(a)中展示了训练数据以及训练后的 RNCRN 的状态空间。可以看出，具有 $\mu = 0.1$ 的 RNCRN 在数值上呈现出一个稳定极限环，其形状与期望的圆相当接近。此外，RNCRN 将向量场一致地延伸到该极限环之外，并在环内产生一个不稳定平衡点。

5.2 心形极限环

现在来考虑参数方程

$$\begin{aligned} x_1(s) &= 2 + 1.12\sin(s)^3, \\ x_2(s) &= 2 + 0.91\cos(s) - 0.35\cos(2s) - 0.14\cos(3s) - 0.07\cos(4s), \end{aligned} \tag{19}$$

对于 $s \in [0, 2\pi)$，该方程在（x_1，x_2）空间中生成一个心形。在这个例子中，我们分别为心形的每个叶瓣生成训练数据，$s_d = 0.01$（$d-1$）取值为 $d = 1$，2，……，261，262，以及$d = 314$，315，……，575，576，然后使用算法1，并令 $K = 20$、$\delta = 0.01$、$\kappa = 1$和 $\eta = 1$；更多详情见附录C.4。我们在图6(b)中展示结果，数值上表明 RNCRN 呈现出一个近似心形的稳定极限环，并且与给定的局部向量场一致，在环内产生一个不稳定平衡点。

5.3 多个极限环

算法1还可用于训练 RNCRN，使其呈现多个共存极限环。例如，我们将算法1应用于生成两个共存稳定极限环的训练数据，其形式为 (18)：一个由 $a = 0.5$ 和 $(b_1, b_2) = (1。5, 1。5)$ 构成，另一个由 $a = 0.5$ 和 $(b_1, b_2) = (4。5, 1。5)$ 构成，详见附录C.5。将拼接后的训练数据用于训练 RNCRN，结果如图6(c)所示，数值结果表明存在两个稳定极限环。值得注意的是，在这个例子中，RNCRN 不仅在每个极限环内部生成一个不稳定平衡点，还创建了一个鞍点型平衡点，以连接训练数据所指定的两个区域。

5.4 平衡点-振荡分段系统与数据定义的振荡

现在，我们通过考虑目标分段系统，将本节与第4节的结果结合起来

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} \mathbf{f}^1(\mathbf{x}), & \text{for all } \bar{\lambda}_1 \in [0, 0.25], \\ \mathbf{f}^2(\mathbf{x}), & \text{for all } \bar{\lambda}_1 > 0.25, \end{cases} \tag{20}$$

其中 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$，$\mathbf{f}^1(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^2$ 是一个光滑向量场，其在 $(0.5, 0.5)$ 处有唯一的稳定平衡点；而 $\mathbf{f}^2(\mathbf{x})$ 是一个仅在 $\mathbb{R}^2_>$ 中有限个状态上定义的向量场，可通过算法1呈现一个圆形极限环。我们可以设想，实现诸如 (20) 这类动力学的化学系统，正在实现特定环境振荡。也就是说，当环境信号，

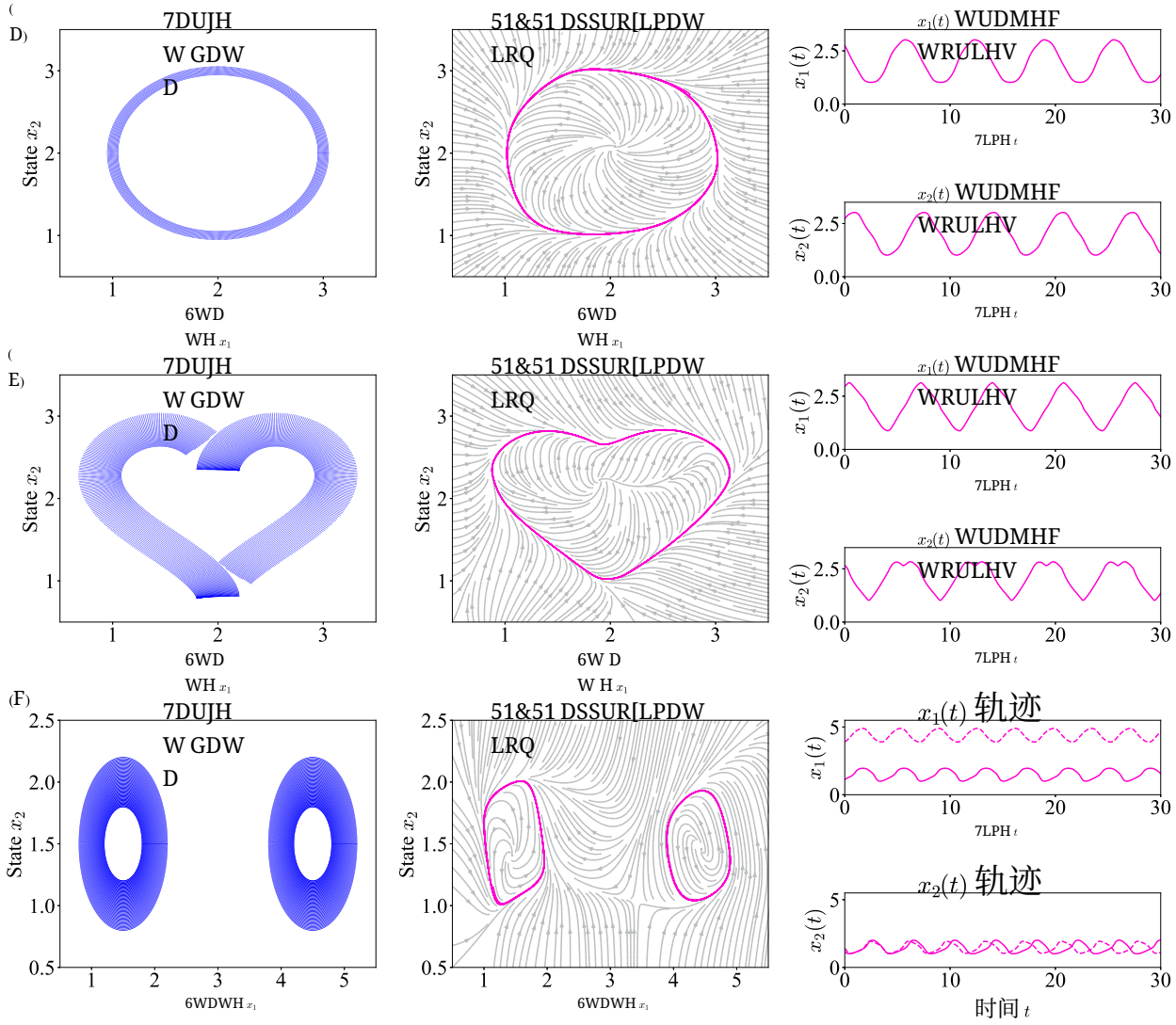


图6：在数据定义的极限环上训练的示例RNCRN。第1列显示由算法1生成的点，训练数据在这些点上针对不同的目标吸引子形状给出。训练数据的放大图见附录1。第2列显示在第1列数据上训练得到的RNCRN近似。约化RNCRN近似（即具有 $\mu = 0$的RNCRN）的相平面以灰色箭头显示，而具有 $\mu > 0$ 的完整RNCRN的示例(x_1, x_2)轨迹以品红色显示。第3列显示完整RNCRN近似的时间轨迹。行(a)显示一个5化学感知器RNCRN（完整参数见附录C.1），用于近似数据定义的圆形极限环。该时间轨迹的模拟条件为 $x_1(0) = 2.744$、$x_2(0) = 2.693$、$\mu = 0.1$以及 $y_1(0) = \ldots$、$y_5(0) = 0$。行(b)显示一个10化学感知器RNCRN（如附录C.4所规定），用于近似数据定义的心形极限环。该时间轨迹的模拟条件为 $x_1(0) = 2.957$、$x_2(0) = 2.665$、$\mu = 0.1$以及 $y_1(0) = \ldots$、$y_{10}(0) = 0$。行(c)显示一个15化学感知器RNCRN（见附录C.5），用于近似具有两个极限环的系统。两条时间轨迹均在 $\mu = 0.1$ 以及 $y_1(0) = \ldots$、$y_{15}(0) = 0$条件下模拟，执行物种的初始浓度分别为 $x_1(0) = 1.118$、$x_2(0) = 1.154$ 或 $x_1(0) = 3.916$、$x_2(0) = 1.392$。

Λ_1充足时，系统会使执行物种 X_1 产生振荡；而当环境信号微弱时，只会产生痕量的执行物种。

现在，我们考虑使用分类控制的 RNCRN（式 (14)–(15)）来实现式 (20)。按照算法 4 中的步骤，并按算法 5 所述进行修改以使用数据定义的向量场，我们训练分类控制的 RNCRN 来实现式 (20)；详情见附录 C.7（使用了 5 Y_j 个化学感知器、 3 Z_k 个化学感知器和一个分岔物种）。

图 7(a)–(b) 用蓝色箭头显示了数据定义的振荡和平衡稳定点。图 7(a)–(b) 中的灰色流线显示了约化参数化 RNCRN 在两个特定分岔物种取值 $R = 0.1$ 和 $R = 1$ 时的向量场，这两个取值用于训练。参数物种 Λ_1 与分岔物种 R 之间的输入输出关系见图 7(c)。

为了展示 X_1 行为对参数物种 Λ_1的依赖关系，图 7(d) 中的子图已与图 7(c) 中的 λ_1^*轴对齐。图 7(d) 中的每个子图对应一个不同的 $\lambda_1(0)$ 浓度，并绘制由此产生的 $x_1(t)$ 时间轨迹。完整的分类控制 RNCRN 定义于附录 C.7 中，我们使用 $\mu = 0.01$ 以及所有化学感知器物种浓度从零开始进行模拟。我们观察到，分类控制 RNCRN 产生了预期的行为。当 $\lambda_1 \approx 2.5$ 低于临界值时，我们观察到 $x_1(t)$ 浓度趋向于低平衡态（图 7(d) 中的洋红色子图）；但高于该临界值时，我们观察到频率和振幅相似的振荡（图 7(d) 中的黄色子图）。这表明分段系统得到了有效近似： λ_1空间的不同区域被映射到 (x_1， x_2)空间中的不同函数（并且这些区域中的函数基本上不依赖于 λ_1 ）。

6 讨论

在本研究中，我们采用循环神经化学反应网络（RNCRN）架构来近似非典型动力学行为，并证明同一系统能够实现不同的动力学状态，且系统在这些状态之间转换时会发生分岔。将目标动力学行为以非化学目标常微分方程的形式映射到化学反应网络中，已有大量相关文献 [31, 43–50]。这些以解析方法为主的技术能够构建反应数和物种数较少的化学反应网络。例如，这里研究的具有同宿分岔的目标常微分方程（11）仅通过 2 种化学物种和 9 个化学反应 [44] 便得以实现，而这里确定的 RNCRN 近似则需要 12 种化学物种和 82 个化学反应。尽管如此，证明 RNCRN 能够准确复现这些分岔，仍是后续章节的研究动机，因为那些章节所涉及的情形并不适用这类解析映射技术。

第4节和第5节展示了 RNCRN 相较于上述解析技术的主要优势：RNCRN 在数学上由人工神经网络（ANN）推导而来，而人工神经网络以能够通过数据驱动训练技术学习函数而闻名。利用这一点，我们提出了算法1，用于生成人工数据，以训练 RNCRN 重现定义在相空间小区域内的孤立动力学特征。我们能够使用算法1定义各种奇特的吸引子形状，包括心形极限环、多个极限环，以及三种执行物种环面极限环（见附录 C.6）。

基于 RNCRN 的方法的一个关键特点，是 RNCRN 能够对动力学行为进行外推和内插，从而使整个空间中的动力学与感兴趣的特征一致。例如，在图6的约化向量场中，我们观察到多个训练数据中未提供的平衡点。同样，当 RNCRN 被用于内插

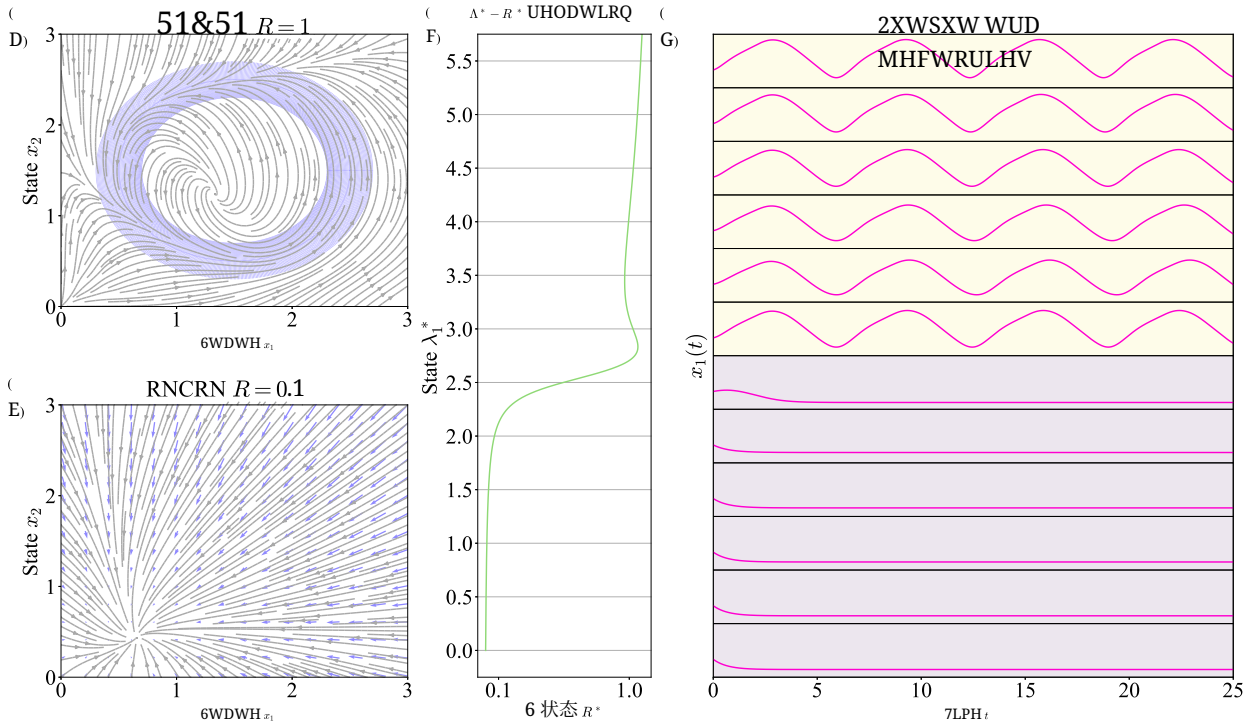


图 7：一个分类控制的反应网络化学反应网络，旨在近似一个分段系统；该系统根据环境物种 Λ_1 的浓度，要么产生微量的执行物种 X_1，要么在 X_1 中产生振荡。分图 (a)–(b) 展示了数据定义的目标动力学（蓝色），以及点定义的 RNCRN 近似的约化向量场（灰色箭头）。分图 (c) 展示了 Λ_1 与 R （一种中间物种）之间的输入输出关系。分图 (d) 展示了分类控制的反应网络化学反应网络的完整反应速率方程中输出物种 $x_1(t)$ 的数值积分时间轨迹，对应于不同的 $\lambda_1(0)$ 值（根据与分图 (c) λ_1^*轴的对齐）以及 $\mu = 0.1$。该系统中反应的完整细节见附录 C.7。

不同输入参数物种取值下定性上不同的行为时，分岔会自然出现——无需明确指定其位置或类型。RNCRN 填补向量场空白的能力，让复杂动力学的设计变得容易得多，因为无需寻找具有此类动力学的常微分方程。

在第 5.4 节中，我们介绍了一种分类控制的 RNCRN，其灵感来自需要感知化学环境信号并据此采取行动的应用场景——在本例中，即开启振荡输出。具有类似行为的系统能够应对现代治疗药物面临的若干重大挑战。最直接地说，环境特异性激活可将治疗活性局限于病理相关环境中，从而减少脱靶效应。例如，众所周知，对良性细胞的脱靶杀伤限制了化疗 [68] 和抗生素治疗 [69]的成功。更值得关注的是，切换到新的动力学状态能够对治疗物质的时间浓度进行精细调控，并设计出非平凡的给药方案。例如，有研究指出，脉冲式给药方案有助于在多种情境下防止耐药性产生，包括抗生素耐药性 [70], 、癌症治疗 [71],以及糖尿病治疗中预防胰岛素抵抗 [72]。值得注意的是，实验性化学神经网络已成功构建，能够对来自癌症 [73]和细菌感染 [23],的 RNA 进行分类，这表明分类控制的 RNCRN 或许有一天能够应用于此类情境。

在此类情境中得到开发。

在 RNCRN 的背景下，仍有若干值得探讨的未解挑战。原则上，底层反应可以通过 DNA链置换 进行编码 [51]，但在实际应用中，其他环境或许更加便利，例如酶辅助DNA纳米技术 [74] 或转录因子网络 [75] 。沿着这一思路，构建 RNCRN 背后的原理比用于实现化学感知器的特定化学反应网络更具普适性。我们预计，可以设计许多发挥同等作用的替代化学反应网络，即执行加权求和和非线性激活，从而在各种生化介质中实现类似 RNCRN 的系统。我们希望探索系统化编译方法，将 RNCRN 的化学反应网络转换为具有替代动力学定律（例如基于酶的合成生物学）的动态等效反应网络。

一个尚待回答的问题是，有趣的 RNCRN 在实践中是否可行。本研究所展示的 RNCRN 中，发生反应的组分数量少于其他一些复杂的工程分子网络 [21, 22], ，但 RNCRN 有一个更难以实现的特点：组分之间必须达到必要的连接程度，并且需要对动力学进行控制。因此，我们希望研究压缩或剪枝算法，以系统地减少所得化学反应网络中的辅助化学物种和化学反应数量。

7 声明

作者贡献：AD、TEO 和 TP 构思了这项研究；AD 完成了模拟并撰写了初稿；TEO 和 TP 审阅并编辑了最终稿。

基金资助：Alexander Dack 感谢伦敦帝国理工学院生物工程系提供的资助。Thomas E. Ouldridge 感谢英国皇家学会提供的大学研究奖学金。Tomislav Plesa 感谢剑桥大学 Peterhouse 提供的奖学金。**利益冲突**：作者声明不存在任何竞争性利益。

参考文献

[1] R. Lev Bar-Or、R. Maya、L. A. Segel、U. Alon、A. J. Levine 和 M. Oren，“p53-Mdm2反馈回路产生振荡：一项理论与实验研究”，《美国国家科学院院刊》，第 97 卷，第 21 期，第 11250–11255 页，2000 年。

[2] C. L. Manser 和 R. Perez-Carrasco，“用于测量和调节发育基因调控网络节奏的数学框架”，《*Development*》，第151卷，第12期，第dev202950页，2024年。[3] J. Cerneckis、H. Cai 和 Y. Shi，“诱导多能干细胞（iPSCs）：诱导的分子机制及其应用”，《信号转导与靶向治疗》，第9卷，第1期，第112页，2024年。[4] S. H. Strogatz，《《非线性动力学与混沌》》。CRC出版社，第0版，2018年。[5] Y. Forterre、J. M. Skotheim、J. Dumais 和 L. Mahadevan，“捕蝇草如何迅速闭合”，《自然》，第433卷，第7024期，第421–425页，2005年。[6] G. F. Fussmann、S. P. Ellner、K. W. Shertzer 和 N. G. Hairston Jr.，“活体捕食者-猎物系统中的霍普夫分岔”，《科学》，第290卷，第5495期，第1358–1360页，2000年。

[7] R. M. Borisyuk 和 A. B. Kirillov，“神经网络模型的分岔分析”，《生物控制论》，第66卷，第4期，第319–325页，1992年。[8] P. Érdi、T. Grőbler、G. Barna 和 K. Kaski，“嗅球的动力学：分岔、学习与记忆”，《生物控制论》，第69卷，第1期，第57–66页，1993年。[9] E. M. Izhikevich，“多个尖点分岔”，神经网络，第11卷，第3期，第495–508页，1998年。[10] J. Ma 和 J. Wu，“具有非单调反馈的耦合网络中的多稳态与通向蝴蝶的粘合分岔”，非线性，第22卷，第6期，第1383–1412页，2009年。[11] L. Eisenmann、Z. Monfared、N. Göring 和 D. Durstewitz，“循环神经网络训练中的分岔与损失跳变”，载于神经信息处理系统进展（A. Oh、T. Naumann、A. Globerson、K. Saenko、M. Hardt 和 S. Levine 编），第36卷，第70511–70547页，Curran Associates, Inc.，2023年。[12] B. O. Palsson 和 T. M. Groshans，“代谢网络动力学与控制的数学建模：VI. 单个生化控制回路中的动态分岔”，理论生物学杂志，第131卷，第1期，第43–53页，1988年。[13] M. T. Borisuk 和 J. Tyson，“蛙卵有丝分裂调控模型的分岔分析”，理论生物学杂志，第195卷，第69–85页，1998年11月。[14] S. Kar、W. T. Baumann、M. R. Paul 和 J. J. Tyson，“探究噪声在真核细胞周期中的作用”，《美国国家科学院院刊》，第106卷，第16期，第6471–6476页，2009年。[15] E. Marco、R. L. Karp、G. Guo、P. Robson、A. H. Hart、L. Trippa 和 G.-C. Yuan，“单细胞基因表达数据的分岔分析揭示表观遗传景观”，《美国国家科学院院刊》，第111卷，第52期，2014年。[16] J. E. Ferrell，“双稳态、分岔与沃丁顿表观遗传景观”，当代生物学，第22卷，第11期，第R458–R466页，2012年。[17] L. Qian、E. Winfree 和 J. Bruck，“利用DNA链置换级联实现神经网络计算”，《自然》，第475卷，第368–372页，2011年。[18] C. Kieffer、A. J. Genot、Y. Rondelez 和 G. Gines，“用于分子分类的分子计算”，高级生物学，第7卷，第2200203页，2023年。[19] C. C. Samaniego、E. Wallace、F. Blanchini、E. Franco 和 G. Giordano，“由酶促反应构建的神经网络可用作线性和非线性分类器”，*bioRxiv*，2024年。[20] A. J. Van Der Linden、P. A. Pieters、M. W. Bartelds、B. L. Nathalia、P. Yin、W. T. S. Huck、J. Kim 和 T. F. A. De Greef，“基于核糖调控子的无细胞感知机进行DNA输入分类”，*ACS*合成生物学，第11卷，第1510–1520页，2022年。[21] K. M. Cherry 和 L. Qian，“利用基于DNA的赢家通吃神经网络扩展分子模式识别”，《自然》，第559卷，第370–376页，2018年。[22] X. Xiong、T. Zhu、Y. Zhu、M. Cao、J. Xiao、L. Li、F. Wang、C. Fan 和 H. Pei，“基于DNA调控电路的分子卷积神经网络”，自然·机器智能，第4卷，第625–635页，2022年。

[23] R. Lopez、R. Wang和G. Seelig，“用于疾病诊断的分子多基因分类器”，《自然·化学》，第10卷，第7期，第746–754页，2018年。[24] M. G. Baltussen、T. J. De Jong、Q. Duez、W. E. Robinson和W. T. S. Huck，“自组织反应网络中的化学储备池计算”，《自然》，第631卷，第8021期，第549–555页，2024年。[25] J. Stricker、S. Cookson、M. R. Bennett、W. H. Mather、L. S. Tsimring和J. Hasty，“一种快速、稳健且可调的合成基因振荡器”，《自然》，第456卷，第7221期，第516–519页，2008年。[26] T. Fujii和Y. Rondelez，“捕食者—猎物分子生态系统”，《*ACS Nano*》，第7卷，第1期，第27–34页，2013年。[27] N. Srinivas、J. Parkin、G. Seelig、E. Winfree和D. Soloveichik，“无酶核酸动力系统”，《科学》，第358卷，第6369期，文章编号eaal2052，2017年。[28] T. M. Bury、R. I. Sujith、I. Pavithran、M. Scheffer、T. M. Lenton、M. Anand和C. T. Bauch，“用于临界转变点早期预警信号的深度学习”，《美国国家科学院院刊》，第118卷，第39期，文章编号e2106140118，2021年。[29] S. Deb、S. Sidheekh、C. F. Clements、N. C. Krishnan和P. S. Dutta，“在简单模型上训练的机器学习方法能够预测复杂自然系统中的临界转变”，《英国皇家学会开放科学》，第9卷，第2期，文章编号211475，2022年。[30] M. Demazure，“突变理论”，载于分岔与突变：非线性问题解的几何，第115–145页，柏林，海德堡：Springer Berlin Heidelberg，2000年。[31] T. Plesa、A. Dack和T. E. Ouldridge，“合成生物学中的积分反馈：负平衡突变”，《数学化学杂志》，第61卷，第9期，第1980–2018页，2023年。[32] G. Yang、D. Basanta和G. Piliouras，“分岔机制设计——从最优统一税到更好的癌症治疗”，《*Games*》，第9卷，第2期，第21页，2018年。[33] T. Yang、D. Hathcock、Y. Chen、P. L. McEuen、J. P. Sethna、I. Cohen和I. Griniasty，“由分岔指导的多状态机器设计”，《美国国家科学院院刊》，第120卷，第34期，文章编号e2300081120，2023年。[34] A. J. Genot、A. Baccouche、R. Sieskind、N. Aubert-Kato、N. Bredeche、J. F. Bartolo、V. Taly、T. Fujii和Y. Rondelez，“非线性生化电路中分岔的高分辨率映射”，《自然·化学》，第8卷，第8期，第760–767页，2016年。[35] N. Lobato-Dauzier、A. Baccouche、G. Gines、T. Levi、Y. Rondelez、T. Fujii、S. H. Kim、N. Aubert-Kato和A. J. Genot，“利用基于DNA的脉冲化学神经元进行温度的神经编码”，《自然·化学工程》，第1卷，第8期，第510–521页，2024年。[36] I. Otero-Muras和J. R. Banga，“基于优化的非线性常微分方程模型中折叠分岔预测”，《*IFAC-PapersOnLine*》，第51卷，第15期，第485–490页，2018年。[37] I. Otero-Muras、R. Perez-Carrasco、J. R. Banga和C. P. Barnes，“具有最优蘑菇型分岔行为的基因电路自动化设计”，《*iScience*》，第26卷，第6期，文章编号106836，2023年。

[38] G. Szep、N. Dalchau和A. Csikász-Nagy，“利用分岔图进行参数推断”，载于神经信息处理系统进展（M. Ranzato、A. Beygelzimer、Y. Dauphin、P. S. Liang和J. W. Vaughan编），第34卷，第5620–5630页，Curran Associates, Inc.，2021年。[39] M. Fucho-Rius、S. Maretvadakethope、R. Pérez-Carrasco、A. Haro、T. Alarcón和J. Sardanyés，“局部邻近分岔导致临界减速中的协同效应：蘑菇分岔的情形”，2024年。[40] A. Mélot、E. Denimal和L. Renson，“用于控制分岔结构的多参数优化”，英国皇家学会会刊*A*辑：数学、物理与工程科学，第480卷，第2283期，文章编号20230505，2024年。[41] I. Otero-Muras、P. Yordanov和J. Stelling，“生化开关逆分岔的一种方法：从剂量-反应曲线推断参数”，*BMC*系统生物学，第8卷，第1期，第114页，2014年。[42] M. Banaji、B. Boros和J. Hofbauer，“反应少且分子度低的平面二次质量作用网络中的分岔”，非线性动力学，第112卷，第23期，第21425–21448页，2024年。arXiv: 2406.13451 [math]。[43] T. Plesa、T. Vejchodský和R. Erban，“具有同宿分岔的化学反应系统：一个逆问题”，《数学化学杂志》，第54卷，第10期，第1884–1915页，2016年。[44] T. Plesa，“将动力系统映射为化学反应”，2024年。[45] E. H. Kerner，“非线性常微分系统的通用形式”，数学物理学杂志，第22卷，第7期，第1366–1371页，1981年。[46] N. Samardzija、L. D. Greller和E. Wasserman，“源自机械与电气动力系统的非线性化学动力学方案”，化学物理学杂志，第90卷，第4期，第2296–2304页，1989年。[47] K. Kowalski，“非线性动力系统的通用形式”，化学物理快报，第209卷，第1–2期，第167–170页，1993年。[48] D. Poland，“协同催化与化学混沌：洛伦兹方程的化学模型”，物理学*D*辑：非线性现象，第65卷，第1–2期，第86–99页，1993年。[49] K. M. Hangos和G. Szederkényi，“不同时间尺度上反应动力学系统模型的质量作用实现”，物理学杂志：会议系列，第268卷，文章编号012009，2011年。[50] T. Plesa、T. Vejchodský和R. Erban，“统计推断测试模型：呈现极限环分岔与双稳态的二维反应系统”，载于计算细胞生物学的随机过程、多尺度建模与数值方法，第3–27页，施普林格国际出版公司，2017年。[51] A. Dack、B. Qureshi、T. E. Ouldridge和T. Plesa，“逼近任意动力学的循环神经化学反应网络”，2025年。arXiv:2406.03456。[52] A. Hjelmfelt、E. D. Weinberger和J. Ross，“神经网络与图灵机的化学实现”，《美国国家科学院院刊》，第88卷，第10983–10987页，1991年。

[53] J. Kim、J. Hopfield和E. Winfree，“体外转录回路的神经网络计算”，神经信息处理系统进展，第17卷，2004年。[54] H.-J. K. Chiang、J.-H. R. Jiang和F. Fages，“生化系统中的可重构神经形态计算”，载于*2015*年第*37*届*IEEE*医学与生物学工程学会年度国际会议（*EMBC*），第937–940页，2015年。[55] W. Poole、A. Ortiz-Muñoz、A. Behera、N. S. Jones、T. E. Ouldridge、E. Winfree和M. Gopalkrishnan，“化学玻尔兹曼机”，载于*DNA 2017*：*DNA*计算与分子编程，第10467卷，第210–231页，施普林格国际出版公司，2017年。[56] D. F. Anderson、B. Joshi和A. Deshpande，“论神经网络的反应网络实现”，《英国皇家学会界面》，第18卷，第20210031页，2021年。[57] J. Linder、Y.-J. Chen、D. Wong、G. Seelig、L. Ceze和K. Strauss，“二值化神经网络的鲁棒数字分子设计”，载于第*27*届*DNA*计算与分子编程国际会议（*DNA 27*），第205卷，第1:1–1:20页，2021年。[58] R. T. Nagipogu和J. H. Reif，“NeuralCRNs：化学反应网络中学习的自然实现”，2024年。[59] M. Vasić、C. Chalk、A. Luchsinger、S. Khurshid和D. Soloveichik，“速率无关化学反应网络的编程与训练”，《美国国家科学院院刊》，第119卷，第e2111552119页，2022年。[60] A. Moorman、C. C. Samaniego、C. Maley和R. Weiss，“动力学生物分子神经网络”，载于*2019*年*IEEE*第*58*届决策与控制会议（*CDC*），第1797–1802页，2019年。[61] M. Feinberg，“化学反应网络讲义”，1979年。[62] T. S. Gardner、C. R. Cantor和J. J. Collins，“大肠杆菌中基因切换开关的构建”，《自然》，第403卷，第6767期，第339–342页，2000年。[63] T.-M. Yi、Y. Huang、M. I. Simon和J. Doyle，“通过积分反馈控制实现细菌趋化性中的鲁棒完美适应”，《美国国家科学院院刊》，第97卷，第9期，第4649–4653页，2000年。[64] A. M. Turing，“形态发生的化学基础”，《伦敦皇家学会哲学汇刊：*B*辑，生物科学》，第237卷，第641期，第37–72页，1952年。[65] P. Glendinning，常微分方程中的同宿分岔，第285–293页。马萨诸塞州波士顿：施普林格美国公司，1987年。[66] L. Perko，微分方程与动力系统，应用数学文本第7卷。纽约州纽约市：施普林格纽约，2001年。[67] A. F. Filippov，右端不连续的微分方程，数学及其应用第18卷。多德雷赫特：施普林格荷兰，1988年。[68] U. Anand、A. Dey、A. K. S. Chandel、R. Sanyal、A. Mishra、D. K. Pandey、V. De Falco、A. Upadhyay、R. Kandimalla、A. Chaudhary、J. K. Dhanjal、S. Dewanjee、J. Vallamkondu和J. M. Pérez De La Lastra，“癌症化疗及其延伸：现状、候选药物、相关风险与靶向治疗药物进展”，《基因与疾病》，第10卷，第4期，第1367–1401页，2023年。

[69] D. V. Patangia、C. Anthony Ryan、E. Dempsey、R. Paul Ross和C. Stanton，“抗生素对人体微生物组的影响及其对宿主健康的后果”，*MicrobiologyOpen*，第11卷，第1期，第e1260页，2022年。[70] C. M. Baker、M. J. Ferrari和K. Shea，“超越剂量：脉冲式抗生素治疗方案可在降低耐药性的同时维持个体获益”，*Scientific Reports*，第8卷，第1期，第5866页，2018年。[71] X. Wang、H. Zhang和X. Chen，“癌症中的耐药性及其应对”，*Cancer Drug Resistance*，2019年。[72] L. S. Satin、P. C. Butler、J. Ha和A. S. Sherman，“脉冲式胰岛素分泌、糖耐量受损与2型糖尿病”，*Molecular Aspects of Medicine*，第42卷，第61–77页，2015年。[73] C. Zhang、Y. Zhao、X. Xu、R. Xu、H. Li、X. Teng、Y. Du、Y. Miao、H.-c. Lin和D. Han，“基于DNA分子计算的癌症诊断”，*Nature Nanotechnology*，第15卷，第8期，第709–715页，2020年。[74] S. Shah、T. Song、X. Song、M. Yang和J. Reif，“利用链置换聚合酶实现任意化学反应网络”，载于*DNA*计算与分子编程 （C. Thachuk和Y. Liu编），第11648卷，第21–36页，沙姆：施普林格国际出版公司，2019年。[75] R. Zhu、J. M. Del Rio-Salgado、J. Garcia-Ojalvo和M. B. Elowitz，“哺乳动物细胞中的合成多稳态”，《科学》，第375卷，第6578期，第eabg9765页，2022年。[76] D. E. Rumelhart、G. E. Hinton和R. J. Williams，“通过反向传播误差进行表示学习”，《自然》，第323卷，第6088期，第533–536页，1986年。[77] A. Dack、T. Plesa和T. E. Ouldridge，“github.com/alexdack/rncrn_bifs_data_def_piecewise”，2026年7月。[78] J. Bradbury、R. Frostig、P. Hawkins、M. J. Johnson、C. Leary、D. Maclaurin、G. Necula、A. Paszke、J. VanderPlas、S. Wanderman-Milne和Q. Zhang，“JAX：Python+NumPy程序的可组合变换”，2026年。原始日期：2018年10月25日T21:25:02Z。[79] DeepMind、I. Babuschkin、K. Baumli、A. Bell、S. Bhupatiraju、J. Bruce、P. Buchlovsky、D. Budden、T. Cai、A. Clark、I. Danihelka、A. Dedieu、C. Fantacci、J. Godwin、C. Jones、R. Hemsley、T. Hennigan、M. Hessel、S. Hou、S. Kapturowski、T. Keck、I. Kemaev、M. King、M. Kunesch、L. Martens、H. Merzic、V. Mikulik、T. Norman、G. Papamakarios、J. Quan、R. Ring、F. Ruiz、A. Sanchez、L. Sartran、R. Schneider、E. Sezener、S. Spencer、S. Srinivasan、M. Stanojević、W. Stokowiec、L. Wang、G. Zhou和F. Viola，“DeepMind JAX生态系统”，2020年。

A 附录：分岔示例

A.1 霍普夫分岔

我们使用算法 2（算法1的一个修改版本），该版本来自 [51] 并采用静态执行物种，利用参数化 RNCRN 在 $\mathbb{K}_1 = [3.5, 6.5]$, $\mathbb{K}_2 = [3.5, 6.5]$ 和 $\mathbb{L} = [1, 3]$ 上近似目标系统 (10)。采用含有 $M = 5$个化学感知器、系数为 $\beta_1 = \beta_2 = 260$、 $\gamma = 1$ 和的 RNCRN，可满足绝对容差 $\varepsilon \approx 10^{-1}$ ，

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} -4.315 \\ -5.861 \\ -9.788 \\ 3.796 \\ -1.209 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} -1.505 \\ -4.968 \\ 0.149 \\ -25.501 \\ 0.824 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 10.656 \\ 8.520 \\ 5.385 \\ 3.369 \\ 4.653 \end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -1.298 \\ -0.228 \\ -1.545 \\ 0.103 \\ -2.239 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -0.599 \\ -0.131 \\ 0.061 \\ -0.940 \\ 1.676 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} 0.105 \\ -0.080 \\ 0.070 \\ 0.039 \\ 0.069 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,5})^\top$ 适用于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{5,i})^\top$ 适用于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_5)^\top$, 以及 $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_5)^\top$。约化常微分方程为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \lambda_1) = 260 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} \sigma_1 \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \lambda_1 + \theta_j \right), \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \lambda_1) = 260 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} \sigma_1 \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \lambda_1 + \theta_j \right), \end{aligned} \tag{22}$$

而完整常微分方程为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} &= 260 + x_1 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} y_j \right), & \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} &= 260 + x_2 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} y_j \right), \\ \mu \frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= 1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{1,i} x_i + \psi_1 \lambda_1 + \theta_1 \right) y_1 - y_1^2, & \mu \frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= 1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{2,i} x_i + \psi_2 \lambda_1 + \theta_2 \right) y_2 - y_2^2, \\ \mu \frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} &= 1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{3,i} x_i + \psi_3 \lambda_1 + \theta_3 \right) y_3 - y_3^2, & \mu \frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} &= 1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{4,i} x_i + \psi_4 \lambda_1 + \theta_4 \right) y_4 - y_4^2, \\ \mu \frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} &= 1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{5,i} x_i + \psi_5 \lambda_1 + \theta_5 \right) y_5 - y_5^2, & \frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} &= 0, \end{aligned} \tag{23}$$

这里，我们假设一般的初始浓度： $x_1(0) = a_1 \in [3.5, 6.5]$, $x_2(0) = a_2 \in [3.5, 6.5]$, 以及$y_1(0) = b_1 \geq 0$, $y_2(0) = b_2 \geq 0$, $y_3(0) = b_3 \geq 0$, $y_4(0) = b_4 \geq 0$, 以及 $y_5(0) = b_5 \geq 0$。文中列出的系数四舍五入到小数点后三位；完整精度的系数可在代码仓库中获取。

在图2中，我们为执行物种使用了一系列初始条件，但化学感知机物种始终从零开始。对于图2（a），我们使用了 $\bar{x}_1(0) = 2$, $\bar{x}_2(0) = 2$；对于图2（b）中的 RNCRN近似，我们使用了 $x_1(0) = 2$, $x_2(0) = 2$。

A.2 同宿分岔

我们使用算法 2（算法1的修改版本） [51] ，其中包含静态执行物种，以使用参数化 RNCRN 在 $\mathbb{K}_1 = [3.5, 6.5]$, $\mathbb{K}_2 = [3.5, 6.5]$ 和 $\mathbb{L} = [1.9, 2.1]$ 上近似目标系统（11）。使用具有 $M = 10$ 个化学感知器和系数 $\beta_1 = \beta_2 = 1$、$\gamma = 1$ 的 RNCRN 可满足容差 $\varepsilon \approx 10^{-3}$ ，并且

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 0.307 \\ -0.533 \\ 0.324 \\ 0.999 \\ 4.348 \\ 1.820 \\ -2.823 \\ -0.744 \\ -1.270 \\ 0.837 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 0.812 \\ 0.923 \\ -0.425 \\ -0.260 \\ -0.191 \\ -2.821 \\ -0.174 \\ 0.228 \\ -0.349 \\ -0.636 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 0.790 \\ 1.455 \\ -1.391 \\ 3.440 \\ -1.901 \\ 3.461 \\ 0.657 \\ 0.634 \\ 1.932 \\ -3.335 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} 0.372 \\ -0.183 \\ -0.205 \\ 0.448 \\ -0.986 \\ -0.056 \\ -0.763 \\ 1.043 \\ -0.253 \\ 0.271 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -0.697 \\ 0.084 \\ 0.835 \\ -1.034 \\ 0.797 \\ -1.153 \\ 0.025 \\ -0.515 \\ -0.296 \\ 0.335 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} 0.364 \\ -0.022 \\ -0.781 \\ -0.085 \\ 0.062 \\ -0.023 \\ 0.586 \\ -0.556 \\ 0.323 \\ 0.385 \end{pmatrix}, \tag{24}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,10})^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{10,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_{10})^\top$，且 $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{10})^\top$。约化常微分方程表示为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \lambda_1) = 1 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{10} \alpha_{1,j} \sigma_1 \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \lambda_1 + \theta_j \right), \\ \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \lambda_1) = 1 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{10} \alpha_{2,j} \sigma_1 \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \lambda_1 + \theta_j \right), \end{aligned} \tag{25}$$

而完整常微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 1 + x_1\left(\sum_{j=1}^{10}\alpha_{1,j}y_j\right), \qquad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 1 + x_2\left(\sum_{j=1}^{10}\alpha_{2,j}y_j\right),$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i + \psi_1\lambda_1 + \theta_1\right)y_1 - y_1^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i + \psi_2\lambda_1 + \theta_2\right)y_2 - y_2^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i + \psi_3\lambda_1 + \theta_3\right)y_3 - y_3^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i + \psi_4\lambda_1 + \theta_4\right)y_4 - y_4^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i + \psi_5\lambda_1 + \theta_5\right)y_5 - y_5^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_6}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{6,i}x_i + \psi_6\lambda_1 + \theta_6\right)y_6 - y_6^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_7}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{7,i}x_i + \psi_7\lambda_1 + \theta_7\right)y_7 - y_7^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_8}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{8,i}x_i + \psi_8\lambda_1 + \theta_8\right)y_8 - y_8^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_9}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{9,i}x_i + \psi_9\lambda_1 + \theta_9\right)y_9 - y_9^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_{10}}{\mathrm{d}t} = 1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{10,i}x_i + \psi_{10}\lambda_1 + \theta_{10}\right)y_{10} - y_{10}^2,$$

$$\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{26}$$

这里，我们假设一般的初始浓度： $x_1(0) = a_1 \in [3,7]$、 $x_2(0) = a_2 \in [3,7]$，以及$y_1(0) = b_1 \geq 0$、 $y_2(0) = b_2 \geq 0$、 $y_3(0) = b_3 \geq 0$、 $y_4(0) = b_4 \geq 0$、 $y_5(0) = b_5 \geq 0$、 $y_6(0) = b_6 \geq 0$、$y_7(0) = b_7 \geq 0$、 $y_8(0) = b_8 \geq 0$、 $y_9(0) = b_9 \geq 0$，以及 $y_{10}(0) = b_{10} \geq 0$。文中引用的系数已四舍五入至小数点后三位，完整精度的系数可在代码仓库中获取。此示例需要较低的绝对容差，因为同宿轨道是一种难以有效近似的精细动力学行为。

在图2中，我们为执行物种使用了一系列初始条件，但化学感知机物种的初始值始终为零。由于同宿轨道具有敏感性，在同宿分岔分析中，我们使用了略有不同的执行物种浓度。在图2 (c)中，我们使用了： $\bar{x}_1(0) = 3.5$、 $\bar{x}_2(0) = 6.0$ ，用于包含 $\lambda_1 = 1.9$的子面板；以及 $\bar{x}_1(0) = 3.5$、 $\bar{x}_2(0) = 6.0435$ ，用于包含 $\lambda_1 = 2$ 和 $\lambda_1 = 2.1$的子面板。在图2 (d)中，我们使用了： $x_1(0) = 3.5$、 $x_2(0) = 6.0$，用于包含 $\lambda_1 = 1.9$的子面板； $x_1(0) = 3.5$、 $x_2(0) = 6.04$ ，用于包含 $\lambda_1 = 1.997$的子面板；以及$x_1(0) = 3.5$、 $x_2(0) = 6.0435$ ，用于包含 $\lambda_1 = 2.1$的子面板。

A.3 仅在临界状态下训练实现霍普夫分岔

现在我们将证明，在霍普夫分岔的临界点训练 RNCRN，可以找到对 RNCRN 参数施加的随机扰动，使其重现霍普夫分岔的定性行为，而训练过程中无需使用任何关于分岔任一侧的数据。

考虑处于临界点的霍普夫分岔目标常微分方程，其平衡点为 $(x_1,\ x_2) = (5,\ 5)$

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_1}{\mathrm{d}t} = (-(\bar{x}_1-5)^2 - (\bar{x}_2-5)^2)(\bar{x}_1-5) - (\bar{x}_2-5),$$
$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}_2}{\mathrm{d}t} = (-(\bar{x}_1-5)^2 - (\bar{x}_2-5)^2)(\bar{x}_2-5) + (\bar{x}_1-5). \tag{27}$$

在图 2(a) 中， $\lambda = 2$ 图展示了式 (27) 的动力学。我们训练一个 RNCRN 来近似式 (27)，并展示约化RNCRN 相关的向量场，以及一条示例（$x_1(t)$ $x_2(t)$）轨迹

见图 8(b)。在图 8(a) 和 (c) 中，我们展示了通过施加特定但随机采样的速率常数扰动，可以诱导单稳态或振荡行为。与参数化 RNCRN 不同，仅在临界状态下训练 RNCRN 并未使用有关分岔参数的数据；相反，这种行为是自然涌现的，表明 RNCRN 正在复现底层常微分方程 (27) 数学结构的关键特征。

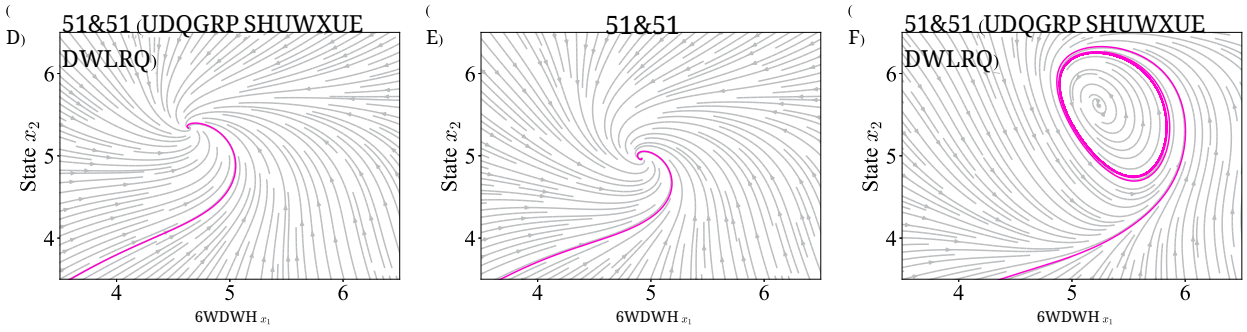


图 8：在霍普夫分岔临界点训练的 RNCRN，即 (27)，展示了将动力学外推至训练数据以外的行为。面板 (b) 显示经训练以近似 (27) 的 $M = 6$化学感知器 RNCRN，而面板 (a) 和 (c) 显示速率随机扰动后的同一 RNCRN近似（RNCRN 的速率见附录 A.3）。所有面板均以灰色箭头显示各自的约化 RNCRN向量场，并以洋红色显示 ($x_1(t)$ $x_2(t)$)-时间轨迹及 $\mu = 0.01$，以及初始浓度 $x_1(0) = x_2(0) = 2$ 和$y_1(0) = \cdots = y_6(0) = 0$。

我们使用来自 [51] 的算法1，以单层反应网络化学反应网络（未参数化）在 $\mathbb{K}_1 = [3.5, 6.5]$，$\mathbb{K}_2 = [3.5, 6.5]$ 上逼近目标系统（27）。容差 $\varepsilon \approx 10^0$ 由具有 $M = 6$ 个化学感知器以及系数 $\beta_1 = \beta_2 = 1$、$\gamma = 1$和的RNCRN满足

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 0.492 \\ -0.117 \\ 2.229 \\ -0.708 \\ -1.146 \\ 1.363 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} -0.283 \\ 0.657 \\ 2.199 \\ -1.294 \\ -2.632 \\ 3.118 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 2.243 \\ 10.838 \\ 10.718 \\ -3.164 \\ 7.959 \\ 3.002 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -3.672 \\ 0.911 \\ -1.391 \\ 0.241 \\ -0.454 \\ -0.077 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} 2.091 \\ -3.981 \\ -1.433 \\ 1.058 \\ -0.922 \\ -0.073 \end{pmatrix}, \tag{28}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,6})^\top$ 对于 $i = 1, 2$，$\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{6,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$，以及 $\boldsymbol{\theta} =$

$(\theta_1,\ \theta_2、\ ...、\ \theta_6)^\top$。约化常微分方程为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2) = 1+\tilde{x}_1\sum_{j=1}^{6}\alpha_{1,j}\sigma_1\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1+\omega_{j,2}\tilde{x}_2+\theta_j\right),\\ \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2) = 1+\tilde{x}_2\sum_{j=1}^{6}\alpha_{2,j}\sigma_1\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1+\omega_{j,2}\tilde{x}_2+\theta_j\right),\end{aligned} \tag{29}$$

而完整常微分方程为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} &= 1+x_1\left(\sum_{j=1}^{6}\alpha_{1,j}y_j\right), & \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} &= 1+x_2\left(\sum_{j=1}^{6}\alpha_{2,j}y_j\right),\\ \mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i+\theta_1\right)y_1-y_1^2, & \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i+\theta_2\right)y_2-y_2^2,\\ \mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i+\theta_3\right)y_3-y_3^2, & \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i+\theta_4\right)y_4-y_4^2,\\ \mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i+\theta_5\right)y_5-y_5^2, & \mu\frac{\mathrm{d}y_6}{\mathrm{d}t} &= 1+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{6,i}x_i+\theta_6\right)y_6-y_6^2,\end{aligned} \tag{30}$$

这里，我们假设一般的初始浓度：$x_1(0) = a_1 \in [3.5, 6.5]$、$x_2(0) = a_2 \in [3.5, 6.5]$，以及$y_1(0) = b_1 \geq 0$、$y_2(0) = b_2 \geq 0$、$y_3(0) = b_3 \geq 0$、$y_4(0) = b_4 \geq 0$、$y_5(0) = b_5 \geq 0$，以及$y_6(0) = b_6 \geq 0$。系数在正文中四舍五入到小数点后三位，完整精度的系数可在代码仓库中获取。

随机扰动速率。通过对方程(28)中的速率常数施加 10% 的均匀噪声进行随机扰动，我们找到了能够在霍普夫分岔处产生振荡器动力学行为的速率常数组合，例如：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\alpha}_1 &= \begin{pmatrix}0.532\\-0.106\\2.315\\-0.693\\-1.116\\1.467\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix}-0.286\\0.645\\1.989\\-1.231\\-2.614\\3.228\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix}2.025\\10.419\\11.140\\-3.029\\8.754\\3.069\end{pmatrix},\\ \boldsymbol{\omega_1} &= \begin{pmatrix}-3.912\\0.843\\-1.345\\0.222\\-0.481\\-0.083\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix}2.059\\-3.679\\-1.552\\1.070\\-0.929\\-0.075\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{31}$$

此外，为求完整，我们还找到了单稳态行为的示例，包括:

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 0.493 \\ -0.117 \\ 2.223 \\ -0.711 \\ -1.147 \\ 1.355 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} -0.284 \\ 0.657 \\ 2.192 \\ -1.299 \\ -2.609 \\ 3.110 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 2.220 \\ 10.930 \\ 10.815 \\ -3.142 \\ 7.890 \\ 2.991 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -3.667 \\ 0.920 \\ -1.396 \\ 0.241 \\ -0.451 \\ -0.077 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} 2.085 \\ -4.016 \\ -1.432 \\ 1.065 \\ -0.924 \\ -0.073 \end{pmatrix}. \tag{32}$$

B 附录：分段系统

现在我们介绍与 B 节相关的 RNCRN。

B.1 简单单稳态-双稳态分段系统

我们使用算法 3（这是对来自 [51] 的算法1的修改版本），加入了静态执行物种和自动微分技术，以通过参数化 RNCRN 近似 $\mathbb{K}_1 = [1, 9]$ 和 $\mathbb{L}_1 = \{1\}$，$\mathbb{L}_2 = \{0\}$ 上的目标系统 (12)。使用 $M = 3$ 个化学感知器和系数的 RNCRN 满足容差 $\varepsilon \approx 10^1$

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} &= 35.700 - 54.403x_1y_1 + 188.696x_1y_2 - 112.261x_1y_3, && x_1(0) = a_1 \in \mathbb{K}_1,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= 52.618 + 137.501x_1y_1 - 477.661\lambda_1y_1 - 1513.810y_1 - 90.515y_1^2, && y_1(0) = b_1 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= 179.420 - 249.394x_1y_2 - 21494.744\lambda_1y_2 - 220.319y_2 - 12.931y_2^2, && y_2(0) = b_2 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} &= 130.184 - 225.249x_1y_3 - 1876.261\lambda_1y_3 + 854.494y_3 - 1122.973y_3^2, && y_3(0) = b_3 \geq 0,\\
\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} &= 0, && \lambda_1(0) = c_1 \in \mathbb{K}_{\boldsymbol{r}}.
\end{aligned} \tag{33}
$$

方程 (33) 的约化向量场为

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= 35.700 - 54.403\tilde{x}_1\tilde{y}_1 + 188.696\tilde{x}_1\tilde{y}_2 - 112.261\tilde{x}_1\tilde{y}_3, && x_1(0) = a_1 \in \mathbb{K}_1,\\
\tilde{y}_1 &= \sigma_{52.618,90.515}(137.501\tilde{x}_1 - 477.661\tilde{\lambda}_1 - 1513.810),\\
\tilde{y}_2 &= \sigma_{179.420,12.931}(-249.394\tilde{x}_1 - 21494.744\tilde{\lambda}_1 - 220.319),\\
\tilde{y}_3 &= \sigma_{130.184,1122.973}(-225.249\tilde{x}_1 - 1876.261\tilde{\lambda}_1 + 854.494),\\
\tilde{\lambda}_1 &= \lambda(0) = c_1
\end{aligned} \tag{34}
$$

其中，化学激活函数的定义与方程 (66) 中相同。

B.2 XOR 门控的单稳-双稳分段系统

我们使用算法 4 训练分类控制的反应网络化学反应网络，即方程 (14)-(15)，以近似更复杂的单稳-双稳分段系统 (17)。直观而言，算法 4 首先训练一个参数化 RNCRN，以近似所需动力学状态之间的分岔。随后，训练一个由化学感知器组成的前馈网络，根据环境物种所需的分类边界，控制分岔参数的化学浓度。

在本附录中，我们将结合示例目标系统 (17)，逐步介绍算法 4 的各个步骤。

步骤 ***1***。 **逐点参数化RNCRN**。 为便于演示，我们使用第 4.1 节中的 RNCRN。从图 3(e) 可以看出，分岔点约为 10^{-2}。否则，应用算法 4 中的步骤(a) 。

步骤 ***2***。 **准静态分类化学反应网络**。 我们希望创建一种前馈分类，将目标方程 (17) 中的异或逻辑嵌入化学反应网络，并触发相应的动力学状态。也就是说，我们训练一个神经化学反应网络来近似函数

$$\bar{r}(\bar{\lambda_1}, \bar{\lambda_2}) = \begin{cases} 1 \text{ for all } (\bar{\lambda_1}, \bar{\lambda_2}) \in \mathbb{L}_1 = (\mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_2) \cup (\mathbb{K}_2 \times \mathbb{K}_1) \\ 0 \text{ for all } (\bar{\lambda_1}, \bar{\lambda_2}) \in \mathbb{L}_2 = (\mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_1) \cup (\mathbb{K}_2 \times \mathbb{K}_2), \end{cases} \tag{35}$$

其中 $\mathbb{K}_1 = [0, 1)$ 和 $\mathbb{K}_2 = [1, 2]$。我们定义一个由 $K = 4$ 化学感知器 [56] 组成的结构，该结构催化感知环境物种 Λ_1 和 Λ_2。这些感知化学感知器随后输入到分岔物种 R，该物种同样具有化学感知器结构，稍后将连接到参数化 RNCRN 以替代分岔参数。上述前馈化学感知器结构对应的反应速率方程定义为

$$\begin{aligned}
\mu\frac{\mathrm{d}z_1}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 2.726\lambda_1 z_1 - 3.025\lambda_2 z_1 + 0.296 z_1 - z_1^2, & z_1(0) = c_1 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_2}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 2.259\lambda_1 z_2 + 0.057\lambda_2 z_2 - 2.328 z_2 - z_2^2, & z_2(0) = c_2 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_3}{\mathrm{d}t} &= 0.01 - 0.051\lambda_1 z_3 - 2.511\lambda_2 z_3 + 2.582 z_3 - z_3^2, & z_3(0) = c_3 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_4}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 0.158\lambda_1 z_4 - 0.156\lambda_2 z_4 + 0.666 z_4 - z_4^2, & z_4(0) = c_4 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 4.528 z_1 r - 5.719 z_2 r - 5.648 z_3 r + 0.777 z_4 r + 0.682 r - r^2, & r(0) = d \geq 0, \\
\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} &= 0, & \lambda_1(0) = e_1 \geq 0, \\
\frac{\mathrm{d}\lambda_2}{\mathrm{d}t} &= 0, & \lambda_2(0) = e_2 \geq 0,
\end{aligned} \tag{36}$$

其中 $z_1, \ldots, z_4$ 是感知化学感知器物种随时间变化的分子浓度，λ_1 和 λ_2 是环境物种的分子浓度（假定为静态），r 是分岔物种的分子浓度。我们通过使用标准机器学习方法训练具有化学激活函数 σ_γ 的人工神经网络，然后将参数映射回完整的化学感知器反应速率方程，并附加一个时间尺度参数 μ，从而得到这些速率常数。

步骤 ***3. 动力学近似***。 如图5所示，将产生反应速率方程（33）和反应速率方程（36）的化学反应网络组合起来，即可构建完整的分类控制的反应网络化学反应网络；研究发现，$\mu = 0.001$ 参数已足够。

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} &= 35.700 - 54.403x_1y_1 + 188.696x_1y_2 - 112.261x_1y_3, && x_1(0) = a_1 \in \mathbb{K}_1,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} &= 52.618 + 137.501x_1y_1 - 477.661ry_1 - 1513.810y_1 - 90.515y_1^2, && y_1(0) = b_1 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} &= 179.420 - 249.394x_1y_2 - 21494.744ry_2 - 220.319y_2 - 12.931y_2^2, && y_2(0) = b_2 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} &= 130.184 - 225.249x_1y_3 - 1876.261ry_3 + 854.494y_3 - 1122.973y_3^2, && y_3(0) = b_3 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}z_1}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 2.726\lambda_1z_1 - 3.025\lambda_2z_1 + 0.296z_1 - z_1^2, && z_1(0) = c_1 \geq 0,\\
\frac{\mathrm{d}z_2}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 2.259\lambda_1z_2 + 0.057\lambda_2z_2 - 2.328z_2 - z_2^2, && z_2(0) = c_2 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}z_3}{\mathrm{d}t} &= 0.01 - 0.051\lambda_1z_3 - 2.511\lambda_2z_3 + 2.582z_3 - z_3^2, && z_3(0) = c_3 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}z_4}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 0.158\lambda_1z_4 - 0.156\lambda_2z_4 + 0.666z_4 - z_4^2, && z_4(0) = c_4 \geq 0,\\
\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} &= 0.01 + 4.528z_1r - 5.719z_2r - 5.648z_3r + 0.777z_4r + 0.682r - r^2, && r(0) = d \geq 0,\\
\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} &= 0, && \lambda_1(0) = e_1 \geq 0,\\
\frac{\mathrm{d}\lambda_2}{\mathrm{d}t} &= 0, && \lambda_2(0) = e_2 \geq 0,
\end{aligned}
\tag{37}
$$

C Appe附录：数据定义的极限环与切换示例

现在，我们使用算法1生成的训练数据对 RNCRN 进行训练，以学习由数据定义的动力学。在图9中，我们通过展示第5节示例中所使用数据的局部放大图，突出显示算法1生成的人工数据。

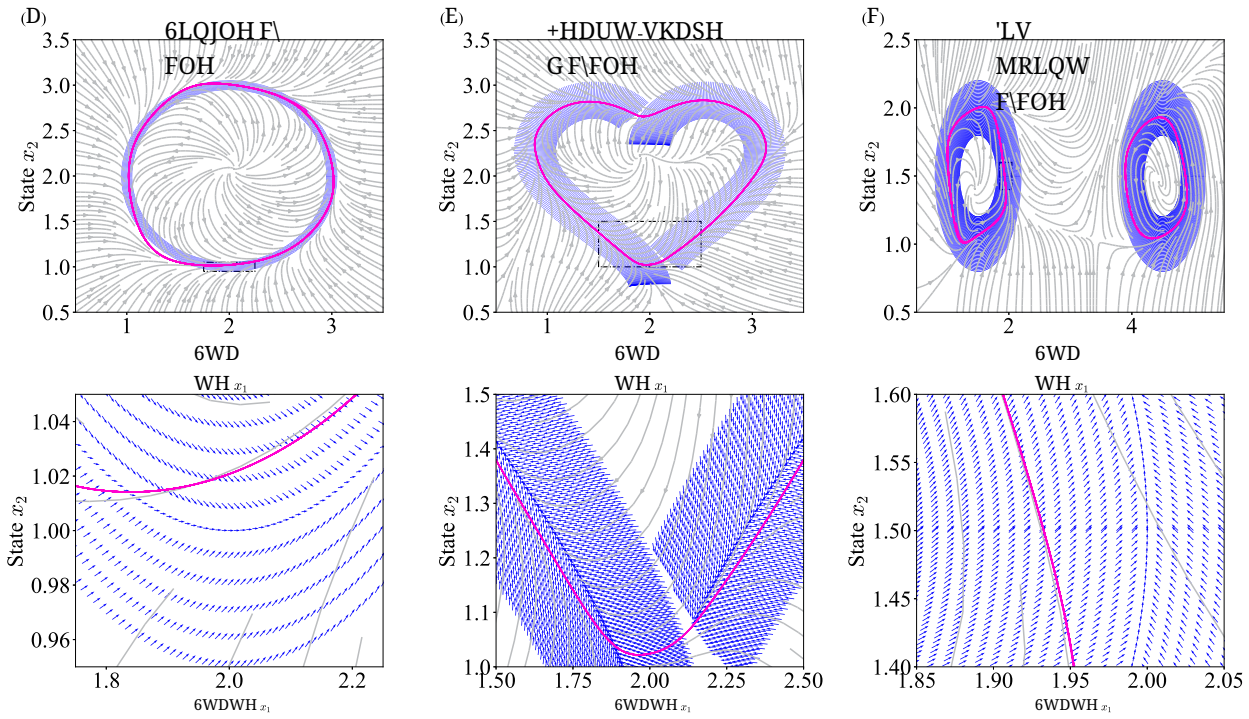


图9：用于训练数据定义吸引子的人工数据，与约化向量场（灰色）以及图6所示训练后 RNCRN 的时间轨迹一同绘出。

C.1 单圆形极限环（吸引子）

利用第 5.1 节中定义的参数方程、算法1和算法 5，我们找到了一个包含 $M = 5$ 个化学感知器及系数 $\beta_1 = 16.861$、$\beta_2 = 13.955$ 的 RNCRN，并且

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} -22.642 \\ -3.214 \\ -13.344 \\ -5.983 \\ 11.413 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 20.600 \\ -31.984 \\ 4.736 \\ -9.337 \\ -11.829 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 70.437 \\ -86.509 \\ -62.502 \\ 139.089 \\ 77.599 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -46.744 \\ -21.405 \\ 63.399 \\ -31.199 \\ 20.670 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -1.875 \\ 30.682 \\ -47.177 \\ -27.589 \\ -48.644 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 22.316 \\ 23.786 \\ 4.064 \\ 0.484 \\ 2.106 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 111.885 \\ 106.208 \\ 113.115 \\ 68.879 \\ 94.832 \end{pmatrix}, \tag{38}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,5})^\top$ 对于 $i = 1, 2$，$\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{5,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$，$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_5)^\top$，$\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_5)^\top$，以及 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_5)^\top$。约化常微分方程如下

by

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} = g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 16.861 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \theta_j\right),$$
$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} = g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 13.955 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \theta_j\right), \tag{39}$$

而完整常微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 16.861 + x_1\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{1,j}y_j\right), \qquad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 13.955 + x_2\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{2,j}y_j\right),$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 22.316 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i + \theta_1\right)y_1 - 111.885y_1^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 23.786 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i + \theta_2\right)y_2 - 106.208y_2^2,$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 4.064 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i + \theta_3\right)y_3 - 113.115y_3^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 0.484 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i + \theta_4\right)y_4 - 68.879y_4^2,$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 2.106 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i + \theta_5\right)y_5 - 94.832y_5^2, \tag{40}$$

这里，我们假设一般的初始浓度： $x_1(0) = a_1 > 0$， $x_2(0) = a_2 > 0$，以及 $y_1(0) = b_1 \geq 0$，$y_2(0) = b_2 \geq 0$，$y_3(0) = b_3 \geq 0$，$y_4(0) = b_4 \geq 0$，以及 $y_5(0) = b_5 \geq 0$。为便于在正文中引用，系数已四舍五入至小数点后3位，完整精度的系数可在代码仓库中获取。

C.2 单圆形极限环（排斥子）

如第 5.1 节所述，使用算法1（采用反向法向方向）和方程（18）生成的训练数据，按照算法 5 中阐述的方法训练了一个 RNCRN。图 10 展示了圆形排斥子轨道的约化 RNCRN 近似的向量场。

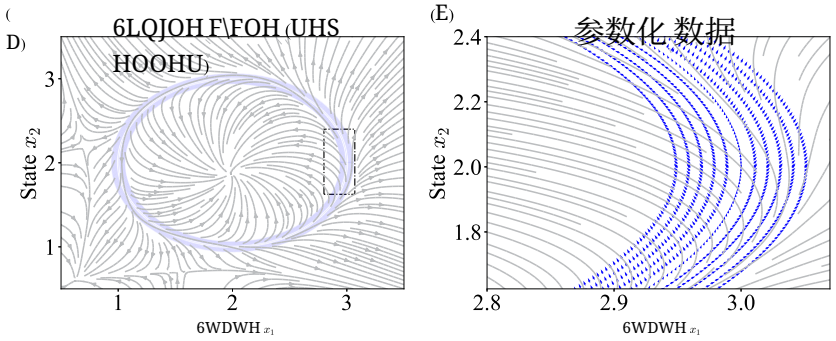


图 10：在数据上训练以实现圆形排斥子的示例RNCRN。蓝色为目标排斥子数据，该数据通过对参数方程（18）采样点，然后应用向量场插值算法（即算法1）生成。灰色为含5个化学感知器的RNCRN的约化RNCRN向量场（参数见附录C.2）。图(a)显示所关注的整个状态空间，而图(b)显示状态空间的局部放大，以突出训练数据。

此次训练得到一个包含 $M=5$ 个化学感知器、系数为 $\beta_1=81.948$、$\beta_2=77.952$，且

$$\boldsymbol{\alpha}_1=\begin{pmatrix}43.091\\-81.455\\-178.720\\-6.523\\-41.211\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}_2=\begin{pmatrix}-174.745\\-5.587\\51.884\\-69.925\\-45.358\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\theta}=\begin{pmatrix}-306.069\\422.215\\-377.697\\445.634\\411.775\end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{\omega_1}=\begin{pmatrix}125.349\\-355.600\\-354.684\\-48.422\\-48.630\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\omega_2}=\begin{pmatrix}-404.272\\-34.736\\130.538\\-344.728\\-43.372\end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}87.125\\31.103\\86.664\\26.322\\1.338\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\tau}=\begin{pmatrix}1.719\\236.683\\2.733\\239.852\\488.075\end{pmatrix},\tag{41}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i=(\alpha_i,1,\alpha_i,2,\ldots,\alpha_i,5)^\top$ 对于 $i=1,2$，$\boldsymbol{\omega_i}=(\omega_{1,i},\omega_{2,i},\ldots,\omega_{5,i})^\top$ 对于 $i=1,2$，$\boldsymbol{\theta}=(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_5)^\top$，$\boldsymbol{\gamma}=(\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_5)^\top$，以及 $\boldsymbol{\tau}=(\tau_1,\tau_2,\ldots,\tau_5)^\top$。约化常微分方程为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t}&=g_1(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)=81.948+\tilde{x}_1\sum_{j=1}^{5}\alpha_{1,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1+\omega_{j,2}\tilde{x}_2+\theta_j\right),\\ \frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t}&=g_2(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)=77.952+\tilde{x}_2\sum_{j=1}^{5}\alpha_{2,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1+\omega_{j,2}\tilde{x}_2+\theta_j\right),\end{aligned}\tag{42}$$

而完整常微分方程为

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}=81.948+x_1\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{1,j}y_j\right),\qquad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}=77.952+x_2\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{2,j}y_j\right),\\ &\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t}=87.125+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i+\theta_1\right)y_1-1.719y_1^2,\quad \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t}=31.103+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i+\theta_2\right)y_2-236.683y_2^2,\\ &\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t}=86.664+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i+\theta_3\right)y_3-2.733y_3^2,\quad \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t}=26.322+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i+\theta_4\right)y_4-239.852y_4^2,\\ &\mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t}=1.338+\left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i+\theta_5\right)y_5-488.075y_5^2,\end{aligned}\tag{43}$$

这里，我们假设初始浓度为一般值：$x_1(0)=a_1>0$、$x_2(0)=a_2>0$，以及 $y_1(0)=b_1\geq 0$、$y_2(0)=b_2\geq 0$、$y_3(0)=b_3\geq 0$、$y_4(0)=b_4\geq 0$，和 $y_5(0)=b_5\geq 0$。文中引用的系数均四舍五入至小数点后三位；完整精度的系数可在代码仓库中找到。

C.3 单圆形极限环（线性）

如第5节中的注记所述，算法1的填充点$Q_{d,k}^{\pm}$具有相关联的向量场 $d\mathbf{x}/dt=\eta\hat{}v_{d,d+1}\mp\eta\hat{}n_{d,d+1}\exp(\kappa\delta k)$，该向量场对距离呈指数依赖

δk。在本例中，我们表明，在训练RNCRN时用线性依赖替换指数依赖，同样可以产生所需的数据定义的圆形轨道，即我们对填充点使用向量场 $d\mathbf{x}/dt = \eta\hat{}v_{d,d+1} \mp \eta\hat{}n_{d,d+1}(\kappa\delta k)$。

使用上述对方程（18）的圆形方程应用算法1时所作的线性修改，并通过 $K = 20$、 $\delta = 0.01$、 $\kappa = 10$ 和 $\eta = 1$ 生成数据后，我们使用算法 5 训练了 RNCRN。图 11 显示了圆形排斥子轨道的约化 RNCRN 近似的向量场。

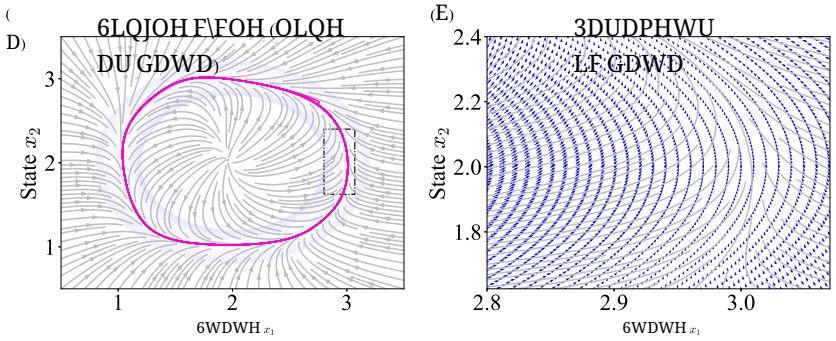


图 11：使用算法1的线性修改，在数据上训练得到的、用于实现圆形吸引子的 RNCRN 示例。蓝色部分表示目标吸引子数据，这些数据通过从参数方程（18）中采样点，再应用带有线性修改的向量场插值算法（即算法1）生成。灰色部分表示一个包含 5 个化学感知器的 RNCRN 的约化 RNCRN 向量场（参数见附录 C.3）。面板 (a) 显示了所关注的整个状态空间，面板 (b) 则放大了状态空间，以突出显示训练数据。时间轨迹使用以下初值进行模拟： $x_1(0) = 2.744$， $x_2(0) = 2.693$、 $\mu = 0.1$，以及 $y_1(0) = \ldots$， $y_5(0) = 0$。

此次训练生成了一个包含 $M = 5$ 个化学感知器、系数为 $\beta_1 = 16.552, \beta_2 = 23.165$ 的 RNCRN，并且

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} -8.177 \\ -16.814 \\ -21.754 \\ -7.906 \\ 15.501 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 26.539 \\ -22.747 \\ 4.566 \\ -6.631 \\ -30.088 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 59.477 \\ -35.099 \\ -60.028 \\ 90.654 \\ 54.644 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -33.517 \\ -28.584 \\ 39.503 \\ -22.314 \\ 0.131 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -9.963 \\ 19.259 \\ -40.894 \\ -17.509 \\ -40.181 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 23.272 \\ 27.928 \\ 8.608 \\ 0.397 \\ 20.500 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 56.930 \\ 62.523 \\ 61.866 \\ 36.392 \\ 46.726 \end{pmatrix}, \tag{44}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_i,1, \alpha_i,2, \ldots, \alpha_i,5)^\top$ 对于 $i = 1, 2$， $\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{5,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$， $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_5)^\top$， $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_5)^\top$，以及 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_5)^\top$。约化常微分方程如下

by

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} = g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 16.552 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} \sigma_{\gamma_j,\tau_j} \left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \theta_j\right),$$
$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} = g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 23.165 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} \sigma_{\gamma_j,\tau_j} \left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \theta_j\right), \tag{45}$$

而完整常微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 16.552 + x_1 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} y_j\right), \qquad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 23.165 + x_2 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} y_j\right),$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 23.272 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{1,i} x_i + \theta_1\right) y_1 - 56.930 y_1^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 27.928 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{2,i} x_i + \theta_2\right) y_2 - 62.523 y_2^2,$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 8.608 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{3,i} x_i + \theta_3\right) y_3 - 61.866 y_3^2, \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 0.397 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{4,i} x_i + \theta_4\right) y_4 - 36.392 y_4^2,$$
$$\mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 20.500 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{5,i} x_i + \theta_5\right) y_5 - 46.726 y_5^2, \tag{46}$$

这里假设一般的初始浓度： $x_1(0) = a_1 > 0$、 $x_2(0) = a_2 > 0$，以及 $y_1(0) = b_1 \geq 0$、$y_2(0) = b_2 \geq 0$、 $y_3(0) = b_3 \geq 0$、 $y_4(0) = b_4 \geq 0$ 和 $y_5(0) = b_5 \geq 0$。文中引用的系数四舍五入至小数点后三位，完整精度的系数可在代码仓库中获取。

C.4 心形极限环

如第 5.2 节所述，使用算法1和方程（19）生成的训练数据，通过算法 5 训练了一个 RNCRN。训练得到的 RNCRN 包含 $M = 10$ 个化学感知器，系数为 $\beta_1 = 32.263$, $\beta_2 = 0.220$，并且

$$
\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} -206.685 \\ 68.185 \\ 63.034 \\ 31.454 \\ -1.046 \\ -69.791 \\ 3.335 \\ 6.724 \\ -4.768 \\ -0.753 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 14.421 \\ 361.350 \\ 42.053 \\ -1596.404 \\ 11.659 \\ 445.898 \\ -26.598 \\ 4.145 \\ 9.770 \\ -24.237 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 399.866 \\ -2885.359 \\ -3238.521 \\ -4674.896 \\ 1634.028 \\ -2261.417 \\ 1268.967 \\ 1348.322 \\ -2966.115 \\ -965.133 \end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -752.176 \\ -1404.888 \\ -2126.800 \\ -6923.930 \\ -694.304 \\ -1179.076 \\ 44.345 \\ -472.745 \\ 2317.337 \\ 388.654 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -85.831 \\ -2904.666 \\ -3063.465 \\ -3358.036 \\ -126.843 \\ -2667.009 \\ -551.100 \\ -404.818 \\ -1782.721 \\ 29.470 \end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 102.958 \\ 317.511 \\ 12.669 \\ 422.712 \\ 0.056 \\ 435.578 \\ 0.572 \\ 0.087 \\ 0.189 \\ 10.109 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 735.035 \\ 6155.131 \\ 5217.168 \\ 2052.469 \\ 1814.245 \\ 6080.718 \\ 2388.553 \\ 519.255 \\ 5648.693 \\ 2210.594 \end{pmatrix}, \tag{47}
$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_i,1, \alpha_i,2, \ldots, \alpha_i,5)^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{5,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_5)^\top$, $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_5)^\top$, 以及 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_5)^\top$。约化常微分方程为

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 32.263 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{10} \alpha_{1,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \theta_j \right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 0.220 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{10} \alpha_{2,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \theta_j \right),
\end{aligned} \tag{48}
$$

而完整常微分方程为

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 32.263 + x_1\left(\sum_{j=1}^{10}\alpha_{1,j}y_j\right), && \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 0.220 + x_2\left(\sum_{j=1}^{10}\alpha_{2,j}y_j\right),\\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 102.958 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i + \theta_1\right)y_1 - 735.035y_1^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 317.511 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i + \theta_2\right)y_2 - 6155.131y_2^2,\\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 12.669 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i + \theta_3\right)y_3 - 5217.168y_3^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 422.712 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i + \theta_4\right)y_4 - 2052.469y_4^2,\\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 0.056 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i + \theta_5\right)y_5 - 1814.245y_5^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_6}{\mathrm{d}t} = 435.578 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{6,i}x_i + \theta_6\right)y_6 - 6080.718y_6^2,\\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_7}{\mathrm{d}t} = 0.572 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{7,i}x_i + \theta_7\right)y_7 - 2388.553y_7^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_8}{\mathrm{d}t} = 0.087 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{8,i}x_i + \theta_8\right)y_8 - 519.255y_8^2,\\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_9}{\mathrm{d}t} = 0.189 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{9,i}x_i + \theta_9\right)y_9 - 5648.693y_9^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_{10}}{\mathrm{d}t} = 10.109 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{10,i}x_i + \theta_{10}\right)y_{10} - 2210.594y_{10}^2,
\end{aligned}
\tag{49}
$$

此处，我们假设一般的初始浓度： $x_1(0) = a_1 > 0$, $x_2(0) = a_2 > 0$, 以及 $y_1(0) = b_1 \geq 0$,$y_2(0) = b_2 \geq 0$, $y_3(0) = b_3 \geq 0$, $y_4(0) = b_4 \geq 0$, $y_5(0) = b_5 \geq 0$, $y_6(0) = b_6 \geq 0$, $y_7(0) = b_7 \geq 0$,$y_8(0) = b_8 \geq 0$, $y_9(0) = b_9 \geq 0$, 以及 $y_{10}(0) = b_{10} \geq 0$ 。文中引用的系数四舍五入至小数点后三位；完整精度的系数可在代码仓库中找到。

C.5 多个极限环

如第5.3节所述，使用算法1和方程（18）生成的训练数据，通过算法 5 训练了一个 RNCRN。此次训练得到的 RNCRN 包含 $M = 15$ 个化学

感知器和系数 $\beta_1 = 18.815$、 $\beta_2 = 18.135$，以及

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 0.037 \\ -44.974 \\ -9.160 \\ 0.511 \\ -0.021 \\ 0.567 \\ -4.428 \\ 0.549 \\ -0.238 \\ 0.241 \\ -3.833 \\ -14.058 \\ -0.073 \\ -0.177 \\ 0.025 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 0.053 \\ -35.678 \\ -108.873 \\ 0.039 \\ 0.307 \\ -21.397 \\ 13.701 \\ 0.520 \\ -0.150 \\ -0.041 \\ -11.530 \\ -2.218 \\ 0.108 \\ -0.217 \\ 0.298 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} -2169.556 \\ -63.584 \\ -63.308 \\ -2110.566 \\ -2062.301 \\ 330.702 \\ 371.345 \\ -2167.958 \\ -2232.450 \\ -2186.657 \\ -2189.514 \\ 366.100 \\ -2077.129 \\ -2345.668 \\ -2176.678 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -2613.137 \\ -133.234 \\ -85.431 \\ -2471.896 \\ -2582.940 \\ -3.890 \\ -85.207 \\ -2593.340 \\ -2869.315 \\ -2738.075 \\ -2545.244 \\ -229.477 \\ -2510.477 \\ -2841.934 \\ -2434.409 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -2439.155 \\ 79.236 \\ -283.547 \\ -2319.514 \\ -2296.273 \\ -185.955 \\ -36.065 \\ -2420.028 \\ -2499.550 \\ -2462.773 \\ -2429.244 \\ 4.170 \\ -2312.757 \\ -2641.583 \\ -2347.650 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0.046 \\ 48.748 \\ 55.087 \\ 0.047 \\ 0.607 \\ 1.108 \\ 0.359 \\ 0.317 \\ 0.203 \\ 0.087 \\ 0.574 \\ 0.549 \\ 0.069 \\ 0.058 \\ 0.043 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 105.841 \\ 632.562 \\ 465.905 \\ 5.862 \\ 114.611 \\ 388.573 \\ 365.923 \\ 28.740 \\ 85.871 \\ 30.612 \\ 2.894 \\ 411.963 \\ 84.905 \\ 75.267 \\ 8.467 \end{pmatrix}, \tag{50}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,15})^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\omega}_i = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{15,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_{15})^\top$, $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_{15})^\top$, 且 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_{15})^\top$。约化常微分方程为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 18.815 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{15} \alpha_{1,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \theta_j \right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = 18.135 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{15} \alpha_{2,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \theta_j \right),
\end{aligned} \tag{51}$$

而完整常微分方程为

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 18.815 + x_1 \left(\sum_{j=1}^{10} \alpha_{1,j} y_j \right), && \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 18.135 + x_2 \left(\sum_{j=1}^{10} \alpha_{2,j} y_j \right), \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 0.046 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{1,i} x_i + \theta_1 \right) y_1 - 105.841 y_1^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 48.748 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{2,i} x_i + \theta_2 \right) y_2 - 632.562 y_2^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 55.087 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{3,i} x_i + \theta_3 \right) y_3 - 465.905 y_3^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 0.047 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{4,i} x_i + \theta_4 \right) y_4 - 5.862 y_4^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 0.607 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{5,i} x_i + \theta_5 \right) y_5 - 114.611 y_5^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_6}{\mathrm{d}t} = 1.108 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{6,i} x_i + \theta_6 \right) y_6 - 388.573 y_6^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_7}{\mathrm{d}t} = 0.359 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{7,i} x_i + \theta_7 \right) y_7 - 365.923 y_7^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_8}{\mathrm{d}t} = 0.317 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{8,i} x_i + \theta_8 \right) y_8 - 28.740 y_8^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_9}{\mathrm{d}t} = 0.203 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{9,i} x_i + \theta_9 \right) y_9 - 85.871 y_9^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_{10}}{\mathrm{d}t} = 0.087 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{10,i} x_i + \theta_{10} \right) y_{10} - 30.612 y_{10}^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_{11}}{\mathrm{d}t} = 0.574 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{11,i} x_i + \theta_{11} \right) y_{11} - 2.894 y_{11}^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_{12}}{\mathrm{d}t} = 0.549 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{12,i} x_i + \theta_{12} \right) y_{12} - 411.963 y_{12}^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_{13}}{\mathrm{d}t} = 0.069 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{13,i} x_i + \theta_{13} \right) y_{13} - 84.905 y_{13}^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_{14}}{\mathrm{d}t} = 0.058 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{14,i} x_i + \theta_{14} \right) y_{14} - 75.267 y_{14}^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_{15}}{\mathrm{d}t} = 0.043 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{15,i} x_i + \theta_{15} \right) y_{15} - 8.467 y_{15}^2,
\end{aligned} \tag{52}$$

这里，我们假设初始浓度为一般值：$x_1(0) = a_1 > 0$, $x_2(0) = a_2 > 0$, 以及 $y_1(0) = b_1 \geq 0$, $y_2(0) = b_2 \geq 0$, $y_3(0) = b_3 \geq 0$, $y_4(0) = b_4 \geq 0$, $y_5(0) = b_5 \geq 0$, $y_6(0) = b_6 \geq 0$, $y_7(0) = b_7 \geq 0$, $y_8(0) = b_8 \geq 0$, $y_9(0) = b_9 \geq 0$, $y_{10}(0) = b_{10} \geq 0$, $y_{11}(0) = b_{11} \geq 0$, $y_{12}(0) = b_{12} \geq 0$, $y_{13}(0) = b_{13} \geq 0$, $y_{14}(0) = b_{14} \geq 0$, 以及 $y_{15}(0) = b_{15} \geq 0$。文中引用的系数四舍五入至小数点后三位，完整精度的系数可在代码仓库中获取。

C.6 三维环面极限环

现在我们来说明，适用于二维的算法1可以推广到更高维度。具体而言，考虑环面上一条曲线的参数方程

$$\begin{aligned}
x_1(s) &= 3\cos(s) + \cos(10s)\cos(s) + 6, \\
x_2(s) &= 3\sin(s) + \cos(10s)\sin(s) + 6, \\
x_3(s) &= \sin(10s) + 2,
\end{aligned} \tag{53}$$

其中 $s \in [0, 2\pi)$。图 12(a) 展示了将算法1推广到三维后生成的三维训练数据。利用这些数据和算法 5，我们训练了一个含有$M = 7$ 个化学感知器的 RNCRN。如图 12(b) 所示，该网络在数值上呈现出一个三维稳定极限环，其形状近似于所需的环面形状。

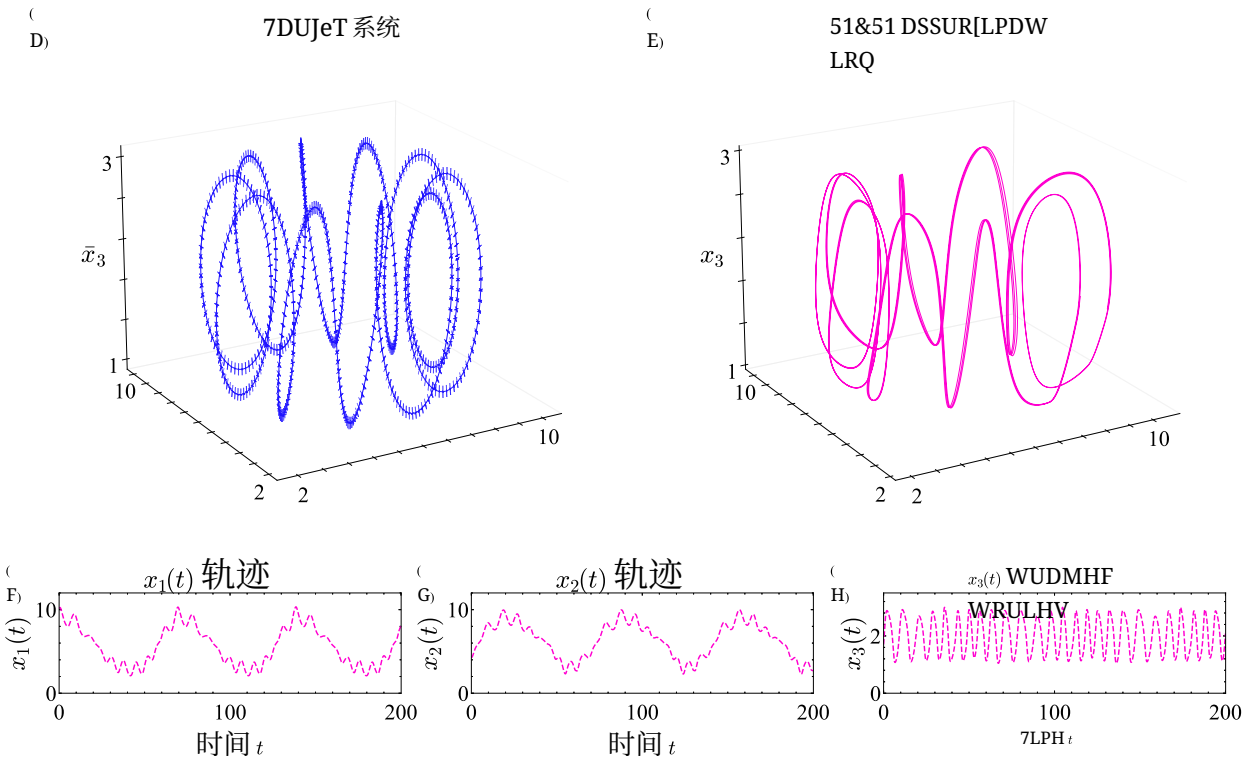


图 12：训练得到的 RNCRN，无需底层常微分方程即可实现环面吸引子。面板 (a) 以蓝色显示目标吸引子数据，这些数据通过从参数方程 (53) 采样点并应用修改后的向量场插值算法（即算法1）生成。面板 (b) 以洋红色显示来自 $M = 7$ RNCRN近似的状态空间轨迹示例，其中 $\mu = 0.01$, x_1 (0) $= 10.126$, x_2(0) $= 4.257$, x_3(0) $= 1.703$, 且 y_1(0) $= \ldots$, y_7(0) $= 0$（系统的完整定义见附录 C.6）。面板 (c)–(e) 分别以时域形式显示与面板 (b) 相同的轨迹，即 $x_1(t)$ $x_2(t)$, 和 $x_3(t)$。

数据生成算法的主要修改，是将填充点的放置方式推广到多个垂直方向。

高维数据生成。 给定高维 $P_d \in \mathbb{R}^N_>$ 中的一组点，其中 $N > 2$，我们对算法1进行修改，使得将(a)部分中的单位法向量替换为 $N - 1$ 个正交归一单位向量，它们与 $\hat{v}_{d,d+1}$ 方向共同构成一组基。这些正交归一单位向量各自生成额外的填充点，并用于计算局部向量场近似。为了找到正交归一基，我们注意到，列向量 $\hat{v}_{d,d+1} \in \mathbb{R} >^{N\times 1}$ 可以通过 QR 分解分解为一个正交归一矩阵 $Q \in \mathbb{R} >^{N\times N}$ 和一个标量 $R \in$ R，其中 Q 的第一列与 $\hat{v}_{d,d+1}$线性相关。因此，正交归一单位向量就是 Q中其余的列向量。

RNCRN 参数。使用算法 1 和算法 5 的高维数据生成修改版进行训练后，我们找到一个系数为 $\beta_1 = 1.570$ 的 $M = 7$ RNCRN,

$\beta_2 = 0.408$, $\beta_3 = 6.885$, 和

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} -5.227 \\ -6.586 \\ 0.332 \\ -1.297 \\ 1.037 \\ -0.752 \\ 7.607 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} -0.755 \\ -5.934 \\ -3.663 \\ 14.209 \\ 1.077 \\ 1.567 \\ 2.768 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_3 = \begin{pmatrix} 30.463 \\ -19.509 \\ 23.421 \\ -20.966 \\ -45.739 \\ 4.597 \\ 3.169 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} 292.047 \\ -280.508 \\ 261.422 \\ -255.093 \\ 262.072 \\ -198.768 \\ -139.727 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -39.116 \\ -17.292 \\ -3.625 \\ 7.586 \\ -9.729 \\ 207.473 \\ -109.965 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -2.949 \\ -1.592 \\ -36.064 \\ -105.612 \\ -9.325 \\ -327.333 \\ -28.268 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\omega_3} = \begin{pmatrix} -53.870 \\ 111.653 \\ -32.435 \\ 145.520 \\ -67.332 \\ -308.171 \\ 344.645 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 5.488 \\ 7.535 \\ 3.963 \\ 9.258 \\ 6.007 \\ 0.004 \\ 5.764 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 666.189 \\ 812.839 \\ 496.655 \\ 912.664 \\ 428.803 \\ 713.388 \\ 4637.415 \end{pmatrix}, \tag{54}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,7})^\top$ 对于 $i = 1, 2, 3$, $\boldsymbol{\omega_i} = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{7,i})^\top$ 对于 $i = 1, 2, 3$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_7)^\top$, $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_7)^\top$, 以及 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_7)^\top$。约化常微分方程由下式给出

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) = 1.570 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{7} \alpha_{1,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \omega_{j,3}\tilde{x}_3 + \theta_j \right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) = 0.408 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{7} \alpha_{2,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \omega_{j,3}\tilde{x}_3 + \theta_j \right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_3}{\mathrm{d}t} &= g_3(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3) = 6.885 + \tilde{x}_3 \sum_{j=1}^{7} \alpha_{3,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \omega_{j,3}\tilde{x}_3 + \theta_j \right),
\end{aligned} \tag{55}$$

而完整常微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = 1.570 + x_1\left(\sum_{j=1}^{7}\alpha_{1,j}y_j\right), \qquad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = 0.408 + x_2\left(\sum_{j=1}^{7}\alpha_{2,j}y_j\right),$$

$$\frac{\mathrm{d}x_3}{\mathrm{d}t} = 6.885 + x_3\left(\sum_{j=1}^{7}\alpha_{3,j}y_j\right), \qquad \mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = 5.488 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{1,i}x_i + \theta_1\right)y_1 - 666.189y_1^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = 7.535 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{2,i}x_i + \theta_2\right)y_2 - 812.839y_2^2, \quad \mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = 3.963 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{3,i}x_i + \theta_3\right)y_3 - 496.655y_3^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = 9.258 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{4,i}x_i + \theta_4\right)y_4 - 912.664y_4^2, \quad \mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = 6.007 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{5,i}x_i + \theta_5\right)y_5 - 428.803y_5^2,$$

$$\mu\frac{\mathrm{d}y_6}{\mathrm{d}t} = 0.004 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{6,i}x_i + \theta_6\right)y_6 - 713.338y_6^2, \quad \mu\frac{\mathrm{d}y_7}{\mathrm{d}t} = 5.764 + \left(\sum_{i=1}^{3}\omega_{7,i}x_i + \theta_7\right)y_7 - 4637.415y_7^2, \tag{56}$$

这里，我们假设初始浓度一般化： $x_1(0) = a_1 > 0$, $x_2(0) = a_2 > 0$, $x_3(0) = a_3 > 0$, 以及$y_1(0) = b_1 \geq 0$, $y_2(0) = b_2 \geq 0$, $y_3(0) = b_3 \geq 0$, $y_4(0) = b_4 \geq 0$, $y_5(0) = b_5 \geq 0$, $y_6(0) = b_6 \geq 0$, 以及$y_7(0) = b_7 \geq 0$。文中引用时，系数四舍五入至小数点后三位；完整精度的系数可在代码仓库中找到。

C.7 平衡—振荡分段系统与数据定义的振荡

下面详细介绍分类控制的 RNCRN 的构造，并将其用于逼近平衡—振荡分段系统与数据定义的振荡（如第 5.4 节所述）。我们采用一般方法训练分类控制的 RNCRN（定义见算法 4），并作适当修改以使用数据定义的向量场。

步骤 ***1***。 **逐点参数化RNCRN**。 定义了两种动力学状态：循环吸引子和稳定平衡点。首先，使用算法1为以 $b_1 = b_2 = 1.5$ 为中心、半径为 $a = 1$的参数化轨道方程（18）生成了一个吸引子。其次，利用常微分方程 $\mathrm{d}x_1/\mathrm{d}t = 0.5 - x_1$ 和 $\mathrm{d}x_2/\mathrm{d}t = 0.5 - x_2$，在紧子集 $\mathbb{K}_1 = [0.01, 3]$, $\mathbb{K}_2 = [0.01, 3]$上使用了稳定平衡点的向量场。借助相关控制点 $r_1 = 1$ 和$r_2 = 0.1$，使用修改后的算法 3（即允许使用算法 5 中的数据定义的向量场），找到一个在两种目标动力学之间发生分岔的逐点参数化 RNCRN。

所得参数化 RNCRN 的容差为 $\varepsilon \approx 10^{-1}$，它与具有 $M = 5$ 个化学感知器且系数为 $\beta_1 = 0.790$, $\beta_2 = 0.858$, 的 RNCRN 相匹配

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 89.517 \\ -13.080 \\ 0.321 \\ -98.540 \\ -69.707 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 96.384 \\ -50.709 \\ -24.353 \\ -11.676 \\ -124.643 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} -1654.188 \\ 578.636 \\ -2579.316 \\ -3291.187 \\ -1568.960 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 38.776 \\ 8373.519 \\ 3629.027 \\ 13631.220 \\ 3385.638 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\omega_1} = \begin{pmatrix} -1357.492 \\ -727.745 \\ -276.335 \\ -2029.546 \\ -239.827 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega_2} = \begin{pmatrix} -1128.933 \\ -802.213 \\ 694.332 \\ 295.107 \\ -775.896 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} 2380.343 \\ 1605.154 \\ 1198.530 \\ 2737.624 \\ -8382.229 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 75.071 \\ 8.557 \\ 5.288 \\ 73.001 \\ 70.181 \end{pmatrix}, \tag{57}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}, \ldots, \alpha_{i,5})^\top$ 表示 $i = 1, 2$ $\boldsymbol{\omega}_i = (\omega_{1,i}, \omega_{2,i}, \ldots, \omega_{5,i})^\top$ 表示 $i = 1, 2$ $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_5)^\top$, $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_5)^\top$, $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_5)^\top$, 且 $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_5)^\top$。约化常微分方程为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \tilde{r}) = \beta_1 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \tilde{r} + \theta_j \right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; \tilde{r}) = \beta_2 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} \sigma_{\gamma_j, \tau_j} \left(\omega_{j,1} \tilde{x}_1 + \omega_{j,2} \tilde{x}_2 + \psi_j \tilde{r} + \theta_j \right),
\end{aligned} \tag{58}$$

而完整常微分方程为

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = \beta_1 + x_1 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j} y_j \right), && \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = \beta_2 + x_2 \left(\sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j} y_j \right), \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = \gamma_1 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{1,i} x_i + \psi_1 r + \theta_1 \right) y_1 - \tau_1 y_1^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = \gamma_2 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{2,i} x_i + \psi_2 r + \theta_2 \right) y_2 - \tau_2 y_2^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = \gamma_3 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{3,i} x_i + \psi_3 r + \theta_3 \right) y_3 - \tau_3 y_3^2, && \mu \frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = \gamma_4 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{4,i} x_i + \psi_4 r + \theta_4 \right) y_4 - \tau_4 y_4^2, \\
&\mu \frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = \gamma_5 + \left(\sum_{i=1}^{2} \omega_{5,i} x_i + \psi_5 r + \theta_5 \right) y_5 - \tau_5 y_5^2, && \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = 0
\end{aligned} \tag{59}$$

这里，我们假设一般的初始浓度：$x_1(0) = a_1 \in [0.01, 3]$、$x_2(0) = a_2 \in [0.01, 3]$，以及$y_1(0) = b_1 \geq 0$、$y_2(0) = b_2 \geq 0$、$y_3(0) = b_3 \geq 0$、$y_4(0) = b_4 \geq 0$、$y_5(0) = b_5 \geq 0$，以及 $r(0) \geq 0$。文中引用的系数已四舍五入至小数点后三位；完整精度的系数可在代码仓库中查阅。

步骤 *2.* **准静态分类化学反应网络**。现在，我们展示如何训练图 7(b) 所述的分类控制的反应网络化学反应网络中的分类组件。我们定义一个从输入物种 Λ_1 到分岔物种的目标映射，如下所示：

$$\bar{r}(\bar{\lambda_1}) = \begin{cases} 1 & \text{for all } \bar{\lambda}_1 \in [0, 0.25], \\ 0.1 & \text{for all } \bar{\lambda}_1 > 0.25, \end{cases} \tag{60}$$

我们通过训练一个采用化学激活函数 σ_γ 的小型前馈神经网络来近似目标映射（方程 (60)），即：

$$\begin{aligned}
\tilde{z}_1 &= \sigma_\gamma \left(\omega_1^{(z)} \tilde{\lambda_1} + \theta_1^{(z)} \right) \\
\tilde{z}_2 &= \sigma_\gamma \left(\omega_2^{(z)} \tilde{\lambda_1} + \theta_2^{(z)} \right) \\
\tilde{z}_3 &= \sigma_\gamma \left(\omega_3^{(z)} \tilde{\lambda_1} + \theta_3^{(z)} \right) \\
\tilde{r} &= \sigma_\gamma \left(\omega_1^{(r)} \tilde{z}_1 + \omega_2^{(r)} \tilde{z}_2 + \omega_3^{(r)} \tilde{z}_3 + \theta_0^{(r)} \right)
\end{aligned} \tag{61}$$

一个稳态与方程（61）等价的反应速率方程，可由一系列化学感知器 [56]在平衡点处构造而成。我们引入相同的时间尺度分离参数 μ，如同

RNCRN中那样，从而得到反应速率方程

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} &= 0, & \lambda_1(0) &\geq 0 \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_1}{\mathrm{d}t} &= \gamma + \left(\omega_1^{(z)}\lambda_1 + \theta_1^{(z)}\right) z_1 - z_1^2, & z_1(0) &= c_1 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_2}{\mathrm{d}t} &= \gamma + \left(\omega_2^{(z)}\lambda_1 + \theta_2^{(z)}\right) z_2 - z_2^2, & z_2(0) &= c_2 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}z_3}{\mathrm{d}t} &= \gamma + \left(\omega_3^{(z)}\lambda_1 + \theta_3^{(z)}\right) z_3 - z_3^2, & z_3(0) &= c_3 \geq 0, \\
\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} &= \gamma + \left(\omega_1^{(r)}z_1 + \omega_2^{(r)}z_2 + \omega_3^{(r)}z_3 + \theta_0^{(r)}\right) r - r^2, & r(0) &= d \geq 0.
\end{aligned} \tag{62}$$

使用标准反向传播技术 [76] ，利用从方程 (60) 采样的数据训练方程 (61)，我们得到了参数值 $\gamma = 1$、$\omega_1^{(z)} = -3.899$、$\omega_2^{(z)} = -4.832$、$\omega_3^{(z)} = -5.089$、$\theta_1^{(z)} = 10.786$、$\theta_2^{(z)} = 11.864$、$\theta_3^{(z)} = 12.527$、$\omega_1^{(r)} = 5.960$、$\omega_2^{(r)} = -5.255$、$\omega_3^{(r)} = -7.505$ 和 $\theta_0^{(r)} = 0.436$。

步骤 ***3.* 动力学近似**。现在，我们将反应速率方程组合起来，构成完整的分类控制的反应网络化学反应网络。使用公式 (57) 和公式 (62) 中定义的速率常数，使反应速率方程为:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}\lambda_1}{\mathrm{d}t} = 0, && \frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = \beta_1 + x_1\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{1,j}y_j\right), \\
&\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = \beta_2 + x_2\left(\sum_{j=1}^{5}\alpha_{2,j}y_j\right), && \mu\frac{\mathrm{d}z_1}{\mathrm{d}t} = \gamma + \left(\omega_1^{(z)}\lambda_1 + \theta_1^{(z)}\right) z_1 - z_1^2, \\
&\mu\frac{\mathrm{d}z_2}{\mathrm{d}t} = \gamma + \left(\omega_2^{(z)}\lambda_1 + \theta_2^{(z)}\right) z_2 - z_2^2, && \mu\frac{\mathrm{d}z_3}{\mathrm{d}t} = \gamma + \left(\omega_3^{(z)}\lambda_1 + \theta_3^{(z)}\right) z_3 - z_3^2, \\
&\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \gamma + \left(\omega_1^{(r)}z_1 + \omega_2^{(r)}z_2 + \omega_3^{(r)}z_3 + \theta_0^{(r)}\right) r - r^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}t} = \gamma_1 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{1,i}x_i + \psi_1 r + \theta_1\right) y_1 - \tau_1 y_1^2, \\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}t} = \gamma_2 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{2,i}x_i + \psi_2 r + \theta_2\right) y_2 - \tau_2 y_2^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_3}{\mathrm{d}t} = \gamma_3 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{3,i}x_i + \psi_3 r + \theta_3\right) y_3 - \tau_3 y_3^2, \\
&\mu\frac{\mathrm{d}y_4}{\mathrm{d}t} = \gamma_4 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{4,i}x_i + \psi_4 r + \theta_4\right) y_4 - \tau_4 y_4^2, && \mu\frac{\mathrm{d}y_5}{\mathrm{d}t} = \gamma_5 + \left(\sum_{i=1}^{2}\omega_{5,i}x_i + \psi_5 r + \theta_5\right) y_5 - \tau_5 y_5^2.
\end{aligned} \tag{63}$$

约化向量场，即公式 (63)，为 $\mu \to 0$

$$
\begin{aligned}
\tilde{\lambda_1}(t) &= \tilde{\lambda_1}(0), \\
\tilde{z}_1 &= \sigma_\gamma\left(\omega_1^{(z)}\tilde{\lambda_1} + \theta_1^{(z)}\right) \\
\tilde{z}_2 &= \sigma_\gamma\left(\omega_2^{(z)}\tilde{\lambda_1} + \theta_2^{(z)}\right) \\
\tilde{z}_3 &= \sigma_\gamma\left(\omega_3^{(z)}\tilde{\lambda_1} + \theta_3^{(z)}\right) \\
\tilde{r} &= \sigma_\gamma\left(\omega_1^{(r)}\tilde{z}_1 + \omega_2^{(r)}\tilde{z}_2 + \omega_3^{(r)}\tilde{z}_3 + \theta_0^{(r)}\right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_1}{\mathrm{d}t} &= g_1(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; r) = 4.251 + \tilde{x}_1 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{1,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \psi_j r + \theta_j\right), \\
\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_2}{\mathrm{d}t} &= g_2(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2; r) = 5.494 + \tilde{x}_2 \sum_{j=1}^{5} \alpha_{2,j}\sigma_{\gamma_j,\tau_j}\left(\omega_{j,1}\tilde{x}_1 + \omega_{j,2}\tilde{x}_2 + \psi_j r + \theta_j\right).
\end{aligned} \tag{64}
$$

D 附录：训练算法

现在，我们介绍本文中用于训练单层 RNCRN、参数化 RNCRN 和分类控制的 RNCRN 的各种训练算法版本。

D.1 算法 2. 用于训练 参数化 *RNCRN* 以近似分岔的两步算法。

在第 3 节和附录 A 中，我们给出了通过算法 2 训练的参数化 RNCRN 的示例。

固定一个目标系统 (7)、目标执行物种紧集 $\mathbb{K}_1$，$\mathbb{K}_2$、……、$\mathbb{K}_N \subset (0, +\infty)$ 以及目标参数物种紧集 $\mathbb{L} \subset (0, +\infty)^L$。同时固定参数化RNCRN系统 (8) 中的速率系数 β_1，β_2、……、$\beta_N \geq 0$ 和 γ_1、……、$\gamma_M > 0$。

(a) 准静态近似。设定容差 $\varepsilon > 0$。同时设定感知器的数量$M \geq 1$。使用反向传播算法 [76],，求出系数 $\alpha^*_{i,j}, \theta^*_j, \omega^*_{j,i}, \psi^*_{j,l}$，使得对于$i = 1, 2, \ldots, N$, $j = 1, 2, \ldots, M$, $l = 1, 2, \ldots, L$，$(f_i(x_1, x_2, \ldots, x_N, \lambda_1, \ldots, \lambda_L) - \beta_i)/x_i$ 与 $\sum_{j=1}^{M} \alpha^*_{i,j} \sigma_{\gamma_j} \left(\sum_{k=1}^{N} \omega^*_{j,k} x_k + \sum_{l=1}^{L} \psi^*_{j,l} \lambda_l + \theta^*_j \right)$ 之间的（均方）距离在容差范围内，适用于$(x_1, x_2, \ldots, x_N, \lambda_1, \ldots, \lambda_L) \in \mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_2 \times \ldots \times \mathbb{K}_N \times \mathbb{L}$。如果未达到容差 ε，则使用 $M + 1$重复步骤 (a)。

(b) 动力学近似。将 $\alpha_{i,j} = \alpha^*_{i,j}$, $\theta_j = \theta^*_j$, $\omega_{j,i} = \omega^*_{j,i}$, $\psi_{j,l} = \psi^*_{j,l}$ 代入参数化 RNCRN (8)。固定初始条件 $x_1(0)\ x_2(0) \ldots, x_M(0) \geq 0, y_1(0)\ y_2(0) \ldots, y_M(0) \geq 0, (\lambda_1(0)\ \lambda_2(0) \ldots, \lambda_L(0)) \in \mathbb{L}$, 以及时间 $T > 0$。同时固定感知器的速度 $0 < \mu \ll 1$。在所需区间 $[0, T]$ 内，对目标系统 (7) 和参数化 RNCRN 系统 (8) 进行数值求解。时间 $T > 0$ 必须满足：对于所有 $t \in [0, T]$，当 $i = 1, 2, \ldots, N$ 时，$\bar{x}_i(t)\ x_i(t) \in \mathbb{K}_i$。如果对于所有 i，$\bar{x}_i(t)$ 和 $x_i(t)$ 根据所需判据足够接近，则终止算法。否则，以更小的 μ 重复步骤 (b)。如果找不到合适的 μ，则返回步骤 (a)，并选择更小的 ε。

算法 2：对 [51] 中的算法1进行修改，以纳入静态执行物种（即参数物种）。在这一修改后的训练过程中，λ_1、……、λ_L 和 $\psi_{j,\ l}$ 以与 x_1、……、x_M 和 $\omega_{j,\ i}$ 相同的方式，被视为该算法人工神经网络组件的额外输入，然后像往常一样，对 x_1、……、x_M 上的目标函数进行最小化。这等价于移除对 λ_l 的任何反馈，从而令 $\mathrm{d}\lambda_l/\mathrm{d}t = 0$。有关更多详情，请参阅随附的代码示例 [77]。

D.2 算法 3。用于训练参数化 *RNCRN* 以近似分段系统的两步算法。

在第4节和附录 B 中，我们使用算法 2 的修改版本训练示例系统，以近似分段系统。请注意，在本节中，我们还使用此处介绍的自动微分（AD） [78, 79] 训练了参数化 *RNCRN*；为清晰起见，该过程列为算法 3。该扩展算法使用参数化 RNCRN 的最一般形式

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} &= \beta_i + x_i \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} y_j, && \text{for } i = 1, \ldots, N, \\
\frac{\mathrm{d}\lambda_l}{\mathrm{d}t} &= 0, && \text{for } l = 1, \ldots, L, \\
\frac{\mathrm{d}y_j}{\mathrm{d}t} &= \frac{\gamma_j}{\mu} + \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_{j,i}}{\mu} x_i + \sum_{l=1}^{L} \frac{\psi_{j,l}}{\mu} \lambda_l + \frac{\theta_j}{\mu} \right) y_j - \frac{\tau_j}{\mu} y_j^2, && \text{for } j = 1, \ldots, M, \qquad (65)
\end{aligned}
$$

其中 $x_i = x_i(t) \geq 0$, $y_j = y_j(t) \geq 0$, $\lambda_l = \lambda_l(t) = \lambda_l(0) \geq 0$, $\beta_i \geq 0$, $\alpha_{i,\ j} \in \mathbb{R}$, $\gamma_j > 0$, $\tau_j > 0$, $\omega_{ji} \in \mathbb{R}$, $\theta_j \in \mathbb{R}$，以及 $\psi_{j,\ l} \in \mathbb{R}$。

这些自动微分技术只是优化约化向量场的另一种方法，因此不会改变准静态近似步骤的概念性目的。不过，它们

允许对 RNCRN 中更多的反应系数进行优化。自动微分技术使得可以直接针对约化向量场构建优化函数，即$g_i(\tilde{x}_1,\ \tilde{x}_2,\ \ldots,\ \tilde{x}_N) \approx f_i(\tilde{x}_1,\ \tilde{x}_2,\ \ldots,\ \tilde{x}_N)$，而不必针对变换后的目标向量场 $(f_i(\tilde{x}_1,\ \tilde{x}_2,\ \ldots,\ \tilde{x}_N) - \beta_i)/\tilde{x}_i \approx \sum_{j=1}^{M} \alpha^*_{i,\ j}\sigma_\gamma\left(\sum_{k=1}^{N}\omega^*_{j,k}\tilde{x}_k + \theta^*_j\right)$进行优化。因此，准静态近似之前我们任意固定的若干速率常数现在可以自由优化（即 β_i 和 γ）。此外，我们允许常量生成反应 $\gamma_j > 0$ 和自封存反应 $\tau_j > 0$ 在每个反应中取独立值 $j = 1,\ 2,\ \ldots,\ M$。

纳入这些新参数后，约化向量场中定义的化学激活函数会略有不同，其定义为

$$\sigma_{\gamma_j,\tau_j}(A) = \frac{1}{2\tau_j}\left(A^2 + \sqrt{A^2 + 4\tau_j\gamma_j}\right). \tag{66}$$

固定一个目标系统 (13)、目标执行物种的紧集 $\mathbb{K}_1,\ \mathbb{K}_2$、……、$\mathbb{K}_N \subset (0,\ +\infty)$，以及参数物种空间中对应于条件目标函数 $f_i^{(1)}$、……、$f_{(P)i}$ 的不相交集合 $\mathbb{L}_1,\ \mathbb{L}_2$、……、$\mathbb{L}_P \subset (0,\ +\infty)^L$。

(a) 准静态近似。固定一个容差 $\varepsilon > 0$。同时固定感知器的数量 $M \geq 1$。使用通过自动微分 [78], 实现的反向传播算法 [76]，为 $i = 1$、2、……、N、 j =1、2、……、M、 $l = 1$、2、……、L 求出系数 α^*_{i}、$_j$、θ^*_j、$\omega^*_{j,\ i}$、$\psi^*_{j,\ l}$、β^*_i、γ^*_j、τ^*_j，使得对于所有 $p = 1$、……、P，$f_i^{(p)}(x_1$、x_2、……、$x_N)$ 与 $\beta_i + x_i\sum_{j=1}^{M}\alpha^*_{i}$、$_j\sigma_{\gamma_j}$、$_{\tau_j}\left(\sum_{k=1}^{N}\omega^*_{j,k}x_k + \sum_{l=1}^{L}\psi^*_{j,l}\lambda_l + \theta^*_j\right)$ 之间的（均方）距离，对于 $(x_1$、x_2、……、x_N、λ_1、……、$\lambda_L) \in \mathbb{K}_1 \times \mathbb{K}_2 \times \ldots \times \mathbb{K}_N \times \mathbb{L}_p$ 均处于该容差范围内。如果未达到容差 ε，则使用 $M + 1$ 重复步骤 (a)。

(b) 动力学近似。将 $\alpha_{i,j} = \alpha^*_{i,j}$, $\theta_j = \theta^*_j$, $\omega_{j,i} = \omega^*_{j,i}$, $\psi_{j,l} = \psi^*_{j,l}$, $\beta_i = \beta^*_i$, $\gamma_j = \gamma^*_j$, $\tau_j = \tau^*_j$ 代入参数化 RNCRN (65)。在任意 $\mathbb{L}_p$ 中，固定初始条件 $x_1(0)\ x_2(0)\ldots, x_M(0) \geq 0$, $y_1(0)\ y_2(0)\ldots, y_M(0) \geq 0$、时间 $T > 0$，以及 $(\lambda_1(0)\ \lambda_2(0)\ldots, \lambda_L(0))$。同时固定感知器的速度 $0 < \mu \ll 1$。在所需区间 $[0, T]$ 上，对目标系统 (13) 和参数化 RNCRN 系统 (65) 进行数值求解。时间 $T > 0$ 必须满足：对于所有 $t \in [0, T]$，有 $\bar{x}_i(t)\ x_i(t) \in \mathbb{K}_i$，其中 $i = 1$ 为 2, . . . , N。如果对于所有 i， $\bar{x}_i(t)$ 和 $x_i(t)$ 根据所需判据足够接近，则终止算法。否则，以更小的 μ 重复步骤 (b)。如果找不到理想的 μ，则返回步骤 (a)，并选择更小的 ε。

算法 3：用于训练参数化 *RNCRN* 以近似分段系统的两步算法。更多详情请参阅随附的代码示例 [77] 。

D.3 算法 4. 训练分类控制的反应网络化学反应网络的算法。

固定目标系统 (13)、目标执行物种的紧集 $\mathbb{K}_1$，$\mathbb{K}_2$，...，$\mathbb{K}_N \subset (0, +\infty)$，以及参数物种空间中与条件目标函数 $f_i^{(1)}$，...，$f_{(P)i}$ 相对应的不相交集合 $\mathbb{L}_1$，$\mathbb{L}_2$，...，$\mathbb{L}_P \subset (0, +\infty)^L$。

(a) 逐点参数化RNCRN。应用算法 3，找到一个在使用 P个点时会在 P条件目标函数之间发生分岔的 $L = 1$参数化 RNCRN；这些点 $r_1, \ldots, r_p$从$(0, +\infty)$中任意选取。将得到的参数代入(14)，得到$\alpha_{i,j} = \alpha_{i,j}$,$\theta_j^{(y)} = \theta_j$, $\omega_j^{(y)}{}_{,i} = \omega_{j,i}$,$\psi_j = \psi_{j,1}$, $\beta_i = \beta_i$,$\gamma_j = \gamma_j$和$\tau_j = \tau_j$。

(b) 准静态分类化学反应网络。设定容差 $\varepsilon > 0$。同时设定感知机数量 $K \geq 1$ 和 $\gamma > 0$。使用反向传播算法 [76]，求出 $l = 1, 2, \ldots, L$, $k = 1, 2, \ldots, K$的系数$\omega_k^{*(z)}{}_{,l}$, $\theta_k^{*(z)}$, $\omega_k^{*(r)}$, $\theta_0^{*(r)}$，使得 r_p 与 $\sigma_\gamma\left(\sum_{k=1}^K \omega_k^{*(r)} \sigma_\gamma\left(\sum_{l=1}^L \omega_{k,l}^{*(z)} \lambda_l + \theta_k^{*(z)}\right) + \theta_0^{*(r)}\right)$ 之间的（均方）距离在容差范围内，对所有$(\lambda_1, \ldots, \lambda_L) \in \mathbb{L}_p$ 以及所有 $p = 1, \ldots, P$ 均成立。如果未达到容差 ε，则使用 $K + 1$ 重复步骤 (b)。

(c) 动力学近似。将 $\omega_k^{(z)}{}_{,l} = \omega_k^{*(z)}{}_{,l}$, $\theta_k^{(z)} = \theta_k^{*(z)}$, $\omega_k^{(r)} = \omega_k^{*(r)}$, $\theta_0^{(r)} = \theta_0^{*(r)}$ 代入 (15)，并与 (14) 耦合，使用步骤 (a) 中得到的参数。固定初始条件$x_1(0)\ x_2(0) \ldots, x_M(0) \geq 0$, $y_1(0)\ y_2(0) \ldots, y_M(0) \geq 0$, $z_1(0)\ z_2(0) \ldots, z_K(0) \geq 0$, $r(0) \geq 0$、时间 $T > 0$，以及任意 $\mathbb{L}_p$中的 $(\lambda_1(0)\ \lambda_2(0) \ldots, \lambda_L(0))$。同时固定感知器的速度 $0 < \mu \ll 1$。在所需区间 $[0, T]$内，对目标系统 (13) 和分类控制的反应网络化学反应网络系统 (14)–(15) 进行数值求解。时间 $T > 0$必须满足：对于所有 $t \in [0, T]$，$i = 1, 2, \ldots, N$，均有 $\bar{x}_i(t)\ x_i(t) \in \mathbb{K}_i$。如果对于所有 i，$\bar{x}_i(t)$ 和 $x_i(t)$ 根据所需准则足够接近，则终止算法。否则，使用更小的 μ重复步骤 (b)。如果找不到合适的 μ，则返回步骤 (a)，并选择更小的 ε。

算法 4：训练分类控制的反应网络化学反应网络以近似形式（13）的分段系统的算法。有关更多详细信息，请参阅随附的代码示例 [77]。

D.4 算法 5。训练$RNCRN$ 以近似数据定义的极限环的两步算法。

在第5节和附录 C 中，我们使用算法1的修改版本，在本稿算法1的数据上训练了示例系统。为清晰起见，我们将其作为算法 5 展示，并指出该算法同时采用了自动微分技术；此外，由于没有可用于验证轨迹的常微分方程系统，还采用了一个简化的动力学近似步骤，并通过非正式的基于检查的终止方式结束。

我们允许常量生成反应 $\gamma_j > 0$ 和自封存反应 $\tau_j > 0$,

以取独立　　每个反应的 nt 个值 $j = 1$，2，.....，M。此情况下的完整 RNCRN 为

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = \beta_i + x_1 \sum_{j=1}^{M} \alpha_{i,j} y_j, \qquad x_i(0) = a_i, \qquad \text{for } i = 1, \ldots, N,$$
$$\frac{\mathrm{d}y_j}{\mathrm{d}t} = \frac{\gamma_j}{\mu} + \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_{j,i}}{\mu} x_i + \frac{\theta_j}{\mu} \right) y_j - \frac{\tau_j}{\mu} y_j^2, \qquad y_j(0) = b_j, \qquad \text{for } j = 1, \ldots, M. \tag{67}$$

加入这些新参数会使约化向量场中的化学激活函数略有不同，其定义见 (66)。

将由算法1（或其他方式）生成的目标数据固定为 $\mathbb{X} = \{X^{(1)}, \ldots, X^{(D+1)}\}$，即执行物种空间中的点集，以及 $\dot{\mathbb{X}} = \{\dot{X}^{(1)}, \ldots, \dot{X}^{(D+1)}\}$，即每个点对应的向量场。其中，对于 $d = 1$，2，.....，$D+1$ 和 $i = 1$，2，.....，N，有 $X^{(d)} \in \mathbb{R}^N_{\geq 0}$ 和 $\dot{X}^{(d)} \in \mathbb{R}^N$。

(a) 准静态近似。固定容差 $\varepsilon > 0$。同时固定感知器数量为 $M \geq$1。使用通过自动微分 [78], 实现的反向传播算法 [76]，求出系数 α_i^*、$_j$、θ_j^*、ω_j^*、$_i$、β_i^*、γ_j^*、τ_j^*，其中 $i = 1$、2、.....、N，$j = 1$、2、.....、M，使 $\dot{X}_i^{(d)}$ 与 $\beta_i + x_i^{(d)} \sum_{j=1}^{M} \alpha_i^*$、$_j \sigma_{\gamma_j}$、$_{\tau_j} \left(\sum_{k=1}^{N} \omega_{j,k}^* x_k^{(d)} + \theta_j^* \right)$ 之间的（均方）距离对所有 $d = 1$、2、.....、$D+1$ 和 $i = 1$、2、.....、N 均在容差范围内。若未达到容差 ε，则使用 $M+1$ 重复步骤 (a)。

(b) 动力学近似。将 $\alpha_{i,j} = \alpha_{i,j}^*$, $\theta_j = \theta_j^*$, $\omega_{j,i} = \omega_{j,i}^*, \beta_i = \beta_i^*, \gamma_j = \gamma_j^*, \tau_j = \tau_j^*$代入 RNCRN (67)。固定初始条件 $x_1(0)$ $x_2(0) \ldots, x_M(0) \geq 0$,$y_1(0)$ $y_2(0) \ldots, y_M(0) \geq 0$，以及时间 $T > 0$。同时固定感知器的速度 $0 < \mu \ll 1$。在所需区间 $[0, T]$ 上对 RNCRN 系统 (67) 进行数值求解。如果经检查，时间轨迹实现了预期的动力学，则终止算法。否则，使用更小的 μ 重复步骤 (b)。如果未找到理想的 μ，则返回步骤 (a) 并选择更小的 ε。

算法 5：一种用于训练 RNCRN、使其根据向量场数据逼近动力学的算法。由于这些系统没有真实时间轨迹，该算法的终止依据是对时间轨迹进行非正式检查。更多详情请参阅随附的代码示例 [77]。