# 数学模型 Lecture Notes

#### Zhennan Zhou

2019年5月13日

#### PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考: 教材二第6章。

## 7 微扰法和渐进分析简介

I think that it is a relatively good approximation to truth — which is much too complicated to allow anything but approximations — that mathematical ideas originate in empirics

—John von Neumann, The Mathematician.

在上一章中,我们学了无量纲化,即把有量纲的物理问题转化成无量纲的数学模型。我们知道,无量纲的参数反映了各种物理效果的相对重要性。在不知道这些无量纲参数的大小时,我们可以通过解析的或者数值的方法求出问题的通解。但是,如果我们已知一些无量纲参数是相对的大,或者相对的小,所谓的渐进方法可以帮我们求解问题的近似解。

渐进方法提供了一套系统的手段来构造形如下面问题的近似解:

$$F(x,\varepsilon) = 0, \quad \frac{dx}{dt} = H(x,\varepsilon), \quad \text{when} \quad \varepsilon \to 0.$$
 (7.1)

这里, $\varepsilon$  叫做渐进参数,我们感兴趣的是  $\varepsilon \ll 1$  的情形。构造近似解是通过引入渐进展开来实现的,即原问题可以分解为一序列的子问题。子问题往往更容易求解,而且我们可以把子问题的解组合成原问题的近似解。

注意,虽然以上的步骤听起来很像线性叠加原理,但事实上,渐进方法的强大之处在于它可以 处理很多的非线性问题。

#### 7.1 渐近展开

首先我们回顾一些微积分中一些有关极限的定义和理解。注意,一些定义的名称也许会和微积分中的有所不同。

•  $f(\varepsilon)$  和  $g(\varepsilon)$  在  $\varepsilon \to 0$  时被称为是渐进等价的,如果

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\varepsilon)}{g(\varepsilon)} = 1.$$

• 在  $\varepsilon \to 0$ 时, f = O(g),如果存在有限的 A,使得对于足够小的  $\varepsilon$  有

$$|f| \le A|g|$$
.

这使得我们方便更精确地刻画极限值有限、极限值为无穷时的函数的渐进行为,例如f = O(1), $f = (\varepsilon^{-1}), f = O(\varepsilon^2)$ 。

• 在 $\varepsilon \to 0$ 时,f = o(g),如果

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\varepsilon)}{g(\varepsilon)} = 0.$$

我们常用  $o(\cdot)$  表示高阶小项。

下面我们引入渐近展开。考虑函数  $x(t,\varepsilon)$ , 它有如下"分离变量"类型的级数展开

$$x(t,\varepsilon) = \delta_0(\varepsilon)x_0(t) + \delta_1(\varepsilon)x_1(t) + \delta_2(\varepsilon)x_2(t) + \cdots$$
(7.2)

这里,我们假设所有的系数  $x_n = O(1)$ ,而度规函数  $\{\delta_n(\varepsilon)\}$  满足下面的序列关系

$$\delta_0(\varepsilon) \gg \delta_1(\varepsilon) \gg \delta_2(\varepsilon) \gg \cdots$$
 (7.3)

我们称 (7.2) 和 (7.3) 为渐进展开 (Asymptotic expansion, AE)的基本形式。在 AE 中的第一项被称为首项(或首阶项),而我们显然有, $x \sim \delta_0 x_0$ 。

关于,对于AE 的理解,我们需要注意下面几个方面

- 1. 对于简单的渐进展开,我们通过求 Taylor 级数得到。
- 2. 对于一般的情况,度规函数不一定是由  $\varepsilon^n$  组成。此时,我们需要同时求解度规函数和系数。
- 3. (可能是最反直觉的一点)渐近展开中的级数有可能是发散的。但是在  $\epsilon \to 0$  时,其部分和仍然可能提供了很精确的近似。

为了理解渐近展开的第三条性质,我们考虑下面的例子。如下的积分

$$I(\varepsilon) = \int_0^\infty \frac{e^{-t}}{1 + \varepsilon t} dt,\tag{7.4}$$

在很多积分变换和特殊函数中非常常见。(如有兴趣了解更多,请参考教材二。)

如果我们对 (7.4) 中的被积函数进行 Taylor 展开, 然后通过积分, 我们就会得到如下渐进展开

$$I(\varepsilon) \sim 1 - \varepsilon + 2\varepsilon^2 - 6\varepsilon^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n n! \varepsilon^n.$$
 (7.5)

我们不难验证,这个级数的收敛半径为 0,换句话说,这个级数对于所有的  $|\varepsilon| > 0$  都是发散的。但是在图 [1] 中,我们又观察到,在  $\varepsilon$  较小时,部分和对真实值的逼近效果是非常好的。从图 [1] 中,我们也观察到,对于  $\varepsilon = 0.1$  时,前 10 项左右的部分和的逼近效果是最好的。

总结来看的话,渐进展开在  $\epsilon \to 0$  时总是精确的,但是对于有限大小的  $\epsilon$ ,存在能够减少误差的最优截断。而事实上,在多数情况下,渐进展开的前几项和已经能够给出很好的逼近了。渐近展开的逼近理论很多时候跟  $\epsilon \to 0$  和  $n \to \infty$  这两个极限的关系有关。本门课中,我们不细究逼近理论,而是着重于学习如何用这套方法解方程。

#### 7.2 渐进展开的计算

我们希望构造形如 (7.1) 中问题的渐近展开解。我们先考虑形如  $F(x,\varepsilon)=0$  的代数方程。这时候,渐近展开 (7.2) 中的系数  $\{x_n\}_{n=0}^\infty$  只是常数。在  $\varepsilon\to 0$  的极限下,问题的解,按照其渐近展开的形式,一般可以分成如下几类

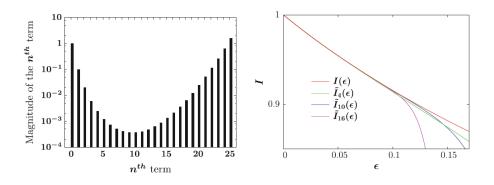


图 1: 左图:  $\varepsilon = 0.1$  时,各阶项的大小。右图: 部分和和真实值的比较。

- Regular(非奇异) solutions.  $\lim_{\epsilon \to 0} x = x_0$ ,即解有限的极限。如果  $x_0 \neq 0$ ,则首项的度规函数  $\delta_0 = 1$ 。
- Vanishing solutions.  $\lim_{\varepsilon \to 0} x = 0$ ,即解的极限为 0。此时,首相的度规函数  $\delta_0 \ll 1$ 。
- Singular(奇异) solutions.  $\lim_{\varepsilon \to 0} |x| = \infty$ 。 我们一般认为这种情况对应了有限大小的  $x_0$  而  $\delta_0(\varepsilon) \gg 1$ 。

下面,我们介绍构造渐进展开解的两种方法:展开法和迭代法。

考虑如下的二次方程

$$x^{2} - x + \frac{1}{4}\varepsilon = 0, \quad \varepsilon \to 0.$$
 (7.6)

它的精确解是

$$X_A = \frac{1 + \sqrt{1 - \varepsilon}}{2}, \quad X_B = \frac{1 - \sqrt{1 - \varepsilon}}{2}.$$

我们通过 Taylor 展开得到

$$X_A = 1 - \frac{1}{4}\varepsilon - \frac{1}{16}\varepsilon^2 + \dots = O(1),$$
 (7.7)

$$X_B = 0 + \frac{1}{4}\varepsilon + \frac{1}{16}\varepsilon^2 + \dots = O(\varepsilon). \tag{7.8}$$

我们注意到当  $\varepsilon \ll 1$  时,方程 (7.6) 可以近似看成是  $x^2 - x \approx 0$ ,于是有  $x \approx 0,1$ 。也就是说,方程 (7.6) 的前两项的平衡决定了解的大体位置,而第三项只是稍微修改了解的值。

这是一个典型的 regular(非奇异)微扰(或称摄动,perturbation)问题,在  $\varepsilon \to 0$  时,只有良定义的非奇异解。对这个问题,我们已经知道了解的所有信息,现在我们以这个问题为例,介绍这两种方法。

## 展开法

在不知道精确解的情况下,我们假设,解是非奇异的,并且 $\delta_n = \varepsilon^n, n = 0, 1, \cdots$ ,于是我们相当于假设解具有下面的形式

$$x = x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + \dots \tag{7.9}$$

将 (7.9) 代入 (7.6), 得

$$(x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + ...)^2 - (x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + ...) + \frac{1}{4}\varepsilon = 0.$$

按照 $\epsilon$ 的幂函数的阶数分类,我们得到

$$(x_0^2 - x_0) + \varepsilon(2x_0x_1 - x_1 + \frac{1}{4}) + \varepsilon^2(x_1^2 + 2x_0x_2 - x_2) + \dots = 0.$$

我们假设所有的系数都是 O(1) 的,那么,为了使每一阶  $\varepsilon^n$  的系数平衡,我们依次得到下面的方程组

$$O(\varepsilon^0): \quad x_0^2 - x_0 = 0,$$
 (7.10)

$$O(\varepsilon^1): \quad 2x_0x_1 - x_1 + \frac{1}{4} = 0,$$
 (7.11)

$$O(\varepsilon^2): \quad x_1^2 + 2x_0x_2 - x_2 = 0 \cdots$$
 (7.12)

(7.13)

通过依次求解, 我们得到

$$x_0 = 1$$
,  $x_1 = -\frac{1}{4}$ ,  $x_2 = -\frac{1}{16}$  · · · or  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = \frac{1}{4}$ ,  $x_2 = \frac{1}{16}$  · · ·

对照精确解可以验证,我们得到了原问题两个解的渐进展开。

展开法非常简单,但是非常依赖于对解的假设。例如下面的问题

$$(x-1)^2 - 9\varepsilon = 0, (7.14)$$

就不能通过展开法求解。显然,此问题的精确解是  $x=1\pm3\sqrt{\varepsilon}$ ,并不满足我们对度规函数的假设。

#### **供代決**

不同于展开法, 迭代法不再假设渐近展开的形式, 而系数和度规函数都是(依次)待定的。这 里我们先做两个基本假设

- 每个非平凡的解(平凡解是  $x \equiv 0$ ,即所有的  $x_n = 0$ )的首项是非平凡的:  $x_0 \neq 0$  且  $\delta_0 \neq 0$ 。
- 首项的系数是有限的,即在  $\varepsilon \to 0$  时  $x_0 = O(1)$ 。

我们还是以 (7.6) 为例,先设  $x \sim x_0 \delta_0(\varepsilon)$ ,代入方程得

$$x_0^2 \delta_0^2 - x_0 \delta_0 + \frac{1}{4} \varepsilon = 0.$$

我们认为此方程中不是所有的项都是同样重要的,否则这也不是一个微扰问题了。为了近似求解此方程,我们使用如下的主项平衡原理(principle of dominant balance):方程中的一些项为主项,它们的平衡给出领阶方程;剩下的项是次要项,它们在  $\varepsilon \to 0$  时是主项的高阶小量。如果这种平衡存在,我们也把它称为 distinguished limit。

显然,如果主项只有一项的话,只有无解或者平凡解的情况,如果主项是全部三项的话,方程也是无解的。(想想为什么)

对于主项有两项的情况,我们考虑下面三种可能性(注意,由于系数都是 O(1) 的,我们要先保证阶数的匹配)

(a) Term (1,2):  $\delta_0^2 = \delta_0 \implies \delta_0 = 1$ 

(b) Term (1,3) :  $\delta_0^2 = \varepsilon \implies \delta_0 = \sqrt{\varepsilon}$ 

(c) Term (2,3) :  $\delta_0 = \varepsilon \implies \delta_0 = \varepsilon$ 

下面,我们要继续验证,是不是余下的项是不是真的是次要项。容易发现,(b) 违反了主项平衡原理,而(a) 和(c) 是两个合理的主项平衡(我们也说,(a) 和(c) 是 distinguished limits)。

而对于 (a) 和 (c),我们可以进一步的通过领阶方程得到首项系数  $x_0$ ,即

(a): 
$$x \sim 1$$
, (c):  $x \sim \frac{1}{4}\varepsilon$ .

我们发现, (a) 和 (c) 分别对应了精确解  $x_A$  和  $x_B$ ,即  $x_A \sim 1$ ,  $x_B \sim \frac{1}{4} \varepsilon$ 。

更高阶的项可以通过重复上述的步骤得到,得到寻找主项平衡(distinguished limits)找到度规函数  $\delta_i(\varepsilon)$  并找到对应的系数  $x_i$ 。但是要注意,依次找到的度规函数需要满足渐进的序列关系。例如,对于  $x_B$ ,在求得了  $x_B \sim \frac{1}{4}\varepsilon$  之后,可以依次地假设并求解

$$x_B \sim \frac{1}{4}\varepsilon + \delta_{1B}x_{1B}, \quad x_B \sim \frac{1}{4}\varepsilon + \delta_{1B}x_{1B} + \delta_{2B}x_{2B} \cdots$$

在逐项求解中,除了要注意逐项平衡原理,还应该注意  $\varepsilon \gg \delta_{1B} \gg \delta_{2B}$ 。

回到问题 (7.14),虽然展开法不再好用,但是使用迭代法,我们可以依次得到  $x \sim x_0 \delta_0(\varepsilon) + x_1 \delta_1(\varepsilon)$ 。这里度规函数为  $\delta_0 = 1$ ,  $\delta_1 = \sqrt{\varepsilon}$ ,而系数为  $x_0 = 1$ ,1,  $x_1 = \pm 3$ 。而更高阶项的系数只有  $x_i = 0$ , $i = 2,3,\cdots$ 。(练习)

## 7.3 ODE 问题的非奇异展开

我们可以讲展开法和迭代法推广到 ODE 和 PDE 问题中。需要注意的是,跟上一节的代数方程不同,对微分方程问题解求渐进展开的时候,在每一阶中,我们需要确定一个方程,而不只是一个常数。

我们回顾上一章节学习的抛射问题,在无量纲化之后,我们可以得到如下的含参数的 ODE 初值问题

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{1}{(1+\varepsilon x)^2}, \quad x(0) = 1, \quad x'(0) = \alpha.$$

注意,这里的初值条件跟上一章中略有不同,但是所有的参数都是无量纲的。我们考虑  $\epsilon \to 0$  的情形,利用展开法,假设有如下的渐进展开形式

$$x(t) \sim x_0(t) + \varepsilon x_1(t) + \varepsilon^2 x_2(t) + \cdots$$

下一步要将这个展开形式代入方程和初值条件中。

ODE 的左端部分如下

$$\frac{d^2x}{dt^2} = x_0''(t) + \varepsilon x_1''(t) + \varepsilon^2 x_2''(t) + \cdots$$

对于 ODE 的右端, 我们先按照  $\varepsilon$  对其展开

$$-\frac{1}{(1+\varepsilon x)^2} = -1 + 2\varepsilon x - 3\varepsilon^2 x^2 + \cdots$$

然后我们利用这个展开形式将右端进一步展开

$$\begin{split} \frac{d^2x}{dt^2} &= -1 + 2\varepsilon \left(x_0(t) + \varepsilon x_1(t) + \varepsilon^2 x_2(t) + \cdots\right) - 3\varepsilon^2 \left(x_0(t) + \varepsilon x_1(t) + \varepsilon^2 x_2(t) + \cdots\right)^2 + \cdots \\ &= -1 + \varepsilon \left(2x_0\right) + \varepsilon^2 \left(2x_1 - 3x_0^2\right) + O(\varepsilon^3). \end{split}$$

我们也对初值进行渐进展开,从而推导出 x, 满足的初值条件:

$$x(0) = 1 \quad \Rightarrow \quad x_0(0) + \varepsilon x_1(0) + \varepsilon^2 x_2(0) + \dots = 1 + \varepsilon 0 + \varepsilon^2 0 + \dots$$
$$x'(0) = \alpha \quad \Rightarrow \quad x'_0(0) + \varepsilon x'_1(0) + \varepsilon^2 x'_2(0) + \dots = \alpha + \varepsilon 0 + \varepsilon^2 0 + \dots$$

这样,我们就可以把原 ODE 问题按照  $\varepsilon$  的阶数,分解成了若干的子问题

$$O(\varepsilon^{0}): x_{0}'' = -1, \quad x_{0}(0) = 1, \quad x_{0}'(0) = \alpha;$$
 $O(\varepsilon^{1}): x_{1}'' = -2x_{0}, \quad x_{1}(0) = 0, \quad x_{1}'(0) = 0;$ 
 $O(\varepsilon^{2}): x_{2}'' = 2x_{1} - 3x_{0}^{2}, \quad x_{2}(0) = 1, \quad x_{2}'(0) = 0; \quad \cdots$ 

我们注意到,高阶问题依赖于低阶问题的解,所以我们可以由低到高地依次求解子问题。 我们先求解  $O(\varepsilon^0)$  的问题,就会得到领阶问题的解

$$x_0(t) = -\frac{1}{2}t^2 + \alpha t + 1.$$

将  $x_0$  代入 $O(\varepsilon^1)$  的问题,就会得到

$$x_1'' = -t^2 + 2\alpha t + 2$$
,  $x_1(0) = 0$ ,  $x_1'(0) = 0$ .

求解此子问题, 我们得到

$$x_1(t) = -\frac{1}{12}t^4 + \frac{\alpha}{3}t^3 + t^2.$$

类似地,我们可以求解更高阶的子问题。

于是,我们可以将渐近展开的解整合成如下的形式

$$x(t) = \left(-\frac{1}{2}t^2 + \alpha t + 1\right) + \varepsilon \left(-\frac{1}{12}t^4 + \frac{\alpha}{3}t^3 + t^2\right) + O(\varepsilon^2).$$

作为本节的结束,我们考虑如下的问题: 当我们对 ODE 求渐进展开解的时候,是否这个渐进展开对于所有的 t 都成立呢? 这个答案显然是否定的。例如,在这个例子中,当  $t = O(1/\sqrt{\varepsilon})$  时,

$$O(x_0) = O(\varepsilon x_1) = O(1/\varepsilon).$$

这时候,我们渐进展开的假设已经被违反了。这种渐进展开的破缺,往往伴随了问题中一个新的尺度的出现。我们在下一节的奇异微扰问题中,会进一步讨论这个问题。

#### 7.4 奇异微扰问题

如果问题的一个或者多个解在  $\epsilon \to 0$  时表现出奇异(发散)的行为,那么这样的问题是奇异微扰问题。

如果我们用非奇异的问题的渐进展开来求解奇异的问题时, 奇异解是无法得到的, 于是只能得 到原问题的部分解, 甚至什么解都得不到。

这种行为在所有类别的奇异微扰问题中是普遍存在的:

- 对于代数方程来说,如果一个 N 阶多项式在  $\varepsilon \to 0$  时,它的领阶方程退化为了一个 M (M < N) 阶的多项式,那么这是一个奇异微扰问题,而方程只有 M 个非奇异解。
- 对于微分方程来说,如果在  $\epsilon \to 0$  时出现了高阶导数的消失,那么领阶方程的解一般不能满足所有的初值或者边值条件。
- 在其他一些情况中, $\varepsilon = 0$  时的领阶问题会和原问题 ( $\varepsilon > 0$ 时) 有更本质的不同,比如,一个奇异的 PDE 问题退化成 ODE 问题,一个奇异的 ODE 问题退化问代数方程问题,甚至一个方程组退化成一个方程。

事实上,奇异的解并没有真的丢失掉,而是可以通过适当的尺度调节 (rescaling) 将它们复原出来。换句话说,尺度的选择,和渐近展开的形式决定了你能得到什么样的解。

我们还是先以一个可以直接求解的例子来来演绎尺度条件的方法。考虑在 $\epsilon \to 0$ 时,如下的代数方程

$$\varepsilon x^2 - 2x + 1 = 0. \tag{7.15}$$

如果我们直接将 $\varepsilon=0$ 代入的话,就得到了

$$-2x+1=0 \quad \Rightarrow x=\frac{1}{2}.$$

可见, 领阶方程只有一个根, 而原问题有两个根。利用求根公式, 我们知道,

$$x = \frac{1 \pm \sqrt{1 - \varepsilon}}{\varepsilon}.$$

于是,我们直接得到两个根的渐进展开

$$x_A \sim \frac{2}{\varepsilon} - \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{8}, \quad x_B \sim \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{8} + \frac{\varepsilon^2}{16}.$$

我们观察,领阶方程只能得到非奇异解  $x_B$  的首项,而  $x_A$  在  $\epsilon \to 0$  时是发散的,并不能被非奇异的渐近展开表示出来。

我们讲这两个根的首项代回原方程,得到

$$x_A: \quad \varepsilon \left(\frac{2}{\varepsilon}\right)^2 - 2\left(\frac{2}{\varepsilon}\right) + 1 = 0, \quad x_B: \quad \varepsilon \left(\frac{1}{2}\right)^2 - 2\left(\frac{1}{2}\right) + 1 = 0.$$

这使得我们可以进一步观察差别的原因。

我们注意到,这两个解对应了不同的主项平衡。对于  $x_A$  来说,前两项是主项,而对于  $x_B$  来说,后两项是主项。而如果解非奇异,我们也会得到后两项是主项,这对应了  $x_B$  的确是非奇异解。

下面我们介绍处理奇异解的系统步骤:

- 1.  $\diamondsuit x = \delta_0(\varepsilon)X$ , 并代入原问题。
- 2. 根据主项平衡原理选取  $\delta_0(x)$  (包括验证被忽略的项的确是次要项)。考虑所有  $\delta_0(x)$  的可能性,这对应了原问题的所有非奇异解和奇异解。
- 3. 对于给定的  $\delta_0(x)$ ,得到关于 X 的非奇异扰动问题。利用非奇异扰动问题的方法求解。(展开 法或者迭代法。)
- 4. 通过  $\delta_0$  的调整,得到 x 解的最终形式。

下面我们通过上面的例子来演示这个方法。将  $x = \delta_0(\varepsilon)X$  代入 (7.15),我们得

$$\varepsilon \delta_0^2 X^2 - 2\delta_0 X + 1 = 0. (7.16)$$

对于主项有两项的情况,我们考虑下面三种可能性(注意,由于系数都是 O(1) 的,我们要先保证阶数的匹配)

(a) Term (1,2):  $\varepsilon \delta_0^2 = \delta_0 \implies \delta_0 = 1/\varepsilon$ 

(b) Term (1,3):  $\varepsilon \delta_0^2 = 1 \implies \delta_0 = 1/\sqrt{\varepsilon}$ 

(c) Term (2,3) :  $\delta_0 = 1 \Rightarrow \delta_0 = 1$ .

容易验证,case (b) 并不满足主项平衡原理,应该舍去。而 case (a) 和 (c) 满足主项平衡原理,期中 case (c) 对应了非奇异解,case (a) 对应了奇异解。我们下面只看奇异解的情况。将  $x = X/\varepsilon$  代入原问题,得到调整尺度后的非奇异问题

$$X^2 - 2X + \varepsilon = 0.$$

下面我们用展开法,设 $X(\varepsilon)$ 满足如下的渐进展开形式

$$X \sim X_0 + \varepsilon X_1 + \varepsilon^2 X_2$$
.

将这个展开代入方程, 其首阶部分为

$$X_0^2 - 2X_0 = 0.$$

它的解为  $X_0 = 0$  和  $X_0 = 2$ 。我们舍掉平凡的情况, $X_0 = 0$ ,而只考虑  $X_0 = 2$ 。这样我们就得到了奇异解的首项

$$x_A \sim 2/\varepsilon$$
.

我们可以比较一下迭代法和这里介绍的尺度调节法的相同与不同。相同点是,他们都需要需要寻找首项的度规函数  $\delta_0$ ,各阶的系数也是一样的。(原因可以由下面的展开容易看出。)

不同的地方是, 迭代法是依次的求解度规函数和系数, 最终解可以表示为

$$x \sim \delta_0 x_0 + \delta_1 x_1 + \delta_2 x_2 + \cdots$$

而尺度调节法是把整个问题转化成另外一个非奇异的微扰问题  $X(\varepsilon)$ ,下一步可以用迭代法或者展开法得到

$$X(\varepsilon) \sim X_0 + \tilde{\delta}_1 X_1 + \tilde{\delta}_2 X_2 + \cdots$$

而经过整合后,则有

$$x \sim \delta_0 \left( X_0 + \tilde{\delta}_1 X_1 + \tilde{\delta}_2 X_2 + \cdots \right)$$

最后我们看一个 ODE 奇异扰动问题的例子。回顾一下第二章学习的一个简单的酶催化的化学 反应过程

$$S + E \stackrel{k_2}{\longleftrightarrow} C \stackrel{k_3}{\longrightarrow} P + E. \tag{7.17}$$

这里的 S 是底物 ("substrate" reactant) 的浓度,P 是最终产物的浓度,E 来表示酶的浓度,C 是中间产物的浓度。

根据质量作用定律,我们得到反应速率方程组

$$\frac{dP}{dt} = k_3C, \quad \frac{dC}{dt} = k_1SE - k_2C - k_3C.$$

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

我们进一步假设,最初系统里只有底物和酶,因为,我们给出如下的初值

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

利用质量守恒律,我们容易推出  $E(t) = E_0 - C(t)$ 。再对系统进行无量纲化,我们可以得到无量纲化的初值问题(练习)

$$\frac{ds}{dt} = -s(1-c) + \lambda c, \qquad s(0) = 1,$$

$$\varepsilon \frac{dc}{dt} = +s(1-c) + \mu c, \qquad c(0) = 0,$$

$$\frac{dp}{dt} = (\mu - \lambda)c, \qquad p(0) = 0.$$

这里我们对无量纲参数有如下的假设

$$\varepsilon = \frac{E_0}{S_0} \ll 1$$
,  $\lambda = \frac{k_2}{k_1 S_0} = O(1)$ ,  $\mu = \frac{k_2 + k_3}{k_1 S_0} = O(1)$ .

这个假设说明,初始时刻酶的量远小于底物的量。注意,s 和 c 的方程并不依赖于 p,所以我们不妨只考虑 s 和 c 的初值问题。

在  $\epsilon \to 0$  时,这是一个奇异微扰问题,因为 c 的方程会从一个一阶微分方程退化成一个代数方程。我们先假设方程的解满足非奇异的展开

$$s(t) = s_0(t) + O(\varepsilon), \quad c(t) = c_0(t) + O(\varepsilon).$$

将展开代入原问题, 我们得到如下的领阶方程

$$\frac{ds_0}{dt} = -s_0(1-c_0) + \lambda c_0, \quad 0 = s_0(1-c_0) + \mu c_0.$$

而且我们容易得到首项的初值条件

$$s_0(0) = 1$$
,  $c_0(0) = 1$ .

显然,这个初值条件和领阶方程中的代数方程是矛盾的。所以非奇异的展开并不能帮我们求解此问题。

更高级的尺度调节法可以帮我们求解这个奇异微扰问题,但是这些方法超出了本课的内容范围。感兴趣的同学欢迎参阅教材二的第7,8,9,10章。另外,也可以参考这个教材

https://www.amazon.com/Advanced-Mathematical-Methods-Scientists-Engineers/dp/0387989315/ref=la\_B001IQUJ56\_1\_1?s=books&ie=UTF8&qid=1522077321&sr=1-1