

1003-7713/2004/06-665-5

## 自催化三分子模型内噪声随机共振\*

龚玉兵<sup>a,b</sup>, 侯中怀<sup>a</sup>, 辛厚文<sup>a\*\*</sup>

(a. 中国科学技术大学化学物理系, 合肥 230026; b. 烟台师范学院物理系, 烟台 264025)

**摘要:** 运用化学 Langevin 方程, 数值研究了内噪声对单个和单向耦合自催化三分子模型动力学行为的影响. 研究发现, 对于单个振子体系, 内噪声可以诱导持续振荡, 而且随着系统尺度的增大, 信噪比经过一个极大值, 从而证明了内噪声随机共振和最佳尺度效应的存在; 对于单向耦合系统, 信噪比还随耦合强度的变化而经过极大值. 此外, 边界条件对耦合体系的内噪声随机共振行为有很大影响, 非零流条件下, 耦合可以增强内噪声随机共振, 而零流条件下, 耦合会抑制随机共振; 当耦合强度适宜时, 每个振子发生随机共振时的尺度几乎相同, 表明最佳体系尺度和耦合强度有助于体系达到最佳的化学反应状态.

**关键词:** 自催化三分子模型; 内噪声; 化学 Langevin 方程; 随机共振

**中图分类号:** O664 **文献标识码:** A

## Internal Noise Stochastic Resonance in a Cubic Autocatalator

Gong Yubing<sup>a,b</sup>, Hou Zhonghuai<sup>a</sup>, Xin Houwen<sup>a\*\*</sup>

(a. Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026;

b. Department of Physics, Yantai Teachers University, Yantai 264025)

**Abstract** The stochastic resonance in chemical reaction systems has recently attracted growing attentions. Using chemical Langevin equation, the effect of internal noise has been studied on the dynamical behavior of a single and a one-way coupled cubic autocatalator. For the single system, it is found that the internal noise can induce sustained oscillations, and the signal-to-noise ratio (SNR) undergoes a maximum with the variation of the system size. For the coupled system, the SNR passes through a maximum with changing coupling strengths as well as with changing system sizes, which demonstrates the occurrence of the internal noise stochastic resonance (INSR) and optimal size effect. In the presence or absence of influx into the system, the coupling enhanced or suppressed INSR is found in the coupled system. All cells of the coupled system appear to exhibit INSR at an approximately equal size at a suitable coupling strength, implying that the optimal system size and coupling strength can make the system reach an optimal chemical reaction state.

**Keywords** Cubic autocatalator, Internal noise, Chemical Langevin equation, Stochastic resonance

## 1 引言

在过去的 20 年里, 非线性动力系统中噪声和无序的积极作用已被广泛研究, 随机共振 (Stochastic Resonance) 现象则是其最重要的一个方面<sup>[1]</sup>. 自从

Benzi 等人提出随机共振概念以来<sup>[2]</sup>, 科学家们在许多领域对这一异常现象进行了大量研究. 近来发现, 在没有外信号的情况下, 非线性系统仍然可以表现出类随机共振行为<sup>[3-6]</sup>, 这些现象被称作自治随机共振<sup>[3]</sup>、相干共振<sup>[4-6]</sup>或内信号随机共振<sup>[7-13]</sup>. 我

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (20173052, 2020301).

\*\* Corresponding author, E-mail: nclxin@mail.ustc.edu.cn Received 27 November 2003; in final form 16 February 2004.

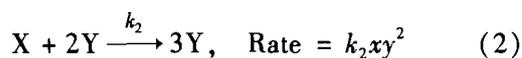
们知道,在非线性科学中,耦合体系动力学是一个重要的研究领域,其中噪声的作用已经引起越来越多的关注.研究发现,存在外信号时,耦合能够增强随机共振<sup>[14-16]</sup>,噪声可以增强信号传播<sup>[17-19]</sup>;无外信号时,耦合体系中的随机共振现象已被实验观察<sup>[20]</sup>和数值研究<sup>[9]</sup>.

然而迄今为止,大多数的研究仅涉及到外噪声的影响,人们通常在确定性动力学微分方程上直接加噪声,或者把噪声乘到某一项上构成随机微分方程,以此来研究系统的随机动力学行为.但对于外噪声而言,噪声强度和关联时间依赖于外界环境,而与体系的动力学特征和尺度没有关系.实际上,在化学反应中存在另一种噪声,它来源于随机反应过程中的随机涨落,是内噪声.这种内噪声依赖于反应的具体过程和系统尺度,属于体系内禀性质.人们普遍认为,内噪声强度与体系尺度成反比.因此,在宏观极限条件下,内噪声可以忽略不计,系统动力学行为可以由确定性方程描述.然而,如果系统尺度很小,如活体细胞中的生物化学反应<sup>[21]</sup>或纳米尺度晶体表面上的催化反应<sup>[22]</sup>等,参与反应的分子数很少,此时内噪声就必须考虑.那么,内噪声如何影响体系动力学行为,特别是,是否存在类似于随机共振行为的“内噪声随机共振”,就成为一个重要而有意义的研究课题.

Gray-Scott 模型被用来描写一类化学和生物化学反应<sup>[23-26]</sup>.在本工作中,我们数值研究了内噪声对 Gray-Scott 模型动力学行为的影响.研究发现,内噪声也具有积极作用,它可以诱导持续反应振荡,并且在适宜的体系尺度(内噪声强度)下,该诱导振荡信号最强,信噪比达到最大值,证明了“内噪声随机共振”的存在;为进一步说明内噪声的作用,我们还研究了包含五个振子的耦合体系.结果表明,噪声强度和耦合强度可以改变每个振子的内噪声随机共振行为,在合适的耦合强度下,所有振子在几乎相同的体系尺度下发生随机共振.另外,不同边界条件可以使体系的内噪声随机共振产生明显的改变.

## 2 模型与方程

Gray-Scott 模型具有三个反应步骤<sup>[23]</sup>:



这里, P 为前导物; X(抑制物)和 Y(自催化物)是随时间变化的反应物; C 为产物;  $x$ 、 $y$  分别为 X 和 Y 的浓度;  $k_1$ 、 $k_2$ 、 $k_3$  为反应速率常数;  $p_0$  为 P 的浓度,设为常量,即体系为开放系统.假定产物 C 以恒定速率产生,并且一旦形成即被除去.对于单个体系,确定性反应速率方程为:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 p_0 - k_2 xy^2 = f_1(x, y) \quad (4)$$

$$\frac{dy}{dt} = k_2 xy^2 - k_3 y = f_2(x, y) \quad (5)$$

考虑到内噪声的影响,这个确定性方程不再适用.具有随机噪声的反应系统可以用“化学主方程”(Chemical Master Equation)所描写的生-灭过程来描述,它可以反映两种反应物分子数的概率随时间的演化<sup>[28]</sup>.通常情况下,解析求解化学主方程很困难,一般采用数值模拟方法求解. Gillespie 建立了被广泛采用的精确随机模拟方法(SSA)<sup>[27]</sup>和  $\tau$ -leap 方法<sup>[28]</sup>,分别处理小尺度和较大尺度下反应过程的随机行为.虽然这两种方法可以直接研究内噪声的效果,但由于没有涉及到内噪声的来源和强度,因此,这两种方法不够充分有效,不能明确阐述其化学意义.最近, Gillespie 发现,当体系具有“宏观无限大”的时间尺度时,体系动力学行为可以用化学 Langevin 方程(Chemical Langevin Equation)很好地近似<sup>[29]</sup>,而且,该方程能够清楚地表达内噪声如何与体系的参量、体系尺度和随时间变化的态变量相关联.因此,化学 Langevin 方程是一种意义明确而有效的方法.

根据 Gillespie 理论<sup>[29]</sup>,方程(4)和(5)的化学 Langevin 方程形式如下:

$$\frac{dx}{dt} = f_1(x, y) + \left(\frac{k_1 p_0}{V}\right)^{1/2} \Gamma_1 - \left(\frac{k_2 xy^2}{V}\right)^{1/2} \Gamma_2 \quad (6)$$

$$\frac{dy}{dt} = f_2(x, y) + \left(\frac{k_2 xy^2}{V}\right)^{1/2} \Gamma_2 - \left(\frac{k_3 y}{V}\right)^{1/2} \Gamma_3 \quad (7)$$

其中,  $x$  和  $y$  分别为抑制物和自催化物的浓度;  $\Gamma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 为 Gaussian 白噪声;  $V$  为体系尺度,可以用来改变内噪声的强度.

我们取  $k_1 = 1.0$ ,  $k_2 = 0.9$ ,  $k_3 = 1.0$ ,  $p_0$  为控制参量.通过对确定性方程(4)和(5)的稳定性分析,容易得到定态为  $(x, y) = ((k_2 p_0)^{-1}, p_0)$ ,  $p_0 > 1.054$  时的定态稳定,  $p_0 < 1.054$  时的定态不稳定,系统出现超临界 Hopf 分岔,并产生一个稳定的极限环.对方程(6)和(7)进行数值积分时,我们取  $p_0 =$

1.07,使系统处于稳定区并靠近分岔点(1.054).

对于单向耦合系统,化学 Langevin 方程为:

$$\frac{dx_n}{dt} = f_1(x_n, y_n) + \left(\frac{k_1 p_0}{V}\right)^{1/2} \Gamma_1 - \left(\frac{k_2 x y^2}{V}\right)^{1/2} \Gamma_2 \quad (8)$$

$$\frac{dy_n}{dt} = f_2(x_n, y_n) + D_n(y_{n-1} - y_n) + \left(\frac{k_2 x y^2}{V}\right)^{1/2} \Gamma_2 - \left(\frac{k_3 y}{V}\right)^{1/2} \Gamma_3 \quad (9)$$

这里,  $x_n$  和  $y_n$  分别为第  $n$  振子抑制物和自催化物的浓度;  $D_n$  为耦合常数; 第  $(n-1)$  和第  $n$  振子之间通过扩散而存在耦合,  $n = 1, 2, \dots, N$ . 为方便讨论,我们只考虑自催化物之间存在耦合. Gaussian 白噪声  $\Gamma_i$  满足  $\langle \Gamma_i \rangle = 0, \langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t + \tau) \rangle = \delta_{ij} \delta(\tau)$ . 为了定量计算内噪声随机共振,取  $y$  的时间序列,在 Welch 窗口对其 Fourier 功率谱进行分析,用信噪比 (SNR) 衡量共振的强度.

### 3 结果与讨论

首先考虑单个振子体系式(6)和(7). 令  $p_0 = 1.07$ ,体系靠近 Hopf 分岔点,但处于定态区,当体系尺度足够大、确定性方程适用时,体系不振荡. 然而,一旦计入内噪声,即使强度很小 ( $V = 10^8$ ),体系也立即呈现小振幅的持续“随机”振荡. 这种随机振荡与随机噪声的区别反映在功率谱上就是出现一个明显的峰. 内噪声诱导振荡反映了一定的共振效果,如果体系尺度很大而内噪声可以忽略,在定态区就不存在振荡,但当体系尺度很小而内噪声很大时,诱导振荡将被噪声淹没,因此,只有在适当的体系尺度下,诱导振荡才比较明显.

随着  $V$  由大到小改变,噪声强度逐渐增大,诱导振荡信号也不断增强,因此功率谱峰增高,在  $V = 9 \times 10^4$  时达到最大值. 然而,当尺度进一步增大时,峰却开始下降. 图 1 是三个典型尺度值对应的功率谱. 可以清楚地看到峰高度的差别,图 2 是信噪比 (SNR) 随体系尺度的变化. 可见,随着  $V$  的增大,信噪比在  $V = 9 \times 10^4$  时经过极大值,这一现象充分证明了内噪声随机共振的产生. 内噪声随机共振现象与化学反应振荡有两方面的联系,首先,由于内噪声不可避免,体系中的反应振荡实际就是内在的随机振荡,而内噪声诱导振荡的产生,使得反应振荡对控制参量的改变更加稳定;其次,化学反应体系会通过改变内噪声强度,利用内噪声诱导或加强振荡行为,而不是抵制内噪声. 神经元<sup>[30]</sup>和细胞中钙信号过

程<sup>[31]</sup>中的一些有趣的最佳尺度现象证明了这一点. 这意味着,内噪声随机共振可能是活体细胞生物过程调整和运行广泛采用的一种机制.

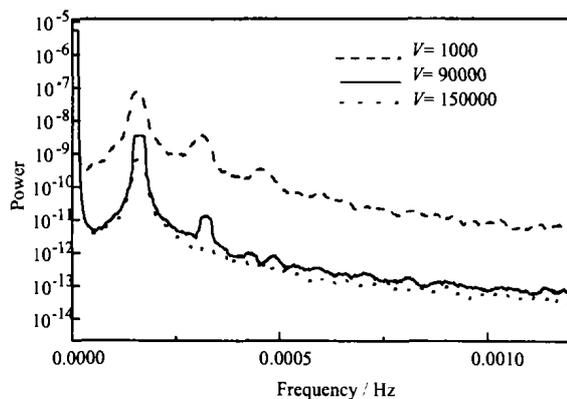


图 1 内噪声诱导振荡的功率谱  
Fig. 1 The power spectra of internal noise-induced oscillation

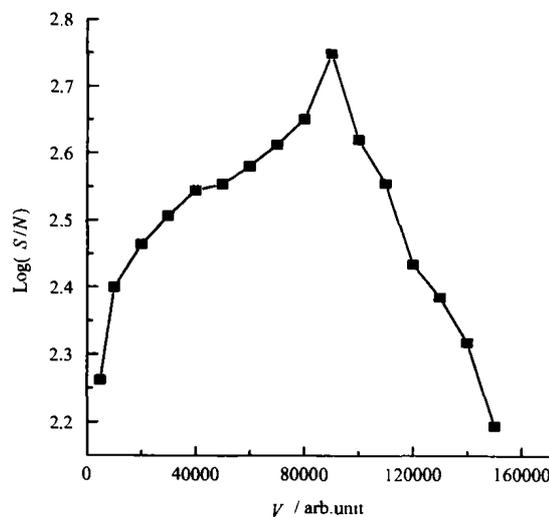


图 2 单个振子体系信噪比随体系尺度  $V$  的变化  
Fig. 2 The variation of SNR as a function of  $V$  for the single oscillator

对于耦合体系,取  $N = 5, p_0 = 1.1$ ,不考虑内噪声影响时,每个振子都处于定态. 我们主要讨论体系尺度和耦合强度对振子随机共振的影响. 用  $C_n (n = 1, \dots, 5)$  代表第  $n$  振子,考虑二种边界条件: 零流条件和非零流条件.

首先考虑非零流条件. 取  $y_0 = 1.5$ , 即有反应物流入第一个振子,系统与外界存在耦合. 当计入内噪声时,便产生了诱导振荡. 然而,不同振子的功率谱随振子数、耦合强度和体系尺度而有所不同. 先讨论固定耦合强度时信噪比随尺度的变化. 对于小耦合强度,每个振子几乎是独立的,信噪比基本相同. 当耦合强度增加到  $D_n = 0.05$  时,不同振子的信噪比随振子数的增加而有所增大,发生随机共振的尺度有

很大区别,见图3(a);当耦合强度增大到0.1时,信噪比随振子数明显增加,而发生随机共振的尺度彼此靠近,见图3(b);当耦合强度增大到0.3时,每个振子发生随机共振的尺度处在很窄的范围,  $0.8 \times 10^4 \leq V \leq 1.1 \times 10^4$ ,表现出较好的相干性,见图3(c);然而,如果继续增大耦合强度,发生随机共振的尺度又开始远离;当  $D_n = 0.5$  时,信噪比随体系尺

度的减小而单调下降,表明不存在内噪声随机共振. 这表明,只有在适当的耦合强度范围内才会出现内噪声随机共振,而且存在一个最佳的耦合强度,使得每个耦合振子在几乎相同的尺度下发生随机共振. 从图3(c)还可见,信噪比最大值随振子数增大而显著增加,表明内噪声随机共振随耦合而得到加强.

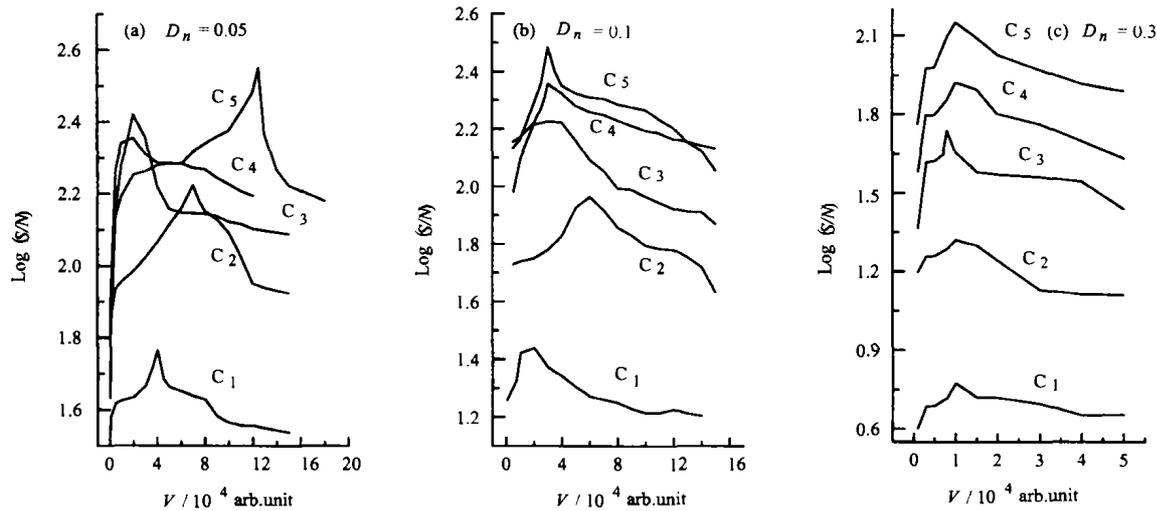


图3 耦合体系信噪比随体系尺度的变化

Fig. 3 The SNR of the coupled system as a function of  $V$

下面讨论零流边界条件. 固定体系尺度,随着耦合强度的变化,体系能够呈现内噪声随机共振. 图4是  $V = 10^4$  时的结果. 可见,随着振子数增大,信噪比最大值趋于减小,表明耦合压制了内噪声随机共振,而发生随机共振时的耦合强度移向较大值. 从体系尺度的影响看,随振子数增大,信噪比最大值有所下降,但最大值差别依赖于耦合强度的大小. 在合适的耦合强度下,振子可以在几乎相同的尺度下发生随

机共振.

图5是二个典型耦合强度值下信噪比的变化. 当耦合强度很小时,每个振子几乎是独立的,信噪比最大值差别很小,而共振时的尺度却有明显差别(图5(a));随着耦合强度增大,信噪比最大值差别变大,在  $D_n = 0.05$  时,差别明显,而共振时的尺度却差别很小(图5(b)). 信噪比最大值随振子数增大而减小表明,耦合压制了内噪声随机共振,这与非零流边界条件的结果明显不同. 这说明边界条件可以显著改变耦合振子的内噪声随机共振行为. 从图3和图5还可以看到,随着耦合强度的增大,发生随机共振时的体系尺度趋于减小,说明耦合强度与体系尺度在内噪声随机共振中起着同样的作用.

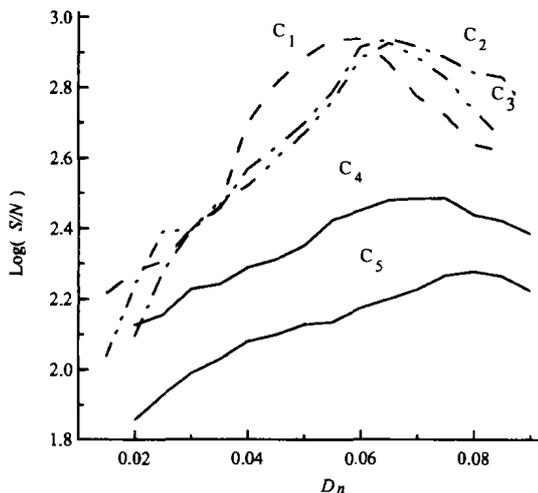


图4 信噪比随耦合强度的变化( $V = 10^4$ )

Fig. 4 The variation of SNR with coupling strength at  $V = 10^4$

## 4 结论

我们数值研究了单个和耦合自催化三分子模型的内噪声随机共振行为. 结果表明,适当的内噪声可以诱导化学反应振荡,而且在最佳体系尺度(或内噪声强度)下,系统呈现内噪声随机共振行为. 对于耦合体系,每个耦合振子的内噪声随机共振行为依赖于振子数和耦合强度的大小. 此外,边界条件对耦

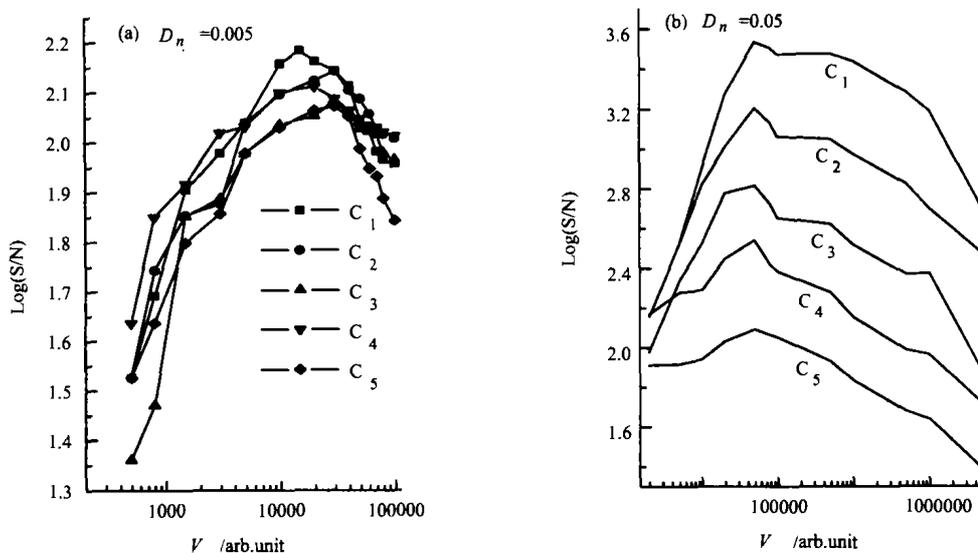


图 5 二个典型耦合强度下耦合振子信噪比随体系尺度的变化

Fig. 5 The variation of SNR with  $V$  at two typical coupling strengths

合体系的内噪声随机共振有显著的影响,在不同边界条件下,耦合可以增强也可以压制内噪声随机共振.在最佳耦合强度下,耦合振子可以在几乎相同的尺度下发生随机共振,这意味着最佳尺度和耦合强度可以使体系反应振荡达到最佳状态.我们希望这一研究结果对进一步了解介观化学反应体系,尤其是活体细胞内的生物化学反应有所帮助.

### 参 考 文 献

- [1] Gammaitoni I P, Hanggi P, Jung P, et al. *Rev. Mod. Phys.*, 1998, **70**: 223
- [2] Benzi Z, Sutera S, Vulpiani A. *J. Phys. A*, 1981, **14**: L453
- [3] Hu G, Ditzinger T, Ning C Z, et al. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **71**: 807
- [4] Pikovsky A S, Kurths J. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**: 775
- [5] Neiman A, Saparin P, Stone L. *Phys. Rev. E*, 1997, **56**: 270
- [6] Lee S G, Neiman A, Kim S. *Phys. Rev. E*, 1997, **57**: 3292
- [7] Yang L F, Hou Z H, Xin H W. *J. Chem. Phys.*, 1999, **110**: 3591
- [8] Hou Z H, Yang L F, Xin H W. *J. Chem. Phys.*, 1999, **111**: 1592
- [9] Jiang Y J, Xin H W. *Phys. Rev. E*, 2000, **62**: 1846
- [10] Zhong S, Xin H W. *Chem. Phys. Lett.*, 2000, **321**: 309
- [11] Zhong S, Xin H W. *J. Phys. Chem. A*, 2001, **105**: 410
- [12] Xin Houwen (辛厚文). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2000, **13**: 388
- [13] Zhang Jiqian (张季谦), Xin Houwen (辛厚文). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2001, **14**: 269
- [14] Lindner J, Meadows B, Ditto W. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**: 3
- [15] Lindner J, Meadows B, Ditto W. *Phys. Rev. E*, 1996, **53**: 2081
- [16] Kim S, Park S, Pyo H. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**: 1620
- [17] Lindner J, Chandramouli S, Bulsara A R, et al. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**: 5048
- [18] Zhang Y, Hu G, Gammaitoni L. *Phys. Rev. E*, 1998, **58**: 5048
- [19] Locher M, Cigna D, Hunt E. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, **80**: 5212
- [20] Postnov D, Han S K, Yim T C, et al. *Phys. Rev. E*, 1999, **59**: 3791
- [21] Elowitz M B, Levine A J, Saggia E D, et al. *Science*, 2002, **297**: 1183
- [22] Visart de Bocame T, Hruse N. *Chaos*, 2002, **12**: 118
- [23] Gray P, Scott S. *Chem. Eng. Sci.*, 1983, **38**: 29
- [24] Satnoianu R, Merkin J, Scott S. *Phys. Rev. E*, 1998, **57**: 3246
- [25] Satnoianu R, Merkin J, Scott S. *Phys. D*, 1998, **124**: 345
- [26] Meratov C, Osipov V. *Physica D*, 2001, **155**: 112
- [27] Gillespie D. *J. Phys. Chem.*, 1977, **81**: 2340
- [28] Gillespie D. *J. Chem. Phys.*, 2002, **115**: 1716
- [29] Gillespie D. *J. Chem. Phys.*, 2000, **113**: 297
- [30] White J, Rubinstein J, Kay A. *Trends. Neurosci.*, 2000, **23**: 131
- [31] Shuai J, Jung P. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**: 068102