Szabadenergia-becslések és reakciódiffúzió-folyamatok aszimptotikus viselkedése

Konrad Gröger

Kivonat

A Poincaré-egyenlőtlenséghez szorosan kapcsolódó egyenlőtlenségek egy osztályát bizonyítjuk. Durván szólva ezek az egyenlőtlenségek azt állítják, hogy sok reakciódiffúzió-rendszerben a szabadenergia megbecsülhető a megfelelő disszipációs sebességgel. Ez lehetővé teszi, hogy leírjuk ilyen reakciódiffúzió-rendszerek asszimptotikus viselkedését a koncentrációkra vonatkozó globális, egyenletes korlátok használata nélkül.

1. Bevezetés

Ebben a cikkben olyan reakciódiffúzió-folyamatokkal foglalkozunk, melyekben m anyag vesz részt: $X_1, ..., X_m$, és amelyek a következő alakú egyenletekkel modellezhetők:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \mathrm{div}(d_i \mathrm{grad}\ u_i) = \sum_{\rho=1}^{r} (k_\rho u^{\alpha_\rho} - k'_\rho u^{\beta_\rho})(\beta_{\rho i} - \alpha_{\rho i}) \quad \Omega\text{-ban}, \quad i = 1, \ldots, m, \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial \nu} = 0 \quad \text{a} \quad \partial\Omega \text{ peremen}; \quad i = 1, \ldots, m. \tag{2}$$

Itt $u = (u_1, \ldots, u_m)$ a koncentrációkat tartalmazó vektor, és (1) jobb oldala a

$$\alpha_{\rho 1} X_1 + \cdots + \alpha_{\rho m} X_m \rightleftarrows \beta_{\rho 1} X_1 + \cdots + \beta_{\rho m} X_m, \quad \rho = 1, \ldots, r$$

reakciólépés tömeghatás-kinetikájú leírását adja. Az (1), (2) egyenletekben használt jelölés magyarázatát a következő fejezet tartalmazza.

Tömeghatás típusú reakciórendszereket vizsgált pl. Horn és Jackson [8], Horn [7], és Feinberg [1]. Az ő eredményeikből kiindulva néhány éve bizonyítottuk [6] (egy valamelyest általánosabb összefüggésben), hogy egy (1), (2) típusú rendszer trajektóriája exponenciálisan közelít egy térben homogén termodinamikai egyensúlyhoz, ha ez a trajektória globálisan korlátos. A globális korlátosság feltevése meglehetősen kellemetlen. Ebben a munkában el fogjuk kerülni ezt a feltételezést. Gyenge feltételek mellett be fogjuk bizonyítani, hogy a (megfelelően skálázott) szabadenergia nemcsak az (1), (2) rendszer Ljapunov-függvénye, de az is igaz rá, hogy exponenciálisan csökken, ahogy az idő tart a végtelenhez.

Fő eszközünk az aszimptotikus viselkedés vizsgálatában a Poincaré-egyenlőtlenséghez szorosan kapcsolódó egyenlőtlenségek egy osztálya. Ezek az egyenlőtlenségek azt mutatják, hogy reakciódiffúzió-rendszerek nagy osztályára a szabadenergia a megfelelő disszipációs sebességgel becsülhető.

A következő fejezetben bevezetjük a szükséges jelöléseket, emlékeztetünk egy eredményre az (1), (2) stacionárius megoldásaira vonatkozóan, amely fontos vizsgálataink szempontjából. A harmadik fejezetet a fő eredmények megfogalmazásának és bizonyításának szenteljük. Az utolsó fejezetben lehetséges általánosításokra hívjuk fel a figyelmet, és néhány egyszerű példát tárgyalunk.

2. Előzmények

Ebben a munkában Ω mindvégig korlátos, Lipschitz-tulajdonságú $\mathbb{R}^N$-beli tartományt jelöl. A reakciódiffúzió-rendszerünk adataira vonatkozóan, azaz a $d_1, \ldots, d_m$ diffúziós együtthatókra, a $k_1, \ldots, k_r, k'_1, \ldots, k'_r$ reakciósebességi együtthatókra és a sztöchiometriai együtthatók $\alpha_1, \ldots, \alpha_r, \beta_1, \ldots, \beta_r$ vektoraira feltesszük, hogy

$$\left.\begin{array}{l} d_i \in L^\infty(\Omega),\ d_i \geq c_0 > 0, \quad i = 1, \ldots, m, \\ k_\rho \in L^\infty(\Omega),\ k'_\rho \in L^\infty(\Omega),\ k_\rho \geq c_0 > 0,\ k'_\rho \geq c_0 > 0, \quad \rho = 1, \ldots, r, \\ \alpha_\rho \in \mathbb{Z}_+^m,\ \beta_\rho \in \mathbb{Z}_+^m, \quad \rho = 1, \ldots, r. \end{array}\right\} \tag{A1}$$

A szokásos módon $u \in \mathbb{R}^m$ és $\alpha \in \mathbb{Z}_+^m$ esetére legyen $u^\alpha := u_1^{\alpha_1} \cdot \cdots \cdot u_m^{\alpha_m}$. $\mathbb{R}_+^m$ elemeit Ω halmazon értelmezett konstans függvényeknek is fogjuk tekinteni, ez nem fog félreértésekhez vezetni. Továbbá legyen $\mathbb{P}^m := \operatorname{int} \mathbb{R}_+^m$.

A következő feltétel alapvető fontosságú eredményeink szempontjából.

$$E := \{e \in \mathbb{P}^m : k_\rho e^{\alpha_\rho} = k'_\rho e^{\beta_\rho},\ \rho = 1, \ldots, r\} \neq \emptyset. \tag{A2}$$

Ez azt jelenti, hogy létezik térben homogén szimultán egyensúlyi helyzet minden reakciópárra, amit úgy is mondhatunk, hogy a reakciódiffúzió-rendszer *részletesen kiegyensúlyozott* az e homogén koncentrációvektornál. Általában az E halmaz egynél több pontból áll (**vö.** 1. tétel lent). **E cikk hátralévő részére rögzítjük** az $e \in E$ vektort. Legyen továbbá

$$F(u) := \int_\Omega \sum_{i=1}^m \int_{e_i}^{u_i(x)} \log \frac{y}{e_i} \mathrm{d}y \mathrm{d}x, \quad \text{ahol } u \in L^2(\Omega; \mathbb{R}_+^m). \tag{3}$$

$L^2(\Omega; \mathbb{R}_+^m)$ elemeit a vizsgált rendszer *állapot*aiként fogjuk interpretálni, az $F(u)$ értéket pedig az u állapot *szabadenergiájának* fogjuk hívni. Később tárgyalni fogjuk F függését e megválasztásától (lásd a **3. megjegyzés**t lent).

Könnyen ellenőrizhető, hogy az F funkcionál szigorúan konvex az $L^2(\Omega; \mathbb{R}_+^m)$ halmazon. Továbbá $F(u) \geq 0$ és $F(u) = 0$ pontosan akkor, ha $u = e$. A

$\mu := F'(u)$ Gâteaux-deriváltat, ha létezik, az u állapotnak megfelelő *kémiai potenciálok* vektora. A (3) egyenletből következik, legalábbis formálisan, hogy $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_m) = \log\left(\frac{u}{e}\right)$. Itt és a későbbiekben is a következő jelölést fogjuk használni: Ha $v \in \mathbb{R}^m_+$, $w \in \mathbb{P}^m$, akkor $\frac{v}{w}$ és $\log w$ rendre a $\frac{v_i}{w_i}$ és $\log w_i$ koordinátákból álló vektort fogják jelenteni.

Most pontos jelentést fogunk adni az (1), (2) problémának.

Legyenek $V := H^1(\Omega;\mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega;\mathbb{R}^m)$, V_+ a szokásos pozitív kúp a V halmazban, valamint V^* a V halmaz duálisa. Definiáljuk az $A : V \longrightarrow V^*$ leképezést a következő módon:

$$\langle Au, v\rangle := \int_\Omega \sum_{i=1}^m \Bigg\{ d_i \mathrm{grad} u_i \cdot \mathrm{grad} v_i + \\ + \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho}\right](\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) v_i \Bigg\} \mathrm{d}x. \quad (4)$$

Ekkor az (1), (2) probléma a következőképpen írható fel tömören:

$$\frac{du}{dt} + Au = 0, \quad u \in L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+; H^1(\Omega;\mathbb{R}^m_+)) \cap L^\infty_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+; L^\infty(\Omega;\mathbb{R}^m)); \qquad \text{(I)}$$

itt $\frac{du}{dt}$ jelöli u idő szerinti deriváltját V^*-értékű disztribúcióértelemben. Az (I) egyenletben szereplő terek a szokásos módon értendők (lásd, például [9]). Az $u \in L^\infty_{loc}(\mathbb{R}_+; L^\infty(\Omega;\mathbb{R}^m))$ feltétel helyettesíthető egy gyengébbel, de ez nem fontos a mi céljaink szempontjából.

Legyen u megoldása (I) egyenletnek. Ekkor u az idő t függvénye és V-halmazban vesz fel értékeket. A termodinamikában szokásos elnevezéssel a disszipációs sebesség:

$$-\frac{d}{dt}F(u(t)) = -\left\langle \frac{du}{dt}(t), \mu(t)\right\rangle.$$

Ha kiküszöböljük $\frac{du}{dt}$-t az (I) egyenlet felhasználásával, a következőt kapjuk a disszipációs sebességre:

$$-\frac{d}{dt}F(u(t)) = \int_\Omega \sum_{i=1}^m \Bigg\{ d_i \mathrm{grad} u_i(t) \cdot \mathrm{grad} \log u_i(t) \\ + \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u(t)}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u(t)}{e}\right)^{\beta_\rho}\right](\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) \log \frac{u_i(t)}{e_i} \Bigg\} \mathrm{d}x = \\ = \int_\Omega \left\{ \sum_{i=1}^m 4 d_i |\mathrm{grad}\sqrt{u_i(t)}|^2 + \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u(t)}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u(t)}{e}\right)^{\beta_\rho}\right] \log\left(\frac{u(t)}{e}\right)^{\alpha_\rho - \beta_\rho} \right\} \mathrm{d}x.$$

Ezek után tetszőleges $u \in V_+$ függvényre, (tehát nem csak (I) megoldásaira) kézenfekvő így definiálni a *disszipációs sebességet*

$$D(u) := \int_\Omega \left\{ \sum_{i=1}^m 4d_i |\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2 + \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho} \right] \log \left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho - \beta_\rho} \right\} \mathrm{d}x. \tag{5}$$

(Ha $\sqrt{u_i} \notin H^1(\Omega)$ néhány $i \in 1, \dots, m$-re, vagy pontosan egy tűnik el $\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho}$ és $\left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho}$ közül, akkor $D(u)$ $+\infty$–ként interpretálható.) Meg akarjuk találni azon feltételeket, amelyek garantálják, hogy

$$F(u) \leq cD(u) \text{ valamely pozitív } c \text{ állandóra.} \tag{6}$$

Ha (6) (I) minden megoldására igaz lenne, akkor fennállna, hogy

$$\frac{d}{dt} F(u(t)) = -D(u(t)) \leq -\frac{1}{c} F(u(t)),$$

és $F(u(t))$ legalább úgy csökkenne, mint $\exp(-t/c)$.

1. megjegyzés. Legyen u megoldása (I)-nek. Ekkor, mint ahogy az könnyen ellenőrizhető,

$$\int_\Omega (u(t) - u(0)) dx \in S := \mathrm{span}\{\beta_1 - \alpha_1, \dots, \beta_r - \alpha_r\}. \tag{7}$$

Az S teret $\mathbb{R}^m$ *sztöchiometriai alterének* fogjuk nevezni.

A következő tétel némi információt ad (I) stacionárius megoldásairól, különösen az egyensúlyok E halmazáról, amelyet (A2)-ben vezettünk be.

1. tétel.

i) Ha $Au = 0$, és $u_i \geq 0$, $u_i \neq 0$, $i = 1, \dots, m$, akkor $u \in E$.

ii) $u \in E \Leftrightarrow \log\left(\frac{u}{e}\right) \in S^\perp$, $u \in \mathbb{P}^m$. (Szokás szerint $S^\perp$ jelöli S ortogonális kiegészítőjét $\mathbb{R}^m$-ben.)

iii) Minden $a \in \mathbb{P}^m$-re az $(a + S) \cap E$ halmaz egyetlen pontból áll.

2. megjegyzés. Egy az 1. tételt is tartalmazó eredményt már bizonyítottunk [6]-ben. Az olvasó kényelme kedvéért megismételjük a bizonyítást.

Bizonyítás. i) Legyen u olyan megoldása $Au = 0$ egyenletnek, amelyre $u_i \geq 0$, $u_i \neq 0$, $i = 1, \dots, m$. Legyen egyelőre minden u_i nagyobb, mint egy pozitív ε szám. Ekkor a $\log(u_i/e_i)$ tesztfüggvények segítségével, ahol $i = 1, \dots, m$, az $Au = 0$ egyenletből azt kapjuk (vesd össze a disszipációs sebesség fenti tárgyalásával), hogy

$$0=\int_\Omega \left\{ \sum_{i=1}^m 4d_i|\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2+\sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho}\left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho}-\left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho}\right]\log\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho-\beta_\rho}\right\}\mathrm{d}x. \tag{8}$$

A (8) eredmény akkor is igaz, ha nincs az u_i függvényhez tartozó pozitív alsó korlát. Ez megmutatható a $\log((u_i+\varepsilon)/e_i)$, $i=1,\dots,m$ tesztfüggvények segítségével, ahol $\varepsilon\to 0$. (8) egyenletből következik, hogy u komponensei konstans függvények. Az $u_i\geq 0, u_i\neq 0, i=1,\dots,m$ feltétel miatt az u komponenseinek pozitívaknak kell lenniük. A (8) összefüggés azt is magával vonja, hogy

$$\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho}=\left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho},\quad \rho=1,\dots,r. \tag{9}$$

Ezért u az E halmazban van.

ii) Nyilvánvalóan $u\in\mathbb{P}^m$ kielégíti a (9) egyenletet (és így E halmazbeli lesz) pontosan akkor, ha

$$(\alpha_\rho-\beta_\rho)\cdot\log\left(\frac{u}{e}\right)=0,\quad \rho=1,\dots,r, \tag{10}$$

azaz, pontosan akkor, ha $u\in\mathcal{S}^\perp$.

iii) Legyen $a\in\mathbb{P}^m$ és legyen $M:=(a+\mathcal{S})\bigcap\mathbb{R}_+^m$. Legyen

$$f(u):=\sum_{i=1}^m\int_{e_i}^{u_i}\log\left(\frac{y}{e_i}\right)\mathrm{d}y=\sum_{i=1}^m u_i\log\left(\frac{u_i}{e_i}\right)-u_i+e_i,\quad \text{ahol } u\in\mathbb{R}_+^m.$$

f tulajdonságaiból következik, hogy létezik egyetlen olyan $u\in M$, amelyben f felveszi a minimális értékét M felett. $t>0$ mellett

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f(u+t(a-u))=\sum_{i=1}^m\log\frac{u_i+t(a_i-u_i)}{e_i}(a_i-u_i).$$

Ez azt mutatja, hogy elegendően kicsi $t>0$ mellett $f(u+t(a-u))$ szigorúan kisebb lenne, mint $f(u)$, ha u egy vagy több komponense eltűnne. u megválasztása miatt ez nem lehetséges. Ezentúl minden u_i szigorúan pozitív, és

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f(u+t(\beta_\rho-\alpha_\rho))\mid_{t=0}=\sum_{i=1}^m(\beta_{\rho i}-\alpha_{\rho i})\log\left(\frac{u_i}{e_i}\right),\quad \rho=1,\dots,r.$$

Következésképpen (vö. ii)-vel), $u\in(a+\mathcal{S})\bigcap E$. Megfordítva, legyen $u\in(a+\mathcal{S})\bigcap E$. Ekkor ii) miatt f minden $\mathcal{S}$-beli irányban vett deriváltja eltűnik. Ezentúl u az az egyértelműen meghatározott pont $a+\mathcal{S}$-ben, ahol f felveszi a minimális értékét.

3. megjegyzés. Legyen $\overline{e}$ az (A2) egyenletben bevezetett E halmaz bármely pontja, és legyen $\overline{F}$ az F függvényhez hasonlóan definiálva

$$\overline{F}(u) := \int_\Omega \sum_{i=1}^m \int_{\overline{e}_i}^{u_i} \log\left(\frac{y}{\overline{e}_i}\right) \mathrm{d}y\mathrm{d}x.$$

Ekkor

$$\overline{F}(u) - F(u) := \int_\Omega \sum_{i=1}^m \left(u_i \log\left(\frac{e_i}{\overline{e}_i}\right) - e_i + \overline{e}_i\right) \mathrm{d}x. \tag{11}$$

(10) alapján

$$(\beta_\rho - \alpha_\rho) \log \frac{e}{\overline{e}} = 0, \quad \rho = i, \ldots, r. \tag{12}$$

A (11) és a (12) egyenletből következik, hogy $\overline{F} - F$ konstans az alábbi osztályok mindegyikén

$$\left\{u \in L^2(\Omega; \mathbb{R}_+^m) : \int_\Omega u\mathrm{d}x \in a + \mathcal{S}\right\}, \quad a \in \mathbb{R}_+^m.$$

4. megjegyzés. (12) segítségével könnyen megmutatható, hogy az (5) egyenletben definiált $D(u)$ disszipációs sebesség független az e egyensúlyi állapot megválasztásától.

3. Fő eredmények

Fő eredményeink levezetéséhez szükségünk lesz még a következő feltételre:

$$a \in \partial\mathbb{R}_+^m \cap (e + \mathcal{S}) \Longrightarrow \left(\frac{a}{e}\right)^{\alpha_\rho} \neq \left(\frac{a}{e}\right)^{\beta_\rho} \quad \text{valamelyik} \quad \rho \in \{1, \ldots, r\} \text{ esetén.} \tag{A3}$$

Az első tétel alapján tudjuk, hogy a $\mathbb{P}^m \cap (e+\mathcal{S})$ halmazban az egyetlen egyensúlyi helyzet e. Az (A3) feltétel szerint nincs olyan egyensúlyi helyzet $\mathbb{R}_+^m \cap (e+\mathcal{S})$ halmazban, amely $\mathbb{R}_+^m$ határán van. Az (A3) feltételt kielégítő rendszerekre az utolsó fejezetben adunk példákat. Ott megmutatjuk majd azt is, hogy az (A3) feltétel szükséges ahhoz, hogy fő eredményeink érvényesek legyenek.

Végül tegyük fel, hogy

$$p := \max\{|\alpha_1|, \ldots, |\alpha_r|, |\beta_1|, \ldots, |\beta_r|\} \leq \frac{N}{N-2} \text{ ha } N = \dim\Omega > 2. \tag{A4}$$

(Mint általában, $|\alpha| := \alpha_1 + \cdots + \alpha_m$ minden $\alpha \in \mathbb{Z}_+^m$ multiindexre). A p szám a rendszerben végbemenő reakciók maximális rendje. Az (A4) feltétel miatt u^{α_ρ} és u^{β_ρ} folytonosan függ $L^2(\Omega)$-ban $u_i \in H^1(\Omega)$ függvénytől, minden $i = 1, \ldots, m$ esetén.

Most készen állunk a dolgozat fő eredményének kimondására.

2. tétel. Tegyük fel, hogy az (A1) – (A4) feltételek teljesülnek. Ekkor minden $R > 0$ esetén létezik olyan $c_R > 0$, hogy ha $u \in V_+$ és $F(u) \leq R$, akkor

$$F(u) \leq c_R \left(D(u) + \left| Q \int_\Omega (u - e) \mathrm{d}x \right|^2 \right). \tag{13}$$

Itt Q az $\mathbb{R}^m$ térnek az $\mathcal{S}$ sztöchiometriai altér merőleges kiegészítőjére vett vetületét jelöli.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy a tétel nem igaz. Ekkor létezik olyan $R > 0$ szám, és olyan (c_n) $\mathbb{R}$–beli és (u_n) V_+–beli sorozat, amelyekre $c_n \longrightarrow +\infty$ és

$$R \geq F(u) = c_n \left(D(u_n) + \left| Q \int_\Omega (u - e) dx \right|^2 \right) > 0. \tag{14}$$

D definícióját tekintve (lásd (5)) ez azt jelenti, hogy

$$\lim_{n \to +\infty} \int_\Omega |\mathrm{grad} \sqrt{u_{ni}}|^2 \, dx = 0, \quad i = 1, \ldots, m. \tag{15}$$

Az $F(u_n) \leq R$-ből következik, hogy az (u_n) sorozat korlátos $L^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$-ben. Ezért – ha szükséges, egy részsorozatot véve – feltehetjük, hogy $(\sqrt{u_{ni}})$ konvergens a $H^1(\Omega)$ halmazban, tart egy konstans függvényhez, amit $\sqrt{a_i}$-vel jelölünk. Ekkor (14) szerint

$$Q \int_\Omega (a - e) \mathrm{d}x = \lim_{n \longrightarrow +\infty} Q \int_\Omega (u_n - e) \mathrm{d}x = 0.$$

Így $a \in e + \mathcal{S}$. Feltehetjük azt is, hogy $u_{ni}(x) \longrightarrow a_i$ majdnem minden $x \in \Omega$ mellett. Ezért (14) egyenletből a Fatou-lemma értelmében az következik, hogy

$$\int_\Omega \sum_{\rho=1}^{r} k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{a}{e} \right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{a}{e} \right)^{\beta_\rho} \right] \log \left(\frac{a}{e} \right)^{\alpha_\rho - \beta_\rho} \mathrm{d}x = 0.$$

Következésképpen,

$$\left(\frac{a}{e} \right)^{\alpha_\rho} = \left(\frac{a}{e} \right)^{\beta_\rho}, \quad \rho = 1, \ldots, r.$$

Az (A3) feltételt tekintve ez csak akkor lehetséges, ha $a \in \mathbb{P}^m$, és az 1. tétel miatt $a = e$. Így $\sqrt{u_{ni}} \to \sqrt{e_i}$ a $H^1(\Omega)$ halmazban, $i = 1, \ldots, m$. Ez alapján $u_n \to e$ az $L^q(\Omega; \mathbb{R}^m)$ halmazban, valamely $q > 1$ és $F(u_n) \to F(e) = 0$ mellett.

2. Legyen $\lambda_n := \sqrt{F(u_n)}$, és legyen v_n definiálva a következőképpen $\sqrt{u_{ni}} = \sqrt{e_i}(1 + \lambda_n v_{ni}), \quad i = 1, \ldots, m$. (Vegyük észre, hogy (14) miatt $\lambda_n > 0$.) Ekkor $\lambda_n v_n \longrightarrow 0$ a $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ térben. A

$$(\xi - \eta) \log \frac{\xi}{\eta} \geq 4 |\sqrt{\xi} - \sqrt{\eta}|^2, \text{ ha } \xi, \eta > 0$$

elemi egyenlőtlenség alapján a (14) egyenletből következik, hogy

$$
\begin{aligned}
1 \geq c_n \int_\Omega \Bigg\{ \sum_{i=1}^m 4 d_i e_i |\mathrm{grad} v_{ni}|^2 + \\
+ \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \frac{4}{\lambda_n^2} \left(\prod_{i=1}^m (1+\lambda_n v_{ni})^{\alpha_{\rho i}} - \prod_{i=1}^m (1+\lambda_n v_{ni})^{\beta_{\rho i}} \right)^2 \Bigg\} \mathrm{d}x + \\
+ c_n \left| Q \int_\Omega \sum_{i=1}^m e_i (\lambda_n v_{ni}^2 + 2 v_{ni}) \mathrm{d}x \right|^2 .
\end{aligned} \tag{16}
$$

λ_n és v_n definíciója alapján (lásd (3)).

$$
\lambda_n^2 = \int_\Omega \sum_{i=1}^m e_i (2(1+\lambda_n v_{ni})^2 \log(1+\lambda_n v_{ni}) - \lambda_n^2 v_{ni}^2 - 2\lambda_n v_{ni}) \mathrm{d}x. \tag{17}
$$

Minden $\varepsilon \in [0,1]$-hoz létezik olyan $c > 0$, amelyre $\xi > -1$ mellett,

$$
2(1+\xi)^2 \log(1+\xi) - \xi^2 - 2\xi = (2 + 4\xi + 2\xi^2) \log(1+\xi) - \xi^2 - 2\xi
$$

$$
\leq \begin{cases} 3\xi^2 + 2\xi^3 \leq (3+2c)\xi^2, & \text{ha} \quad \xi \leq c \\ 3\xi^2 + 2\xi^{2+\varepsilon}, & \text{ha} \quad \xi > c \end{cases} .
$$

Ezért, a (17) egyenletből, valamilyen pozitív c konstansra

$$
1 \leq c \int_\Omega \sum_{i=1}^m (v_{ni}^2 + \lambda_n^\varepsilon |v_{ni}|^{2+\varepsilon}) \mathrm{d}x.
$$

Mivel $\mathrm{grad} v_{ni} \to 0$ az $L^2(\Omega; \mathbb{R}^N)$ halmazban (vö. (16) egyenlettel), ez pontosan akkor lehetséges, ha

$$
\inf_{n \in \mathbb{N}} \|v_n\|^2_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)} > 0. \tag{18}
$$

Az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy

$$
b := \lim_{n \to +\infty} \frac{v_n}{\|v_n\|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)}}
$$

létezik a $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ térben. Nyilvánvalóan, b nem tűnik el és állandó az Ω halmazon. Meg fogjuk mutatni, hogy ez ellentmondáshoz vezet. (16) második sorában levő tag a következőképpen írható:

$$
4 \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\sum_{i=1}^m (\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) v_{ni} \right)^2 + w_{n\rho} \right],
$$

ahol w_{ni} a $\lambda_n^{|\gamma|-2} v_n^\gamma$, $\gamma \in \mathbb{Z}_+^m$, $2p \geq |\gamma| > 2$ alakú tagok egy véges összege (lásd (A4)). Megjegyezzük, hogy

$$\|v_n\|_{H^1(\Omega;\mathbb{R}^m)}^{-2} \int_\Omega \lambda_n^{|\gamma|-2} v_n^\gamma \leq c \|\lambda_n v_n\|_{L^{|\gamma|}(\Omega;\mathbb{R}^m)}^{|\gamma|-2} \longrightarrow 0.$$

Ezért a (16) egyenletet $4c_n \|v_n\|_{H^1(\Omega;\mathbb{R}^m)}^2$-vel osztva $n \to +\infty$ esetén azt kapjuk, hogy

$$0 \geq \int_\Omega \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left(\sum_{i=1}^m (\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) b_i \right)^2 \mathrm{d}x.$$

Innen

$$\sum_{i=1}^m (\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) b_i = 0, \quad \rho = 1, \ldots, r,$$

azaz $b \in \mathcal{S}^\perp$. Legyen z_n az a vektor, amelynek komponensei

$$z_{ni} = \frac{1}{\|v_n\|_{H^1(\Omega;\mathbb{R}^m)}} \int_\Omega e_i (\lambda_n v_{ni}^2 + 2 v_{ni}) \mathrm{d}x.$$

(16) alapján $Q z_n \to 0$, ha $n \longrightarrow +\infty$ (lásd (18)). Ezért a $z := \lim\limits_{n \to +\infty} z_n$ határérték (amely létezik) $\mathcal{S}$–ben van. A komponensei $z_i = 2 e_i b_i |\Omega|$, $i = 1, \ldots, m$. (Most és később is $|\Omega|$ jelöli az Ω mértékét.) Mivel $b \in \mathcal{S}^\perp$, ezért

$$0 = \sum_{i=1}^m b_i z_i = |\Omega| \sum_{i=1}^m e_i b_i^2,$$

ellentmondásban áll $b \neq 0$-val. Ez az ellentmondás teljessé teszi a 2. tétel bizonyítását.

5. megjegyzés. Az előző bizonyítás vizsgálata megmutatja, hogy 2. tétel állítása kicsit javítható. A (13) egyenlőtlenség igaz marad, ha a $D(u)$ disszipációs sebességet kicseréljük az alábbi, általában kisebb taggal:

$$\int_\Omega \left\{ \sum_{i=1}^m 4 d_i |\mathrm{grad} \sqrt{u_i}|^2 + \sum_{\rho=1}^r 4 k_\rho e^{\alpha_\rho} \left| \left(\frac{u}{e} \right)^{\alpha_\rho/2} - \left(\frac{u}{e} \right)^{\beta_\rho/2} \right|^2 \right\} \mathrm{d}x.$$

Hogy ezt belássuk, a (16) egyenlőtlenség levezetését kell megvizsgálni.

1. következmény. Tegyük fel, hogy a 2. tétel feltétele teljesül, és legyen u az (I) feladat megoldása. Továbbá legyen e az E halmaznak az az eleme, amely a $\frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega u(0) \mathrm{d}x + \mathcal{S}$ halmazban fekszik (lásd 1. tétel, (iii)). Ekkor valamely $\lambda > 0$ mellett,

$$\forall t \neq 0 : \quad F(u(t)) \leq F(u(0)) \exp(-\lambda t).$$

Bizonyítás. $t > 0$ mellett és minden $\varepsilon > 0$ számra

$$F(u(t)+\varepsilon) - F(u(0)+\varepsilon) = \int_0^t \left\langle \frac{du}{dt}(s), \log\frac{u(s)+\varepsilon}{e} \right\rangle \mathrm{d}s.$$

A $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}$ deriváltra vonatkozó egyenletet használva, és $\varepsilon \to 0$ mellett

$$F(u(t)) + \int_0^t D(u(s))\mathrm{d}s \leq F(u(0)).$$

Hasonlóan minden $\lambda > 0$ mellett,

$$\exp(\lambda t)F(u(t)) + \int_0^t \exp(\lambda s)\left[-\lambda F(u(s)) + D(u(s))\right]\mathrm{d}s \leq F(u(0)).$$

Mivel $F(u(t)) \leq F(u(0))$ ezen a ponton használhatjuk a 2. tételt. Vegyük észre, hogy

$$Q\int_\Omega (u(s)-e)\mathrm{d}x = 0,$$

mert

$$\int_\Omega (u(s)-e)\mathrm{d}x = \int_\Omega (u(s)-u(0)+u(0)-e)\mathrm{d}x \in \mathcal{S}$$

(vö. 1. megjegyzést és az e vektorra kimondott feltételt a következményben). Innen a 2. tétel mutatja, hogy $\lambda F(u(t)) \leq F(u(0))$ és ezért

$$\exp(\lambda t)F(u(t)) \leq F(u(0))$$

minden elegendően kicsi $\lambda > 0$ mellett.

6. megjegyzés. Legyen

$$d(u,v) := F(u)+F(v)-2F\left(\frac{u+v}{2}\right) \quad \text{tetszőleges } u,v \in L^2(\Omega;\mathbb{R}^m) \text{ függvényekre.}$$

Mivel F szigorúan konvex, ezért $d(u,v) \neq 0$, és $d(u,v) = 0$ pontosan akkor, ha $u = v$. (11) következményeként a d függvény független az e egyensúlyi állapot megválasztásától. Könnyű belátni, hogy valamely pozitív c_s és C_s konstansra

$$c_s\|u-v\|^2_{L^2(\Omega;\mathbb{R}^m)} \leq d(u,v) \leq C_s\|u-v\|^2_{L^2(\Omega;\mathbb{R}^m)}$$

feltéve, hogy

$$0 < \delta \leq u \leq 1/\delta, \quad \delta \leq v \leq 1/\delta.$$

$d(u,v)$ tehát hasonlóan viselkedik, mint u és v távolságának a négyzete. Ilyen típusú függvényeket használt [4] és [2],[3] egyértelműségi és regularitási eredmények bizonyításában.

Az $F(e) = 0$ és $F \neq 0$ összefüggéseket tekintve $d(u,e) = F(u) + F(e) - 2F(\frac{u+e}{2}) \leq F(u)$. Innen, a következmény feltételei mellett

$$d(u(t),e) \leq F(u(t)) \leq F(u(0)) \exp(-\lambda t) \text{ valamely } \lambda > 0 \text{ mellett.}$$

4. Általánosítások és példák

A következő megjegyzésekben jelezni akarjuk, hogy a 2. tétel eredménye különböző irányokba általánosítható.

7. megjegyzés. A 2. tétel és annak következménye igaz marad akkor is, ha a reakció állandóira vonatkozó feltételeket a következő gyengébb feltétellel helyettesítjük

$$k_\rho \geq 0,\, k'_\rho \geq 0, \quad \int_\Omega k_\rho \mathrm{d}x > 0,\, \int_\Omega k'_\rho \mathrm{d}x > 0, \quad \rho = 1, \ldots, r.$$

A bizonyítás alapvetően ugyanaz. Ezáltal olyan rendszereket tudunk kezelni, amelyeknél kémiai reakciók az Ω tartomány csak egy részében mennek végbe.

8. megjegyzés. Az A operátor (4) definíciója a következőképpen általánosítható:

$$\langle Au, v\rangle :=$$

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^m \left\{ d_i \mathrm{grad} u_i \cdot \mathrm{grad} v_i + \sum_{\rho=1}^r k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho} \right] (\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) v_i \right\} \mathrm{d}x +$$
$$+ \int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^m \sum_{\rho=r+1}^s k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho} \right] (\alpha_{\rho i} - \beta_{\rho i}) v_i \mathrm{d}\sigma.$$

Ez azt jelenti, hogy az (1) egyenletek változatlanok maradnak, míg a (2) peremfeltételeket kicseréljük a

$$d_i \frac{\partial u_i}{\partial \nu} = \sum_{\rho=r+1}^s k_\rho e^{\alpha_\rho} \left[\left(\frac{u}{e}\right)^{\alpha_\rho} - \left(\frac{u}{e}\right)^{\beta_\rho} \right] (\beta_{\rho i} - \alpha_{\rho i}) \text{ a } \partial\Omega \text{ halmazon}, \quad i = 1, \ldots, m$$

feltételekre. Ezek a peremfeltételek csak az Ω tartomány $\partial\Omega$ peremén lejátszódó reakciókat modellezik. Ha ezen többletreakciók rendje nem haladja meg az $\frac{N-1}{N-2}$ számot, ahol $N > 2$, akkor a 2. tétel ismét igaz. A bizonyítás szükséges módosítása kézenfekvő. Ugyanezen a módon kezelhetők azok a reakciók, amelyek a perem egy részén vagy az Ω tartomány részeinek találkozási felületein játszódnak le.

9. megjegyzés. Jó lenne a fent bizonyított fő egyenlőtlenséget általánosítani a következő esetekre:

(i) A mögöttes reakciórendszer nem reverzíbilis, hanem csak gyengén reverzíbilis (a fogalom definícióját lásd [1] vagy [6]).

(ii) Az anyagfajták elektromosan töltöttek lehetnek.

(iii) A kémiai potenciálok és koncentrációk közötti kapcsolatot $\mu_i = \log(g_i(u)u_i)$, $i = 1, \ldots, m$ alakú összefüggés adja meg, ahol a $g_i(u)$ az X_i anyag úgynevezett aktivitási együtthatója, amely az összes koncentrációból álló vektor ismert függvénye.

Ezekben az esetekben $F(u)$ és $D(u)$ definícióját megfelelően módosítani kell.

1. példa. Reagáljon két anyag a következő módon:

$$X_1 + X_2 \rightleftarrows 0.$$

Ez azt jelenti, hogy az X_1 és az X_2 reakciója valami olyan termel, ami olyan mennyiségben áll rendelkezésre, hogy nem kell figyelembe venni a kinetikai egyenletekben. A megfelelő reakció tag a $ku_1u_2 - k' = k(u_1u_2 - K)$. Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy k, k' – és így K – pozitív állandók. Ekkor

$$E = \{e \in \mathbb{P}^2 : e_1e_2 = K\}.$$

Az (A1), (A2), (A3), (A4) feltételek teljesülnek, ha $N \leq 4$. Könnyű látni, hogy $\mathcal{S}^{\perp} = \operatorname{span}\{(1, -1)\}$ és

$$Q(v_1, v_2) = \frac{1}{2}(v_1 - v_2, v_2 - v_1).$$

A 2. tétel kimondja, hogy

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^{2} \int_{e_i}^{u_i} \log \frac{y}{e_i} \mathrm{d}y\mathrm{d}x \leq c_R \Bigg\{ \int_\Omega \Bigg(\sum_{i=1}^{2} |\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2 + \\ +(u_1u_2 - K) \log \frac{u_1u_2}{K} \Bigg) \mathrm{d}x + \left| \int_\Omega (u_1 - e_1 - u_2 + e_2)\mathrm{d}x \right|^2 \Bigg\}$$

feltéve, hogy a baloldal kisebb vagy egyenlő, mint R. Így minden $e > 0$ mellett

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^{2} \int_e^{u_i} \log \frac{y}{e} \mathrm{d}y \mathrm{d}x \le c_R \left\{ \int_\Omega \left(\sum_{i=1}^{2} |\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2 + \right.\right.$$

$$\left.\left. +(u_1u_2 - e^2) \log \frac{u_1 u_2}{e^2} \right) \mathrm{d}x + \left| \int_\Omega (u_1 - u_2) \mathrm{d}x \right|^2 \right\}$$

feltéve, hogy a baloldal kisebb vagy egyenlő, mint R.

2. példa. Tegyük fel, hogy az $X_i \rightleftarrows 0$, $i = 1, \ldots, m$ reakciók a $\partial\Omega$ peremen játszódnak le. Ez a

$$d_i \frac{\partial u_i}{\partial \nu} = k_i(e_i - u_i),\ i = 1, \ldots, m, \quad \partial\Omega \text{ halmazon.}$$

peremfeltételeknek felel meg. A sztöchiometriai együtthatók vektorai

$$\alpha_{ji} = \delta_{ji},\ \beta_j = 0,\ j = 1, \ldots, m.$$

Következésképpen $\mathcal{S} = \mathbb{R}^m$ és $Q = 0$. Így az (A1) – (A4) feltételek teljesülnek. A 2. tételből azt kapjuk, hogy

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^{m} \int_{e_i}^{u_i} \log \frac{y}{e_i} \mathrm{d}y \mathrm{d}x \le c_R \sum_{i=1}^{m} \left\{ \int_\Omega |\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2 \mathrm{d}x + \int_{\partial\Omega} (u_i - e_i) \log \frac{u_i}{e_i} \mathrm{d}\sigma \right\}$$

feltéve, hogy a baloldal kisebb vagy egyenlő, mint R.

3. példa. Tegyük fel, hogy csak egy anyagunk van, X és hogy az $X \rightleftarrows 2X$ reakció játszódik le az Ω halmazban. Legyen a megfelelő reakciótag $u - u^2$. Ekkor $E = \{1\}$ és $\mathcal{S} = \mathbb{R}$. Ebben a példában az (A3) feltétel nem teljesül: 0 egy egyensúlyi megoldás. Az

$$\int_\Omega \int_1^u \log y \mathrm{d}y \mathrm{d}x \le c_R \int_\Omega (|\mathrm{grad}\sqrt{u}|^2 + (u^2 - u) \log u) \mathrm{d}x$$

egyenlőtlenség nem teljesül az u függvényre 0 közelében semelyik c_R állandó mellett sem.

Ez a példa tipikus: Ha (A3) nem teljesül, akkor létezik olyan (térben homogén) u állapot, amelyre $D(u) = 0$ és $u \in e + \mathcal{S}$, míg $F(u) > 0$.

4. példa. Legyenek az $X_1 + X_2 \rightleftarrows 2X_3$ reakciók az Ω halmazon, és legyen a reakció tag $u_1u_2 - u_3^2$. Ekkor $E = \{e \in \mathbb{P}^3 : e_1e_2 = e_3^2\}$, $\alpha = (1, 1, 0)$, $\beta = (0, 0, 2)$, és $\mathcal{S} = \mathrm{span}\{(1, 1, -2)\}$. Legyen $e = (1, 1, 1)$. Az (A1), (A2), (A3), (A4) feltételek teljesülnek, ha $N \le 4$. A 2. tétel szerint

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^3 \int_1^{u_i} \log y \mathrm{d}y \mathrm{d}x \le c_R \left\{ \int_\Omega \left(\sum_{i=1}^3 |\mathrm{grad}\sqrt{u_i}|^2 + (u_1u_2 - u_3^2)\log\frac{u_1u_2}{u_3^2} \right) \mathrm{d}x + \right.$$
$$\left. + \left| \int_\Omega (u_1 - u_2)\mathrm{d}x \right|^2 + \left| \int_\Omega (u_1 + u_2 + u_3 - 3)\mathrm{d}x \right|^2 \right\}$$

feltéve, hogy a baloldal kisebb vagy egyenlő, mint R.

10. megjegyzés. Egyszerű példák mutatják, hogy általában a 2. tételben szereplő c_R állandó nem választható meg R számtól függetlenül, azaz nem bizonyítható, hogy

$$F(u) \le c\left(D(u) + \left| Q \int_\Omega (u - e)\mathrm{d}x \right|^2 \right) \quad \text{minden } u \in V_+ \text{ függvényre.}$$

11. megjegyzés. A bevezetőben hangsúlyoztuk azt a tényt, hogy eredményeinkben a reakciódiffúzió-rendszerek aszimptotikus viselkedését illetően a koncentrációkra vonatkozó globális korlátra nincs szükség. Érdemesnek tűnik megemlíteni, hogy egy speciális reakciódiffúzió-rendszerre Glitzky, Gröger, és Hünlich [5] bizonyítani tudta a koncentrációkra vonatkozó globális korlát létezését jelen cikk fő eredményének használatával.

Köszönetnyilvánítás. A szerző hálás R. Hünlichnek a hasznos megbeszélésekért.

Hivatkozások

[1] M. Feinberg: Complex balancing in a general kinetic system. Arch. Ratl. Mech. Anal. **49** (1972) 187–194

[2] H. Gajewski: On a variant of monotonicity and its application to differential equations, Nonlinear Analysis: Theory, Methods and Applications /22(1)(1994) 73–80/

[3] H. Gajewski: On uniqueness of solutions to the drift–diffusion model of semiconductor devices, Institute für Angewandte Analysis und Stochastik Preprint Nr. 2, 1992

[4] H. Gajewski, K. Gröger: Semiconductor Equations for variable Mobilities Based on Boltzmann Statistics or Fermi–Dirac Statistics, Math. Nachr. **140** (1989) 7–36

[5] A. Glitzky, K. Gröger, and R. Hünlich: Existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions to equations modelling transport of dopants in semiconductors, WIAS Preprints 29 (1992)

[6] K. Gröger: Asymptotic Behaviour of Solutions to a Class of Diffusion–Reaction Equations, Math. Nachr. **112** (1983) 19–33

[7] F. Horn: Necessary and sufficient conditions for complex balancing in chemical kinetics, Arch. Rat. Mech. Anal. **49** (1972) 172–186

[8] F. Horn, R. Jackson: General mass action kinetics, Arch. Rat. Mech. Anal. **47** (1972) 81–116

[9] E. Zeidler: Nonlinear Functional Analysis and its Applications II/A, Springer–Verlag New York Berlin Heidelberg 1990

Konrad Gröger, Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Mohrenstrasse 39, 10117 Berlin Germany groeger@wias-berlin.de
Fordította: Ladics Tamás, BME Analízis Tanszék, Egry J. u. 1., 1111 Budapest tladics@math.bme.hu