Monoton kémiai reakcióhálózatok

Patrick De Leenheer[*], David Angeli[†] és Eduardo D. Sontag[‡]

2007. május 24.

Kivonat

Elemzünk néhány kémiai rekcióhálózatot, és megmutatjuk, hogy minden megoldás konvergál valamely egyensúlyi helyzethez. A kinetikáról feltételezhető, hogy monoton, de egyébként tetszőleges. Ha a diffúzió hatását figyelembe vesszük, a következtetések változatlanok maradnak. Vizsgálatunk legfontosabb eszközei a monoton dinamikai rendszerek elméletéből származnak. Ennek az elméletnek néhány jellegzetességét fogjuk áttekinteni, és egy olyan speciális vonzással kapcsolatos eredmény önálló bizonyítását adjuk, amit a fő eredményünk bizonyításához is használunk.

1. Bevezetés

A kémiai reakciók dinamikai viselkedésének elméleti tanulmányozásában a kutatás egy eredményes és nagyon hatékony időszaka az utolsó néhány évtized. Ennek a folytonos figyelemnek egy sajátos oka lehet az, hogy jelenleg nem áll rendelkezésre olyan egységes elmélet, amely tetszőleges topológiájú reakcióhálózatokra és tetszőleges kinetikára vonatkozna. De ha vagy a topológiában, vagy a kinetikában megszorításokat teszünk, akkor meglehetősen általános eredményeket lehet kapni. Például, az a jelentős munka, ami ma Feinberg–Horn–Jackson-elméletnek ismert, [11,19] – és [7,29] a legújabb eredmény, – a reakció sebességet korlátozza a kinetikai tömeghatásra, de egészen általános topológiát is figyelembe vesz. A tömeghatás típusú kinetika feltételezése lehetővé teszi Ljapunov-függvény konstruálását, ami által levonhatjuk azt a

[*]corresponding author: Department of Mathematics, University of Florida, 411 Little Hall, PO Box 118105, Gainesville, FL 32611=8105, USA, E-mail: deleenhe@math.ufl.edu

[†]Dip. di Sistemi e Informatica Università di Firenze, Via di S. Marta 3, 50139 Firenze, Italy

[‡]Department of Mathematics, Rutgers University, New Brunswick, NJ 08903, USA

következtetést, hogy a megoldások konvergálnak. Másrészről korlátozható a hálózat topológiája, de feloldható a tömeghatás típusú kinetika feltételezése. Egy ilyen enyhítés feltételezi, hogy ezek monoton függvények (a reakció reagenseinek koncentrációjában). Például, [21]-ben a következő hálózatot tanulmányozták:

$$A_1 + A_2 \rightleftharpoons B_1 \rightleftharpoons B_2 \rightleftharpoons ...B_n$$

amiben csak az első reakciólépés bimolekuláris, és a többi monomolekuláris. Abban a cikkben megmutatták, hogy ennek a hálózatnak a megoldásai egy bizonyos monotonitási tulajdonsággal rendelkeznek, olyan értelemben, amit később megmagyarázunk. Ezzel rokon ötletet találunk [30]-ban, ahol elmagyarázzák, hogy bizonyos reakcióhálózatokat hogyan kell transzformálni úgynevezett kooperatív rendszerekké (ezeket is tárgyaljuk később).

Ebben a cikkben célunk, hogy megmutassuk, hogy hogyan lehet globális konvergenciára vonatkozó eredményeket kapni egy speciális topológiájú hálózatra – amely tartalmazza és általánosítja a fenti hálózatot, arra az esetre, amikor a kinetika monoton, de egyébként tetszőleges. Továbbá, az eredményeink érvényesek maradnak, ha figyelembe vesszük a diffúzió hatásait is, ily módon [23] eredményeit általánosítjuk, amik a $A_1+A_2 \rightleftharpoons B$ megfordítható reakcióra vonatkoznak.

Hogy tisztán lássuk, a monotonitás miért játszhat szerepet a kémiai reakciókkal kapcsolatban, át fogjuk tekinteni a monoton rendszerek fogalmát és kiemelünk néhányat ezek tulajdonságaiból. Két évtizeddel ezelőtt M. W. Hirsch kezdte el kiépíteni a monoton rendszerek elméletét a [12, 13, 14, 15, 16] cikksorozatban; de lásd még H. L. Smith kiváló összefoglalóját [27] is. Általánosságban a monoton dinamikai rendszer egy Φ folytonos félfolyam az X metrikus téren, amely úgy van ellátva egy $\preceq$ kompatíbilis parciális rendezéssel, hogy a folyam megőrzi a parciális rendezést:

$$\forall x, y \in X; x \preceq y \Rightarrow \Phi_t(x) \preceq \Phi_t(y), \forall t \in \mathbb{R}_+. \tag{1}$$

Tekintsük a következő differenciálegyenlet-rendszert:

$$\dot{x}(t) = f(x(t)) \quad (x(t) \in \mathbb{R}^n),$$

ahol $f \in \mathcal{C}^1$ olyan vektormező, amelyikről feltételezzük, hogy előre nézve teljes. Azaz a teljes megoldás értelmezési tartományának szuprémuma $+\infty$. (Habár az alábbiak akár az állapottérre, akár a vektormező simaságára vonatkozó sokkal gyengébb kikötések mellett is érvényesek.)

Azonnal felmerül a kérdés, hogy ez mikor generál monoton dinamikai rendszert, valamilyen nem triviális rendezésre nézve. Erre a kérdésre nehéz megtalálni a választ. Habár amikor adott egy parciális rendezés, és azt kérdezzük, hogy a rendszer monoton-e valamely $K \subset \mathbb{R}^n$ kúp által generált parciális rendezésre nézve, ilyen esetekben van módszer a monotonitás ellenőrzésére. (Azt mondjuk, hogy $K \subset \mathbb{R}^n$ kúp, ha K olyan nem üres, zárt halmaz, amelyre $K + K \subset K$, $\mathbb{R}_+ K \subset K$ és $K \bigcap (-K) = \{0\}$ teljesül.) A következőkben áttekintünk néhány ilyen tesztet.

A legismertebb példa valószínűleg az, amikor f *kooperatív*, ami azt jelenti, hogy az f' Jacobi-mátrix főátlóján kívüli elemek nemnegatívak. Jól ismert, hogy ebben az esetben az $\dot{x}(t) = f(x(t))$ rendszer által generált folyam monoton, mivel megőrzi a szokásos komponensenkénti rendezést $\mathbb{R}^n$-ben, lásd például a 3.1.1. tételt és a 3.1.1. megjegyzést [27]-ben. Precízebben: ezt a rendezést az $\mathbb{R}^n_+$ ortáns kúp generálja $\mathbb{R}^n$-ben:

$$x \preceq y \Leftrightarrow y - x \in \mathbb{R}^n_+.$$

Ez általánosítható azokra az esetekre, amikor a parciális rendezést $\mathbb{R}^n$ bármelyik $\mathcal{O}$ ortáns kúpja generálja. Ilyenkor a rendezést a következőképpen definiáljuk:

$$x \preceq_{\mathcal{O}} y \Leftrightarrow y - x \in \mathcal{O}. \tag{2}$$

A monotonitás ellenőrzésére ebben az esetben egy egyszerű grafikai ellenőrzés áll rendelkezésre, lásd [27, 49. oldal]. Ez annak ellenőrzését jelenti, hogy a rendszer incidenciagráfja nem tartalmaz-e negatív paritású hurkot. (A rendszer incidenciagráfja n pontból áll, mindegyik az állapotvektor egy komponensét reprezentálja, és előjeles élek kötik össze a pontokat: a j-edik csomópontból az i-edikbe mutató élhez a $\partial_j f_i$ parciális derivált függvény előjelét rendeljük hozzá. Ez természetesen megköveteli, hogy a derivált ne változtasson előjelet, és legalább egy pontban különbözzék nullától. Egy hurok paritása egyszerűen a hurkot alkotó éleken lévő előjelek szorzata; ennél a tesztnél a hurokéleket figyelmen kívül hagyjuk.)

Ha a parciális rendezést egy tetszőleges $K \subset \mathbb{R}^n$ kúp generálja ((2)-ben egyszerűen helyettesítsük $\mathcal{O}$-t K-val), akkor is ellenőrizhető a monotonitás, habár a teszt többé már nem grafikus [17, 30, 2].

A legfontosabb ok, amiért a monoton rendszereket olyan kiterjedten tanulmányozzák, valószínűleg az, hogy sokat tudhatunk meg az aszimptotikus viselkedésükről. Közelítőleg azt mondhatjuk, hogy a legtöbb megoldás konvergál az egyensúlyok halmazához. De ebben az összefüggésben két kérdést érdemes megemlíteni. Először is, a legtöbb meglévő konvergenciakritérium erősebb monotonitási feltételt követel meg, mint (1). Jellemzően feltételezik, hogy a félfolyam *erősen rendezéstartó*, lásd [27, 2. oldal], vagy (esetlegesen) *erősen monoton* – amiből következik a korábbi – lásd ugyanazon hivatkozás 3. oldalát a pontos definíciókért. Ennek a feltételnek az ellenőrzése a gyakorlatban gyakran nem túl könnyű, vagy ami még rosszabb: lehet, hogy a rendszer monoton, de mégsem tesz eleget ezeknek az erősebb feltételeknek. Másodszor, ezeknek az eredményeknek a bizonyítása nem triviális, és alapvető eszközöket igényel a monoton rendszerek elméletéből.

Ezekhez képest kivételes partikuláris esetet tudtunk kezelni [20]-ban, ahol egy az $\mathbb{R}^n$-ben kooperatív, egyetlen egyensúllyal bíró rendszer globális aszimptotikus stabilitását vizsgáltuk. Annak a bizonyításnak a gondolatmenetét általánosítjuk a B Függelékben egyetlen egyensúllyal rendelkező monoton folytonos félfolyamokra. Ez az eredmény hasznos lehet végtelen dimenziós rendszerekre is (amilyenek a késleltetett egyenletek). Azonkívül az itt adott bizonyítás önmagában teljes.

Egy példán megmutatjuk, hogy egy partikuláris kémiai rekció minden megoldása konvergál egy egyensúlyhoz. A monoton rendszerek elméletének alkalmazásaira további példák találhatóak a kemosztát modellekre vonatkozó irodalomban [28]. Például, egy változó hozamú modell monoton rendszerré transzformálható úgy, hogy a rendezés nem a szokásos komponensenkénti rendezés $\mathbb{R}^n$-en. [10]-ben egy hasonló, de többféle táplálékot tartalmazó modell analíziséhez is kiaknázzuk ezt a transzformációt.

A monoton dinamikai rendszereket újabban kiterjesztettük monoton I/O rendszerekké [2]-ben, hogy megkönnyítsük az ilyen részrendszerekből álló rendszerek tanulmányozását (kaszkádok, visszacsatolás). Utalunk [4, 3, 5, 6, 8, 9]-re, amikben ennek az elméletnek továbbfejlesztése és alkalmazásai találhatók, a molekuláris biológia, az ökológia és a kémiai reakcióhálózatok területéről vett példákkal.

2. Egy kémiai reakció

Tekintsük a következő reakciót:

$$\mathcal{C}_1 \rightleftharpoons \; .... \rightleftharpoons \; C_{i-1} \rightleftharpoons \; C_i \rightleftharpoons \; C_{i+1} \rightleftharpoons \; .... \rightleftharpoons \mathcal{C}_{n+1},$$

ahol minden C_i komplex különböző kémiai anyagfajták súlyozott összege a következőként:

$$\mathcal{C}_i = \sum_{k=1}^{n_i} a_i^k X_i^k$$

valamilyen pozitív a_i^k egészekre.

Ezeknek a hálózatoknak néhány speciális esetét tanulmányoztuk [5]-ben (ahol minden komplex pontosan egy anyagfajtát tartalmaz, és a hálózatban minden komlex különböző) és [21]-ben (ahol $C_1 = X_1 + X_2$ két anyagfajtából, és minden rákövetkező komplex pontosan egy anyagfajtából áll, minden komplex a hálózatban különböző, és a kinetikus tömeghatás törvényét feltételezik).

Ebben a cikkben feltételezzük, hogy legalább egy komplex nem triviális, azaz létezik legalább egy $n_i > 1$. Azt is feltesszük, hogy minden anyagfajta pontosan egy komplex része, vagyis $X_i^k \neq X_j^l$ minden k, l-re, ha $i \neq j$. A C_i komplexhez társított koncentrációvektort $x_i = (x_i^1, ..., x_i^{n_i})^\top$ jelöli, a hozzá társított sztöchiometriai vektort pedig $a_i = (a_i^1, ..., a_i^{n_i})^\top$. Alkalmazni fogjuk még a teljes koncentrációvektort, ami $x = (x_1^\top, ..., x_{n+1}^\top)^\top$, ahol $x \in \mathbb{R}_+^N$, és N az összes n_i összege: $N := \sum_{i=1}^{n+1} n_i$.

Az összes reakciósebességről feltételezzük, hogy monoton, folytonosan differenciálható függvénye a reaktáns anyagfajták koncentrációjának. Ez 0, ha egy anyagfajta hiányzik, és pozitív, ha az összes reaktáns anyagfajta jelen van. A $C_i \rightleftharpoons C_{i+1}$ reakciólépés előremutató sebességét R_i jelöli, a hátramutató sebesség R_{-i}. Formálisan, minden $i = 1, ..., n$-re a cikk további részében feltételezzük, hogy:

1. $R_i : \mathbb{R}_+^{n_i} \to \mathbb{R}_+$
2. $\forall x_i \in \partial\mathbb{R}_+^{n_i}, \quad R_i(x_i) = 0$
3. $\forall x_i \in \mathrm{int}(\mathbb{R}_+^{n_i}) \quad R_i(x_i) > 0$ és $(R_i'(x_i))^T \in \mathrm{int}(\mathbb{R}\,_+^{n_i})$

és hasonlóan az R_{-i} visszafelé haladó reakció sebességére. (Vegyük észre, hogy az R_{-i} sebesség $x_{i+1} \in \partial\mathbb{R}_+^{n_{i+1}}$ esetén van definiálva.)

Ismert példa a *kinetikus tömeghatás törvénye*, ahol a reakció sebessége $R_i(x_i) = k_i \Pi_{k=1}^{n_i} (x_i^k)^{a_i^k}$ valamilyen $k_i > 0$ mellett kielégíti a feltételeket.

Definiáljuk a reakció sebességének vektorát a következőképp:

$$R(x) = (R_1(x_1), R_{-1}(x_2), ...R_n(x_n), R_{-n}(x_{n+1}))^\top$$

és a hálózat sztöchiometriai mátrixát:

$$S = \begin{pmatrix} -a_1 & +a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ +a_2 & -a_2 & -a_2 & +a_2 & & \\ \vdots & & & \ddots & & \dots \\ 0 & \dots & +a_n & -a_n & -a_n & +a_n \\ 0 & \dots & 0 & 0 & +a_{n+1} & -a_{n+1} \end{pmatrix}.$$

Ezzel a koncentrációkra vonatkozó differenciálegyenlet:

$$\dot{x}(t) = SR(x(t)). \tag{3}$$

A szokásos érvelés mutatja, hogy a (3) rendszer pozitív, azaz az $\mathbb{R}^N_+$ nemnegatív ortáns pozitív invariáns halmaz. Megjegyezzük, hogy ez a rendszer nem monoton $\mathbb{R}^N$ egyetlen ortánsa által generált rendezésre sem. Ez a (3) rendszer incidenciagráfjának vizsgálatából látható, amely tartalmaz negatív paritású hurkot. Valóban, tekintsünk egy olyan hurkot, amelyiket egyrészt két olyan csomó alkot, amelyek azonos komplexben található anyagfajtáknak felelnek meg, és másrészt egy harmadik, amelyik a szomszédos komplexben (ez egy olyan komplex, amelyik az elsőből egyetlen reakciólépéssel elérhető) található anyagfajtának felel meg. Világos, hogy az ilyen csomó negatív paritású. Fő eredményünk a következő:

1. Tétel. *A (3) rendszer minden megoldása egyensúlyi ponthoz konvergál.*

A következő vizsgálatunkban feltételezzük, hogy van legalább egy olyan komplex, amelynek összes alkotó anyagfajtája nullától különböző kezdeti koncentrációval van jelen:

$$\exists i : x_i^k(0) > 0, \qquad \forall k = 1, ..., n_i. \tag{4}$$

Ha ugyanis (4) nem állna fenn, akkor egyetlen egy reakció sem menne végbe. Megjegyezzük, hogy az ilyen kezdeti koncentrációk olyan egyensúlynak felelnek meg, amelyekre az 1. tétel triviálisan teljesül, így az általánosság megszorítása nélkül feltételezhetjük (4)-et.

Minden olyan C_i komplexhez, amelyre $n_i > 1$, létezik $n_i - 1$ független lineáris első integrál.

Valóban:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{x_i^k}{a_i^k} - \frac{x_i^1}{a_i^1}\right) = 0 \qquad \forall k = 2, ..., n_i \tag{5}$$

(3) megoldásai mentén, és így kapjuk:

$$x_i^k(t) = \beta_i^k x_i^1(t) + \alpha_i^k \qquad \forall k = 2, ..., n_i \tag{6}$$

valamilyen $\alpha_i^k \in \mathbb{R}$ (ami függ a kezdeti feltételektől) és $\beta_i^k := \frac{a_i^k}{a_i^1} > 0$ számokkal. Valóban, az általánosság megszorítása nélkül feltételezhetjük, hogy:

$$\alpha_i^k \geq 0, \qquad \forall k = 2, ..., n_i.$$

Ahhoz, hogy ezt belássuk, vegyük észre, hogy – esetleg az anyagfajtáknak az egyes komplexeken belüli átcimkézése után – fennáll, hogy:

$$\frac{x_i^k(0)}{a_i^k} \geq \frac{x_i^1(0)}{a_i^1}, \qquad \forall k = 2, ..., n_i,$$

amiből állításunk közvetlenül következik.

(6) miatt elegendő minden C_i komplexben az x_i^1 *első* anyagfajta koncentrációjának a dinamikáját tekinteni. Minden i-re definiáljuk:

$$y_i := x_i^1, r_i(y_i) := R_i(y_i, \beta_i^2 y_i + \alpha_i^2, ..., \beta_i^{n_i} y_i + \alpha_i^{n_i}), r_{-i}(y_{i+1}) := R_{-i}(y_{i+1}, \beta_{i+1}^2 y_{i+1} + \alpha_{i+1}^2, ...).$$

Megjegyezzük, hogy minden r_i függvény folytonosan differenciálható a következő tulajdonságokkal:

$r_1 : \mathbb{R}_+ \longrightarrow \mathbb{R}_+, \quad r_i(0) = 0, \quad r_i(y_i) > 0$ és $r_i'(y_i) > 0 \quad \forall y_i > 0$, és hasonlóan minden r_{-i} -re is.

Legyen $y := (y_1, ..., y_{n+1})^T, r(y) := (r_1(y_1), r_{-1}(y_2), ..., r_n(y_n), r_{-n}(y_{n+1}))^T$ és legyen:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} -a_1^1 & +a_1^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ +a_2^1 & -a_2^1 & -a_2^1 & +a_2^1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \dots \\ 0 & \dots & +a_n^1 & -a_n^1 & -a_n^1 & +a_n^1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & +a_{n+1}^1 & -a_{n+1}^1 \end{pmatrix},$$

így a következő rendszerhez jutunk:

$$\dot{y}(t) = \tilde{S} r(y(t)), \tag{7}$$

ahol $y \in \mathbb{R}_+^{n+1} \setminus \{0\}$, (megjegyezve, hogy (4) miatt a 0-t kizárjuk).

Mivel $y_1(t)/a_1^1 + y_2(t)/a_2^1 + ... + y_{n+1}(t)/a_{n+1}^1 = C$ valamilyen $C > 0$ -ra a megoldások mentén, a dimenziót 1-gyel tudjuk csökkenteni, ha elhagyjuk az y_{n+1} egyenletét, és ezután n új változót vezetünk be:

$$z_j = \sum_{i=1}^{j} \frac{y_i}{a_i^1}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Az inverz transzformáció:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_1^1 z_1 \\ y_j &= a_j^1 (z_j - z_{j-1}), \quad j = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Ezeket az új koordinátákat alkalmazva kapjuk a redukált rendszer egyenleteit:

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= -r_1(a_1^1 z_1) + r_{-1}(a_2^1(z_2 - z_1)) \\ &\vdots \\ \dot{z}_k &= -r_k(a_k^1(z_k - z_{k-1})) + r_{-k}(a_{k+1}^1(z_{k+1} - z_k)) \quad k = 2, \dots, n-1 \\ &\vdots \\ \dot{z}_n &= -r_n(a_n^1(z_n - z_{n-1})) + r_{-n}(a_{n+1}^1(C - z_n)) \end{aligned} \tag{8}$$

a kompakt, konvex

$$\Omega := \{z \in \mathbb{R}^n | 0 \le z_1 \le z_2 \le \dots \le z_n \le C\}$$

állapottérrel. Nyilvánvaló, hogy a (8) rendszer kooperatív (és tridiagonalis). Azaz $\partial_j g_k(z) > 0$, ha g jelöli (8) jobb oldalát.

1. Lemma. *Ha $z^* \in \Omega$ a (8) rendszernek egyensúlyi helyzete, akkor $z^* \in$ int(Ω). Továbbá, z^* hiperbolikus és lokálisan aszimptotikusan stabilis egyensúlyi helyzet.*

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy $z^* \in \partial\Omega$ a (8) rendszer egyensúlyi helyzete. Ekkor, vagy $z_1^* = 0$, vagy $z_n^* = C$, vagy $z_k^* = z_{k+1}^*$ valamely $k \in \{1, ..., n-1\}$ mellett. Felhasználva, hogy minden r_i és r_{-i} függvény csak 0-ban lehet 0, minden egyes esetben ellentmondásra jutunk azzal, hogy $C > 0$. Ezzel bebizonyítottuk az első részt.

A második részhez megjegyezzük, hogy a Jacobi-mátrix egyensúlyi helyzetben a következő szerkezetű:

$$J = \begin{pmatrix} -a_1^1 - a_2^1 & +a_2^1 & 0 & \dots & 0 \\ +a_1^2 & -a_1^2 - a_3^2 & +a_3^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & +a_{(n-2)}^{(n-1)} & -a_{(n-2)}^{(n-1)} - a_n^{(n-1)} & +a_n^{(n-1)} \\ 0 & \dots & 0 & +a_{(n-1)}^n & -a_{(n-1)}^n - a_n^n \end{pmatrix}$$

ahol minden $a_j^i > 0$.

J diagonálisan dominált, és az A függelékben majd bebizonyítjuk, hogy ebből következik, hogy Hurwitz-típusú mátrix.

Emlékezzünk arra, hogy a B $n \times n$ -es mátrixot diagonálisan dominánsnak nevezzük, ha létezik n olyan $d_i > 0$ szám, hogy

$$b_{ii} d_i + \sum_{j \neq i} |b_{ij}| d_j < 0, \quad \forall i = 1, \cdots, n.$$

Egy kooperatív mátrixnál, mint amilyen J, a fenti definícióból elhagyható az abszolút érték. Következésképpen találnunk kell egy d vektort pozitív koordinátákkal, hogy a Jd vektor minden koordinátája negatív legyen. Vegyük észre, hogy $J\mathbf{1}$ – ahol $\mathbf{1}$ olyan vektor, amelynek minden koordinátája 1 – első és utolsó koordinátája negatív ($-a_{11}$, illetve $-a_{nn}$) és az összes többi 0. Ez azt sugallja, hogy d-t, mint az $\mathbf{1}$ vektor megfelelő perturbációját keressük.

A következő rekurzív formulával definiáljuk az $(n-1)$ számú ε_j paramétert:

$$0 < \varepsilon_1 < \frac{a_{11}}{a_{11} + a_{12}}$$
$$0 < \varepsilon_j < \varepsilon_{j-1} \frac{a_{j(j-1)}}{a_{j(j-1)} + a_{j(j+1)}}, \quad j = 2, \cdots, n-1$$

Nyilvánvaló, hogy $\varepsilon_j < 1$ minden $j = 1, \cdots, n-1$ esetén. Legyen a d vektor definíciója a következő:

$$d_i := 1 - \varepsilon_i, \;\; i = 1, \cdots, n-1 \text{ és } d_n := 1.$$

Ezután ellenőrizni lehet, hogy a Jd vektor koordinátái negatívak, ami megmutatja, hogy J diagonálisan dominált, és ebből következően Hurwitz-típusú mátrix. Ezzel bebizonyítottuk az állítást.

2. Lemma. *A (8) rendszernek létezik egyetlen globálisan aszimptotikusan stabilis egyensúlyi helyzete Ω-ban.*

Bizonyítás: Mivel Ω kompakt, konvex, pozitívan invariáns halmaza a (8) rendszernek, tartalmaz legalább egy egyensúlyi helyzetet. Az előző lemma alapján minden egyensúlyi helyzet $\mathrm{int}(\Omega)$-ban van.
A Brouwer-féle fokszám C^1 leképezésekre vonatkozó definíciója :

$$d(F, \mathrm{int}(\Omega), 0) = \sum_i \operatorname{sign} \det J(x_i^*),$$

ahol $J(x_i^*)$ a (8) rendszer Jacobi-mátrixa az egyensúlyi pontban, és a szummázás végigfut az összes egyensúlyi ponton. A (8) rendszerhez tartozó F vektormező Brouwer-féle fokszáma $\mathrm{int}(\Omega)$-ra és 0-ra nézve jól definiált; jelölje $d(F, \mathrm{int}(\Omega), 0)$. Továbbá azt állítjuk, hogy:

$$d(F, \mathrm{int}(\Omega), 0) = (-1)^n$$

Ahhoz, hogy ezt belássuk, válasszunk tetszőlegesen egy $\tilde{x} \in \mathrm{int}(\Omega)$ pontot, és tekintsük Ω-n a következő vektormezőt :

$$G(x) = \tilde{x} - x.$$

Nyilvánvalóan:

$$d(G, \mathrm{int}(\Omega), 0) = (-1)^n$$

Megmutatjuk, hogy F és G homotóp, és mivel a Brouwer-féle fokszám topologikusan invariáns, ebből az állításunk következik. Legyen:

$$H(x, t) = tF(x) + (1 - t)G(x).$$

Ekkor H folytonos $\Omega \times [0,1]$-en, $H(x,0) = G(x)$ és $H(x,1) = F(x)$. Már csak azt kell bizonyítanunk, hogy $H(x,t) \neq 0$ minden $x \in \partial\Omega$ és minden $t \in (0,1)$ esetén. In direkt, tegyük fel, hogy létezik $\tilde{x} \in \partial\Omega$ és $t \in (0,1)$, amellyel:

$$F(\tilde{x}) = -\frac{1-\tilde{t}}{\tilde{t}} G(\tilde{x}).$$

Ebből következik, hogy F $\tilde{x}$-ben kifelé mutat (míg $G(\tilde{x})$ világosan befelé irányul). De ez ellentmond annak, hogy Ω pozitívan invariáns, és ez így bizonyítja állításunkat.

Az előző lemma alapján tudjuk, hogy a (8) rendszer Jacobi-mátrixa az egyensúlyi pontokban nem szinguláris, ennélfogva az egyensúlyi pontok száma véges.

Az előző lemmából adódik, hogy minden x_i^* egyensúlyi pont hiperbolikus és lokálisan aszimptotikusan stabilis, azaz:

$$\operatorname{sign} \det J(x_i^*) = (-1)^n$$

és ebből következik, hogy csak egy egyensúlyi pont lehet.

A globális aszimptotikus stabilitás az 5. Lemmából következik, amit a B. Függelékben bizonyítunk be. Ahhoz, hogy belássuk, hogy ez az eredmény alkalmazható, vegyük észre először, hogy mivel Ω kompakt és pozitívan invariáns halmaz, a (8) rendszer folytonos félfolyamot generál. A 4. feltétel világos Ω kompaktsága miatt. A 2. feltétel következik abból a tényből, hogy a (8) rendszer kooperatív Ω-n, és ezáltal monoton félfolyamot generál egy olyan rendezéssel, amit a szokásos $\mathbb{R}^n$ beli komponensenkénti rendezést ad.[1] A 3. feltételt most bizonyítottuk, és az 1. feltétel is teljesül. (Bizonyítás: tetszőleges kompakt $K \subset \Omega$ esetén, minden $i = 1, \cdots, n$ mellett, legyen $p_i^* \in K$ valamilyen maximális i komponensű pont K-ban. Megjegyezzük, hogy K-ban van ilyen p_i^*, mivel az i -dik komponensre való vetítés folytonos és K kompakt. Ω rács, azaz $\sup(a,b) \in \Omega$, ha $a, b \in \Omega$. Következésképpen $p := \sup_i(p_i^*) \in \Omega$, és könnyű látni, hogy $\sup(K) = p$. Az $\inf(K) \in \Omega$ állítás hasonlóan bizonyítható.)

1. Megjegyzés: A globális aszimptotikus stabilitást bebizonyíthattuk volna Smillie [26], sőt Mierczynski [22] eredményeinek felhasználásával is. De ezek megkövetelik a folyam egy erősebb monotonitási tulajdonságának ellenőrzését, amit itt most elkerültünk. A Smillie eredményeire támaszkodó bizonyítást arra az esetre, ahol minden komplex csak egy anyagfajtából áll, lásd [5]-ben.

Az *1. Tétel bizonyítása:* Következik a (3) rendszer (8) rendszerré való redukciójából és transzformációjából, a 2. Lemmával összekapcsolva.

[1] Itt kihasználtuk, hogy Ω konvex, azaz p-konvex. Ez következik a [17] hivatkozás 3.1.1 Tételéből és 3.1.1. Megjegyzéséből.

3. Diffúzió hozzávétele

A közönséges differenciálegyenletet használó modellek, mint amilyet (3)-ban szemléltünk, implicite felteszik, hogy a reakciók jól kevert környezetben mennek végbe. Bár ez ésszerű feltevés, amikor a diffúzió a reakció időskálájához viszonyítva gyors, nyilvánvalóan érdeke a diffúzió hatását explicite belefoglalni. Ez a (szemilineáris parabolikus néven is ismert) parciális differenciálegyenletekhez; a *reakciódiffúzió*-egyenletekhez vezet.

Ebben a részben megmutatjuk, hogyan kell az eredményünket olyan esetre kiterjeszteni, amikor a diffúzió benne van a modellben. Eredményünk – az $X_1 + X_2 \rightleftharpoons X_3$ reakció speciális példája esetén, a kinetikus tömeghatás törvényét feltételezve – átfedést mutat a [23]-as hivatkozással. Az a cikk a kémiai reakciók Feinberg–Horn–Jackson-féle (FHJ) elméletének közönséges differenciálegyenletről reakciódiffúzió-problémákra való kiterjesztésével foglalkozott (lásd például [11, 19, 29, 7] hivatkozást). (Lásd még a [24] hivatkozást, mely diffúziót is tartalmazó FHJ-rendszerekre vonatkozó konvergenciaeredményeket mutat be, hiányos bizonyítással.) A [24, 23] hivatkozásokban közölt módszerek a Ljapunov-függvényeket veszik alapul, és ebből kifolyólag különböznek a mi megközelítésünktől, amely lehetővé teszi reakciók egy másik osztályának kezelését, és nem kell a kinetikus tömeghatás törvényére szorítkoznunk. Másrészről, számos olyan kémiai reakció van, amelyik FHJ típusú, de nem monoton, és ezért nem lehet a mi módszerünkkel kezelni.

Ebben a szakaszban az a célunk, hogy megmutassuk, hogy a PDE modellre vonatkozó analóg konvergenciaeredmények hogyan következnek az ODE-kre vonatkozók egyszerű következményeként. (A bizonyítás egy lehetséges alternatívája az lenne, hogy minden eredményt kezdettől fogva a monoton reakció-diffúzió-rendszerek elméletének keretén bizonyítanánk be, de az ODE-kre való redukció jóval egyszerűbb.) Általában, a tér és idő $(q, t) \mapsto x(q, t)$ függvényeire vonatkozó PDE-feladatokat tekintünk kezdeti feltételekkel és Neumann-féle (zéró fluxusú) peremfeltétellel, ahol a pont az idő szerinti deriváltat, x_ν a normális irányú deriváltat jelenti, f monoton vektormező, és L a diffúzió parciális differenciáloperátora:

$$\begin{aligned} \dot{x}(q,t) &= (Lx)(q,t) + f(q, x(q,t)) && t > 0, \quad q \in Q \\ x_\nu(q,t) &= 0 && t > 0, \quad q \in \partial Q \\ x(q,0) &= x_0 && q \in \bar{Q}. \end{aligned} \tag{9}$$

Az a kulcsmegfigyelés, amit tenni akarunk, (alkalmas technikai feltételek mellett), hogy a (9) rendszer minden megoldása kovergál az egyértelmű homogén egyensúlyi helyzethez: $x(q, t) \to c$, ha $t \to +\infty$, feltéve, hogy a problémához társított $\dot{x} = f \circ x$ ODE minden megoldása c-hez konvergál. Így a korábban bizonyított eredmények kiterjeszthetők a diffúziós esetre. (f monotonitása elengedhetetlen – vessük össze a diffúziós instabilitás jelenségével, amely a mintázatképződés aktivátor-inhibitor mechanizmusában merül fel.) Először kifejtjük a hátteret a [27] hivatkozás 7. fejezetéből a monoton reakció-diffúzió-rendszerekre vonatkozó eredményekre koncentrálva, egyesítve azokat a [1]-ben lévő technikai tényekkel.

A Q halmaz teret reprezentál, korlátos, nyílt, összefüggő részhalmaza az $\mathbb{R}^M$ euklideszi térnek, a (C^4 osztályú) sima ∂Q határral. Az f vektormező kétszer folytonosan differenciálható. Jelölje x_ν a q pontban a $\nu(q)$ külső normális egységvektor irányában a ∂Q halmaz q pontjában vett iránymenti deriváltat. Válasszunk $\mathbb{R}^N$-nek egy X nem üres, zárt részhalmazát, megszorítva a koncentráció megengedett értékeire, amilyen például a nemnegatív ortáns vagy az 1. Lemmában használt Ω kompakt és konvex állapottér, és tegyük fel, hogy X pozitívan invariáns az $\dot{x} = f \circ x$ közönséges differenciálegyenletre vonatkozóan (az alábbiakban X-re két kiegészítő feltevést is teszünk). A kezdeti feltétel egy

$$x_0 : \bar{Q} \to X$$

függvény, ami kétszer folytonosan differenciálható és kielégíti az $(x_0)_\nu = 0$ peremfeltételt. A (9) rendszer „megoldásán” értünk egy

$$x = (x_1, ..., x_n)^\top : \bar{Q} \times (0, T) \to X$$

függvényt, amire (9) fennáll, és

$\frac{\partial x_i}{\partial t}, \frac{\partial x_i}{\partial q_j}, \frac{\partial^2 x_i}{\partial q_j \partial q_k}$ Hölder-folytonosak a $Q \times (0, T)$ halmazon minden i, j, k-ra, és

$\frac{\partial x_i}{\partial q_j}, x_i$ folytonos a $\bar{Q} \times (0, T)$ halmazon minden i, j-re.

Ezek a feltevések olyanok, mint az [1] hivatkozásban; [27]-ben viszont csak azt követelik meg, hogy $\frac{\partial x_i}{\partial q_j}$ legyen folytonos a $\bar{Q} \times (0, T)$ tartományon (a Hölder-folytonosságot is az enyhébb folytonossággal helyettesítik), de a kezdeti feltételekre kevesebb regularitási feltételt tesznek.

Az L differenciáloperátor a következő alakú:

$$Lx = (L_1 x_1, ..., L_n x_n)^\top,$$

ahol minden i-re:

$$L_i = \sum_{j,k=1}^{n} a^i_{j,k}(q) D_j D_k + \sum_{k=1}^{n} a^i_k(q) D_k,$$

$a^i_{kj} = a^i_{jk} \in \mathcal{C}^2(\bar{Q})$, valamint L egyenletesen elliptikus, azaz:

$$\exists \mu > 0, \text{ hogy } \xi^\mathrm{T} A_i(q) \xi \geq \mu |\xi^2| \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \quad \forall i = 1, 2, ..., n,$$

ahol $A_i(q) = (a^i_{jk}(q))$. Számunkra az az eset a legfontosabb példa, mikor az anyagfajták diffúziója független egymástól: $a^i_{jj} \equiv d_i > 0$ és $a_{jk} \equiv 0$ minden $j \neq k$-ra, azaz például $L_i x_i = d_i \Delta x_i$, ahol a Δ a Laplace operátor.

Két kiegészítő feltételt kell tennünk a megengedett állapotvektorok X halmazára. Már megköveteltük, hogy ez legyen invariáns az $\dot{x} = f \circ x$ dinamikára nézve. Egy második feltétel, hogy invariánsnak kellene lennie a diffúzióra nézve is, abban az értelemben, hogy az $\dot{x} = Lx$, $x_0(q,0) \in X$ kezdeti feltételű lineáris probléma megoldásának minden $q \in Q$ esetén teljesítenie kell, hogy minden $t > 0$, minden $q \in Q$ mellett $x(q,t) \in X$. Tételezzük fel mostantól fogva, hogy *vagy* Q tetszőleges, nyílt, konvex halmaz, azonban minden L_i operátor megegyezik, (például az anyagfajták diffúziója független, és $d_i = d_j$, minden i, j indexre), *vagy* az L_i operátorok tetszőlegesek, azonban a Q halmaz azonos egy (a,b) „téglalappal", ahol $b - a \in \mathbb{R}^n_+$ (lehetséges, hogy a koordinátái között szerepel $-\infty$, és b koordinátái között szerepel $+\infty$ is).

Mostantól feltételezzük, hogy adott egy rendezés $\mathbb{R}^n$-ben. Az utolsó feltétel hálófeltétel az X halmazon (lásd még a B Függelékben): bármely $S \subseteq K$ kompakt részhalmazra, mind $\inf(S)$ mind $\sup(S)$ definiálva van, és X-hez tartozik. Azt mondjuk, hogy a vektormező *kvázi-monoton*, (az $X \subseteq \mathbb{R}^n$-n adott rendezésre nézve), ha $\dot{x} = f \circ x$ folyama monoton. Ha adott az x és y X-beli értékeiket felvevő függvény, akkor azt írjuk, hogy $x \preceq y$, ha $x(q,t) \preceq y(q,t)$ minden olyan (q,t) esetén, amely az értelmezési tartományuk közös eleme. A következő egy változata a [27] hivatkozás 3.4 Tételének. Ezt specializáltuk a PDE esetre (a kézikönyvben általánosabban parciális differenciálegyenlőtlenségekre van megadva), és tetszőleges rendezésekre mondtuk ki. (A könyvben az állítás csak kooperatív rendszerekre vonatkozik, de hasonló bizonyítás érvényes tetszőleges rendezésre is, lásd a 142. oldalon.)

2. Tétel. *Ha f kvázi-monoton, és az y, z megoldások a $[0,T)$ intervallumon vannak értelmezve, úgy hogy $y(\cdot,0) \preceq x_0 \preceq z(\cdot,0)$ $\bar{Q}$-n, akkor a (9) rendszernek létezik egyetlen x megoldása, és az értelmezve van legalább a $[0,T)$ intervallumon és $y \preceq x \preceq z$ a $\bar{Q} \times [0,T)$-n.*

Megtettük az előkészületeket arra, hogy kimondjuk következtetéseinket. Az első megállapításunk a következő:

3. Tétel. *Tegyük fel, hogy f kvázi-monoton, és létezik $\xi \in X$, hogy $\dot{x} = f \circ x$, $x_0 \in X$ minden megoldása $t \to +\infty$ esetén ξ-hez konvergál. Ekkor a (9) rendszernek létetik egyetlen $x(q,t)$ megoldása, amely értelmezve van minden $t > 0$-ra, és minden x_0 kezdeti feltételre létezik $x(q,t) \to \xi$ egyenletesen, ha $t \to +\infty$, $q \in Q$ mellett.*

Bizonyítás: Az állítás bizonyításához először legyen $y : \bar{Q} \to X$ olyan függvény, amely állandó: megegyezik x_0 minimumával és $z : \bar{Q} \to X$ pedig olyan függvény, mely állandó: megegyezik x_0 maximumával. Továbbá, megjegyezzük, hogy az $\dot{x} = f \circ x, x(0) = y$ kezdetiérték-probléma $y(t)$ megoldása, (mely minden t-re értelmezve van, és $t \to +\infty$ esetén ξ-hez konvergál) a (9) rendszernek is megoldása, egyszerűen az $y(q,t) := y(t)$ definícióval. Hasonlóan z-re, és a *2. Tétel* esetéhez jutottunk. Alkalmazva ezt a *2. Tételt* a $[0,T)$ növekvő, véges intervallumaira, $x(q,t)$ egzisztenciáját és unicitását kapjuk a $[0,+\infty)$ intervallumon. Továbbá, $y(q,t) \preceq x(q,t) \preceq z(q,t)$, valamint $y(q,t) \to \xi$ és $z(q,t) \to \xi$ (q-ban egyenletesen), ami a következtetést adja.

Sajnálatosan – bármilyen elegáns is a *3.Tétel*, – ez nem elégséges önmagában, amikor az eredeti (3) rendszerrel foglalkozunk, mert ennek a rendszernek sok egyensúlya van. Kiegészítő feltételt kell tennünk, mégpedig azt, hogy minden diffúziós együttható megegyezik.

4. Tétel. *Tegyük fel, hogy f olyan, mint az 1.Tételben, és valamilyen $d > 0$-ra $L_i x_i = d\Delta x_i$ az állapottér minden koordinátájára. Ekkor a (9) rendszer minden megoldása konvergál a (homogén) stacionárius állapothoz.*

Bizonyítás: A bizonyításhoz használjuk fel ugyanazt a koordináta-transzformációt, mint korábban. A PDE-re alkalmazva, ez a következő formáját eredményezi az egyenletnek:

$$\begin{aligned}
\dot{z_1} &= -r_1(a_1^1 z_1) + r_{-1}(a_2^1(z_2 - z_1)) + d\Delta z_1 \\
&\vdots \\
\dot{z_k} &= -r_k(a_k^1(z_k - z_{k-1})) + r_{-k}(a_{k+1}^1(z_{k+1} - z_k)) + d\Delta z_k \qquad k = 2, \ldots, n-1 \\
&\vdots \\
\dot{z_n} &= -r_n(a_n^1(z_n - z_{n-1})) + r_{-n}(a_{n+1}^1(C - z_n)) + d\Delta z_n.
\end{aligned}$$

A *2.Lemma* és a *3.Tétel* összevetéséből ismert, hogy ennek a rendszernek minden megoldása konvergál egy (egyértelmű) homogén stacionárius állapothoz. Így az $y_i = x_i^1$ változók szintén konvergálnak egy bizonyos stacionárius állapothoz. Most bebizonyítjuk, hogy a további változók szintén konvergálnak.

Emlékezzünk vissza, hogy a közönséges differenciálegyenletnek (amikor nincs diffúzió) létezik $n_i - 1$ független lineáris első integrálja, amint (5)-ben megmutattuk:

$$\dot{Z}_{ik} = 0 \quad \forall i, \forall k = 2, ..., n_i,$$

ahol $Z_{ik} = x_i^k / a_i^k - x_i^1 / a_i^1$. Ebből ugyanazt a kifejezést kapjuk, mint (6)-ban:

$$x_i^k(t) = \beta_i^k x_i^1(t) + \alpha_i^k \qquad \forall i, \forall k = 2, ..., n_i$$

valamilyen $\alpha_i^k \in \mathbb{R}$ (ami a kezdeti feltételektől függ) és $\beta_i^k > 0$ számokkal. Így, amikor x_i^1 konvergens, ugyanezt a következtetést vonhatjuk le a többi x_i^k változóra is. Amikor hozzávesszük a diffúziót, akkor ez az érvelés nem érvényes. Az (5) egyenlet ehelyett:

$$\dot{Z}_{ik} = LZ_{ik} \quad \forall i \forall k = 2, ..., n_i,$$

alakúvá válik, ahol $LZ = d\Delta Z$, azzal a Neumann-feltétellel, hogy a határpontokban $(Z_{ik})_\nu = 0$. Ennek a PDE-nek minden megoldása konstanshoz konvergál, a kezdeti értékek az $\frac{1}{|Q|}\int_Q Z_{ik}(q,0)dq$ átlagához, ahol $|Q|$ Q-nak a mértéke. (Vázlatos bizonyítás: Létezik a Neumann–Laplace-féle önadjungált operátornak λ_i sajátértékeiből és a hozzájuk tartozó Φ_i $i = 1, 2, ...,$ sajátvektoraiból álló olyan sorozat, amelynek tagjai megoldásai az $L\Phi + \lambda\Phi = 0$, $\Phi_\nu = 0$ problémának. Ezekre fennáll, hogy $\lambda_1 = 0, \Phi_1 = 1$, és $\lambda_i > 0$ minden $i > 1$-re, valamint Φ_i ortogonális bázisa az L^2 térnek. Most vegyünk egy tetszőleges folytonos és korlátos x_0 kezdeti feltételt, és tekintsük ezt az L^2 tér elemének, és fejtsük ki a bázis szerint: $x(q,0) = \sum_{i-1}^{\infty} b_i\Phi_i(q)$, ekkor a $\dot{Z} = LZ$ rendszernek $x(q,t) = \sum_{i-1}^{\infty} b_i e^{-\lambda_i t}\Phi_i(q)$ megoldása az $x(q,0) = \sum_{i-1}^{\infty} b_i\Phi_i(q)$ kezdeti feltétellel, és ez L^2-ben a b_1 első Fourier-együtthatóhoz konvergál, ami a megkövetelt átlag.) Összefoglalva, mind $x_i^k/a_i^k - x_i^1/a_i^1$, mind x_i^1 egy számhoz konvergál, és ugyanígy minden x_i^k is.

4. A Függelék: A diagonálisan dominált mátrixok Hurwitz-típusú mátrixok

Ez egy jól ismert eredmény (lásd például [25]). Egy rövid, Gersgorin-tételére alapozott bizonyítását adjuk. Először egy speciális esetet vizsgálunk és utána megmutatjuk, hogy ebből mindig levezethető az általános eset. Ha az A mátrix diagonálisan dominált a $d_i = 1$ ($\forall i = 1, ..., n$)számokra nézve, azaz:

$$a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}| < 0, \quad \forall i = 1, ..., n$$

akkor a Gersgorin-tételből következik, hogy A Hurwitz-típusú mátrix.

Ha az A mátrix diagonálisan dominált, olyan pozitív d_i számok halmazára nézve, amelynek nem mindegyike 1, akkor megmutatjuk, hogy az A mátrix hasonló az A^* mátrixszal, ami diagonálisan dominált a $d_i = 1 \quad (\forall i = 1, ..., n)$ esetén. Az eredmény ebből egyenesen következik.

Hogy bebizonyítsuk ezt az állítást, definiáljuk a T diagonális mátrixot a következő koordinátákkal:

$$t_{ii} = 1/d_i, \quad \forall i = 1, ..., n.$$

Ezután egy egyszerű számolással megmutatható, hogy $A^* = TAT^{-1}$ úgy, hogy $a^*_{ij} = a_{ij}d_j/d_i \quad \forall i,j = 1,...,n$ esetén. De másfelől ebből következik, hogy:

$$a_{ii} + \sum_{j\neq i} \left|a^*_{ij}\right| = (d_i a_{ii} + \sum_{j\neq i} |a_{ij}|\, d_j)/d_i.$$

Az n számú mennyiség mindegyike negatív, az állításunk bizonyítása befejeződött.

5. B függelék: Egy egyértelmű egyensúllyal bíró monoton folyamokra vonatkozó globális attraktivitási eredmény

Tekintsük az X metrikus teret a d metrikával, és tegyük fel, hogy adott az X téren egy $\preceq$ parciális rendezés. Feltételezzük, hogy a parciális rendezés és az X tér metrikus topológiája kompatíbilis a következő értelemben: ha $x_n \to x$ és $y_n \to y$ konvergens sorozat X-ben, és ha $x_n \preceq y_n$, akkor $x \preceq y$. Időnként a szabálytalan $x \preceq A$ (valamilyen $x \in X$ és $A \subset X$ mellett) írásmódot alkalmazzuk, ami a $\forall\ y \in A$-ra $x \preceq y$ állítást jelöli. Alkalmazni fogjuk az ismert rendezéselméleti fogalmakat: $\sup(A)$ jelöli a legkisebb felső, illetve $\inf(A)$ a legnagyobb alsó határát az $A \subset X$ halmaznak, feltéve, hogy léteznek ilyenek X-ben. Ha $p, q \in X$ és $p \preceq q$, definiáljuk a rendezés $[p,q] := \{x \in X | p \preceq x \preceq q\}$ intervallumát. Egy $A \subset X$ halmazt a rendezésre nézve *konvexnek* nevezünk, ha $[p,q] \subset A$ minden olyan $p, q \in A$ pontpárra, amelyre $p \preceq q$.

Az X halmazon vett Φ folytonos félfolyam által generált dinamikával fogunk foglalkozni. Emlékezzünk rá, hogy ez folytonos $\Phi : \mathbb{R}_+ \times X \to X$ leképezés, ($\Phi_t(x) := \Phi(t,x)$), amelyre $\Phi_0 = \mathrm{Id}$ és $\Phi_t \circ \Phi_s = \Phi_{t+s}$ minden $t, s \in \mathbb{R}_+$ mellett.

Az X térre és a Φ leképezésre a következő feltételeket adjuk:

1. X minden C kompakt részhalmazára igaz, hogy $\inf(C)$,$\sup(C) \in X$.

2. Φ monoton a $\preceq$ rendezésre nézve, azaz (1) fennáll.

3. Φ-nek X-ben létezik az a egyértelmű egyensúlyi pontja.

4. Minden $x \in X$-re az $O(x) := \{\Phi_t(x) | t \in \mathbb{R}_+\}$ pálya lezártja kompakt X-ben.

Az utolsó, 4. feltétel magában foglalja nevezetesen azt, hogy x ω-határhalmaza – jelölje ezt $\omega(x)$ – nem üres, konvex, invariáns halmaz, (ez azt jelenti, hogy

$\Phi_t(\omega(x)) = \omega(x)$ minden $t \in \mathbb{R}_+$ esetén) és $\lim_{t\to+\infty} d(\Phi_t(x), \omega(x)) = 0$ (ahol az $x \in X$ pont és az $A \subset X$ halmaz távolsága a szokásos $d(x, A) = \inf_{y\in A} d(x, y)$). Az 1–4 feltételekből kapjuk a következő állítást:

5. Tétel. *Az a egyensúlyi pont globálisan attraktív a Φ leképezésre nézve.*

Bizonyítás: Vegyünk egy $x \in X$ pontot, és tekintsük $\omega(x)$-et. Ekkor definiálni tudjuk az:

$$m := \inf(\omega(x)) \text{ és az } M := \sup(\omega(x)) \text{ értékeket.}$$

Azt állítjuk, hogy:

$$\Phi_t(x) \preceq m, \quad \forall t \in \mathbb{R}_+. \tag{10}$$

Ahhoz, hogy ezt belássuk, be fogjuk bizonyítani, hogy minden $t \geq 0$-ra $\Phi_t(m) \preceq \omega(x)$, amiből (10) következni fog, ha $\omega(x)$-nek m a legnagyobb alsó határa.

Válasszunk egy $t \geq 0$ időpontot, és egy tetszőleges $p \in \omega(x)$ pontot. Meg kell mutatnunk, hogy $\Phi_t(m) \preceq p$. $\omega(x)$ invarianciájából következik, hogy valamilyen $q \in \omega(x)$ esetén $\Phi_t(q) = p$. Mivel $q \in \omega(x)$ ezért $m \preceq q$, és ennélfogva a monotonitásból következik, hogy $\Phi_t(m) \preceq \Phi_t(q) = p$, tehát ezzel bebizonyítottuk (10)-t.

A monotonitásból következik, hogy $\Phi_t(m)$ csökkenő, azaz $0 \leq t_1 \leq t_2$ esetén $\Phi_{t_2}(m) \preceq \Phi_{t_1}(m)$. (Egyszerűen (10)-re alkalmazzuk $\Phi_{t_1}(m)$-t, ahol $t = t_1 - t_2$.)

Most azt állítjuk, hogy $\omega(x) = \{a\}$.[2] Először megmutatjuk, hogyha $p, q \in \omega(m)$, ebből következik, hogy $p = q$-val. Válasszunk $\Phi_{t_k}(m) \to p$ és $\Phi_{t_l}(m) \to q$ sorozatokat ($t_k, t_l \to +\infty$). Mivel $\Phi_t(m)$ nemnövekvő, ezért lehetséges, hogy találunk minden t_k-hoz valamilyen $t_{l(k)} \geq t_k$ sorozatot, hogy $\{t_{l(k)}\}$ egy részsorozatát alkotja $\{t_l\}$-nek és $\Phi_{t_{l(k)}}(m) \preceq \Phi_{t_k}(m)$. A határértékek meghatározása után azt kapjuk, hogy $q \preceq p$. Hasonló érveléssel megmutathatjuk, hogy $p \preceq q$, következésképpen $p = q$. Ez azt mutatja, hogy $\omega(m)$ egyelemű. Az ω-határhalmazok invariánsak, és ebből következik, hogy $\omega(m)$-nek tartalmaznia kell egy egyensúlyt. Egyetlen a egyensúlyi pont létezik, és ebből következik, hogy $\omega(m) = a$, ezzel bebizonyítottuk az állítást.

Hasonló érveléssel belátható, hogy $\Phi_t(M)$ monoton növekedő, és így $\omega(M) = \{a\}$.

[2] A monoton rendszerek konvergencia kritériumából közvetlenül következik ez az állítás ([27] hivatkozás 1.2.1. Tétele), felhasználva, hogy az a egyensúly egyértelmű. Habár, itt inkább önálló rövid bizonyítást adunk, anélkül, hogy felhasználnánk a monoton rendszerek elméletének eredményeit.

Végül, minden $t \geq 0$-ra kapjuk, hogy:

$$\Phi_t(m) \preceq m \preceq \omega(x) \preceq M \preceq \Phi_t(M),$$

és $t \to +\infty$ határértéket véve $\omega(x) = a$, és ezzel bebizonyítottuk a tételt.

2. Megjegyzés: Ebben a megjegyzésben az első feltétel egy ellenőrzését adjuk, abban az esetben, amikor az X állapottér egy részhalmaza a véges dimenziós térnek.

Tegyük fel, hogy az Y egy véges dimenziós normált vektortér, és az X állapottér részhalmaza az Y-nak. Feltételezzük, hogy $\preceq$ parciális rendezés Y-ban – és egyben X-ben – a $K \subset Y$ kúp által generált. Megjegyezzük, hogy a K kúpot *normális*nak nevezzük, ha $k > 0$-ra, $x, y \in Y$, és $0 \preceq x \preceq y$ esetén $|x| \leq k\,|y|$. Könnyű belátni, hogyha K normalis, akkor minden rendezési intervallum egy zárt halmaz Y-ban.

A következő lemma megmutatja, hogy a K kúp az Y *véges-dimenziójú* térben mindig normál.

3. Lemma. *Legyen Y véges-dimenziójú vektortér a K kúppal, és Y-ban adva egy $\preceq$ parciális rendezés. Ekkor K normális.*

Bizonyítás: Megmutatjuk, hogy:

$$M := \sup\{|z| \quad | \quad 0 \preceq z \preceq x, |x| = 1\}$$

véges, valós szám. Az állításunk következik abból, hogy a normalitás definíciójában szereplő k-t M-nek választjuk. Valóban, $0 \preceq x \preceq y, y \neq 0$ esetén (ezt feltételezhetjük az általánosság megszorítása nélkül), következik, hogy $0 \preceq x/\,|y| \preceq y/\,|y|$.

De abból, hogy $|x/\,|y|\,| \leq M$ és $k = M$, az állításunk következik.

Most bizonyítsuk, hogy M véges. Tegyük fel, hogy nem az, akkor $\{x_n\}$ és $\{z_n\}$ sorozatok kielégítik a $0 \preceq z_n \preceq x_n$ feltételt, hogy $|x_n| = 1$ minden n-re, és $|z_n| \to \infty$. Tekintsük az $\{y_n\}$ sorozatot, ahol $y_n = z_n/|z_n|$. Nyilvánvalóan, Y egységgömbjének kompaktsága miatt $|y_n| = 1$ minden n-re, és (mivel Y véges-dimenziós), tekinthetjük az y_{n_k} részsorozatot, ami y^*-hoz konvergál. Világos, hogy $|y^*| = 1$ és $x_n/|z_n| \to 0$. Így a parciális rendezés kompaktsága és a metrikus topológia által kapjuk, hogy:

$$0 \preceq y^* \preceq 0.$$

De ez ekvivalens azzal az állítással, hogy $y^* \in K \cap (-K)$ és így $y^* = 0$ (mivel K egy kúp). Ez ellentmond azzal, hogy $|y^*| = 1$, és ez bizonyítja állításunkat.

Megjegyezzük, hogy az X parciális rendezés halmaza egy *háló*, ha $\sup(p, q), \inf(p, q) \in X$ minden $p, q \in X$ esetén. Azt mondjuk, hogy az $S \subset X$ *korlátos rendezés* az X halmazon, ha $a, b \in X$ úgy, hogy $S \subset [a, b]$.

4. Lemma. *Legyen Y végesdimenziós nomált vektortér egy K kúppal, és legyen $X \subset Y$ egy háló. Feltételezzük, hogy X-ben minden korlátos halmaz X-ben korlátos rendezés. Ha C kompakt részhalmaza X-nek, akkor* $\inf(C), \sup(C) \in X$.

Bizonyítás: Csak azt az állítást bizonyítjuk, hogy $\sup(C) \in X$. A bizonyítás hasonló az $\inf(C) \in X$ állításra is.

Mivel C korlátos, így rendezésre nézve is korlátos, és $a, b \in X$, hogy $C \subset [a, b]$. Metrikus térben kompakt halmazok szeparábilisak, így kiválaszthatjuk C-nek egy megszámlálható és sűrű $\{c_k\}$ részhalmazát. Mivel X háló, X-nek képezhetjük egy $\{x_k\}$ sorozatát a következőképpen:

$$x_1 = c_1$$
$$x_k = \sup(c_k, x_{k-1}), \quad k > 1.$$

Ez a sorozat a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

1. $\{x_k\}$ növekvő, azaz $x_k \preceq x_{k+1}$
2. $\{x_k\} \subset [a, b]$

Az $[a, b]$ rendezési intervallum zárt (a metrikus topológia és parciális rendezés kompatibilitása által) és zárt (mivel K normális), ezáltal kompakt. Így, $\{x_k\}$ növekvő sorozat, amelyik az $[a, b]$ kompakt halmazban marad, és így valamely $x \in [a, b] \subset X$, hogy $x_k \to x$ (ezt az állítást bebizonyítottuk az 5. tétel bizonyításában). Most azt állítjuk, hogy:

$$\sup(C) = x.$$

Két lépésben bizonyítjuk ezt az állítást. Először megmutatjuk, hogy x felső határa C-nek. Másodszor megmutatjuk, hogy ez a legkisebb felső határa.

Választunk egy $c \in C$ elemet. Mivel $\{c_k\}$ sűrű C-ben, a $\{c_k\}$ sorozatból kiválaszthatunk egy $\{c_{n_k}\}$ konvergens részsorozatot c határértékkel. Már ismert, hogy $c_{n_k} \preceq x$ minden n_k-ra, így a kompatibilitásból következik, hogy $c \preceq x$. Végül, legyen y egy tetszőleges felső határa C-nek. Ekkor $c_k \preceq y$ minden k-ra, mivel $x_k \preceq y$ minden k-ra. Vegyük a határértéket és alkalmazzuk a kompatibilitást még egyszer, kapjuk, hogy $x \preceq y$, és így x a legkisebb felső határa C-nek.

Például, tegyük fel, hogy $Y = \mathbb{R}^n$ és $K = \mathbb{R}^n_+$, és X vagy $\mathbb{R}^n_+$, vagy $\mathbb{R}^n$. Világos, hogy X egy rács, és az X-ben minden korlátos halmaz rendezés korlátos. Ezentúl, a 4. Lemmából következik, hogy az X kompakt részhalmazainak a suprémuma és infinuma X-ben van.

3. Megjegyzés: Az 5. Tétel alkalmazható végtelen dimenziójú téren értelmezett folyamokra is. Például, a késleltetett egyenletekben gyakran tekintjük a kompakt intervallumon értelmezett folytonos függvények terét, amilyenek $X = C([-r, 0], \mathbb{R}^n)$, vagy $X = C([-r, 0], \mathbb{R}^n_+)$, a szuprémum norma által indukált, szokásos metrikával, és az $f_1 \preceq f_2$ parciális rendezéssel, amit az $f_2(t) - f_1(t) \in \mathbb{R}^n_+$ minden $t \in [-r, 0]$-ra feltétel definiál. Mindkét esetben a kompakt halmazoknak létezik X-ben infinuma és szuprémuma, lásd a [18] hivatkozásban.

4. Megjegyzés: A [20] hivatkozásban – aminek a gondolatmenetét itt követjük – jelent meg az 1. feltétel. Sőt ez a feltétel előkerül a [18]-as munkában is. Bár ott, a félfolyamokra egy erősebb monotonitási tulajdonságot írnak elő, mégis az egyensúly nem egyértelmű. Az eredmény az, hogy a kvázikonvergens pontok halmaza (egy pont kvázikonvergens, ha az egyensúlyi halmaz tartalmazza a pont határhalmazát) tartalmaz egy nyílt és sűrű halmazt. A bizonyítás a monoton dinamikai rendszerek elméletének számos alapvető eredményére épül.

Habár a kémiai reakcióhálózatokban elért legfontosabb eredményeink bizonyításához az 5. Tétel szükséges (1. Tétel), az a egyensúlyi pont stabilitásáról általánosabb következtetéseket tudunk levonni, feltéve, hogy az X tér és a Φ folyam további feltételeket is kielégít.

Minden $x \in X$ pont minden környezete tartalmazza x - nek egy kompakt, rendezéskonvex C környezetét.

(11)

A következő eredményre jutottunk:

5. Lemma. *Tegyük fel, hogy minden $t \in \mathbb{R}_+$ értékre Φ_t nyílt leképezés. Az 1–4 feltételek és* **C** *miatt Φ-nek az a egyensúlyi pontja globálisan aszimptotikusan stabilis.*

Bizonyítás: Az 5. tétel miatt elegendő azt bebizonyítani, hogy a stabilis egyensúly. Ismételten használni fogjuk azt a tényt, hogy minden olyan $p, q \in X$ esetén, amelyre $p \preceq q$, fennáll, arra:

$$\Phi_t([p, q]) \subset [\Phi_t(p), \Phi_t(q)], \quad \forall t \in \mathbb{R}_+,$$

is teljesül, Φ monotonitása miatt.

Válasszuk a-nak egy tetszőleges U környezetét. A **C** feltétel miatt, a-nak létezik egy kompakt, rendezéskonvex C környezete, hogy $C \subset U$. Az 1. feltétel miatt definiálhatjuk az:

$$i := \inf(C) \text{ és } s := \sup(C)$$

értékeket, és tekinthetjük a rendezés $[i, s]$ intervallumát. Ekkor nyilvánvalóan, $C \subset [i, s]$, így a-nak $[i, s]$ is egy környezete. Következésképpen, Φ_t nyílt hozzárendelés minden $t \in \mathbb{R}_+$ esetén, és $\Phi_t([i, s])$ is környezete a-nak.

Most válasszunk egy $T > 0$ számot, úgy hogy:

$$\Phi_t(i), \Phi_t(s) \in C, \quad \forall t \geq T. \tag{12}$$

Az 5. Tétel alapján ilyen T létezik.

Most tekintsük a-nak a $V := \Phi_T([i, s])$ környezetét. Ekkor minden $t \geq 0$-ra kapjuk, hogy:

$$\Phi_t(V) = \Phi_t(\Phi_T([i, s])) \subset \Phi_t([\Phi_T(i), \Phi_T(s)]) \subset [\Phi_{t+T}(i), \Phi_{t+T}(s)] \subset C \subset U,$$

ahol alkalmaztuk a fenti tényt az első két tartalmazásnál; (11) és (12) állításait, (nevezetesen először azt, hogy C konvex a rendezésre nézve). Ezzel befejeztük a bizonyítást.

Hivatkozások

[1] H. Amann, "Invariant sets and existence theorems for semilinear parabolic and elliptic systems," J. Math. Anal. Appl. 65(1978): 432–467.

[2] D. Angeli and E. D. Sontag, Monotone control systems, Trans. Autom. Contr. 48, 1684–1698 (2003).

[3] D. Angeli and E. D. Sontag, Multistability in monotone I/O systems, Systems and Control Lett. 51, 185–202 (2004).

[4] D. Angeli, P. De Leenheer and E. D. Sontag, A small-gain theorem for almost global convergence of monotone systems, to appear in Systems Contol Lett.

[5] D. Angeli and E. D. Sontag, Interconnections of monotone systems with steady-state characteristics, in Optimal Control, Stabilization, and Nonsmooth Analysis, Eds: de Queiroz, M., M. Maliso-, and P. Wolenski, Springer-Verlag, Heidelberg, 2004, pp. 135–154.

[6] D. Angeli, J. E. Ferrell, Jr., and E. D. Sontag, Detection of multistability, bifurcations, and hysteresis in a large class of biological positive-feedback systems, Proceedings of the National Academy of Sciences USA 101, 1822–1827 (2004).

[7] M. Chaves and E. D. Sontag, "State-estimators for chemical reaction networks of Feinberg- Horn-Jackson zero-deficiency type," European J. Control (2002)8:343–359.

[8] P. De Leenheer, D. Angeli and E. D. Sontag, On predator-prey systems and small-gain theorems, submitted (Preliminary version entitled 'Small-gain theorems for predator-prey systems' has appeared in the Lecture Notes in Control and Information Sciences, 294, 191–198 (2003)).

[9] P. De Leenheer, D. Angeli and E. D. Sontag, Crowding effects promote coexistence in the chemostat, submitted (also DIMACS Tech report 2003–44; preliminary version entitled 'A feedback perspective for chemostat models with crowding effects' has appeared in the Lecture Notes in Control and Information Sciences, 294, 167–174 (2003).

[10] P. De Leenheer, S.A. Levin, E. D. Sontag and C.A. Klausmeier, Global stability in a chemostat with multiple nutrients, submitted (also DIMACS Tech report 2003–40).

[11] M. Feinberg, "Chemical reaction network structure and the stabiliy of complex isothermal reactors - I. The deficiency zero and deficiency one theorems," Review Article 25, Chemical Eng. Science (1987)42:2229–2268.

[12] M. W. Hirsch, Systems of differential equations which are competitive or cooperative I: limit sets, SIAM J. Appl. Math. 13, 167–179 (1982).

[13] M. W. Hirsch, Systems of differential equations which are competitive or cooperative II: convergence almost everywhere. SIAM J. Math. Anal. 16, 423–439 (1985).

[14] M. W. Hirsch, Systems of differential equations which are competitive or cooperative III: competing species, Nonlinearity 1, 51–71 (1988).

[15] M. W. Hirsch, Systems of differential equations which are competitive or cooperative IV: Structural stability in three dimensional systems, SIAM J. Math. Anal. 21, 1225–1234 (1990).

[16] M. W. Hirsch, Systems of differential equations which are competitive or cooperative V: Convergence in 3-dimensional systems, J. Diff. Eqns. 80, 94–106 (1989).

[17] M. W. Hirsch and H.L. Smith, Competitive and cooperative systems: a mini-review,Lecture Notes in Control and Information Sciences, 294, 183–190 (2003).

[18] M. W. Hirsch and H.L. Smith, Generic quasi-convergence for strongly order preserving semi- ows: a new approach, preprint.

[19] F. J. M. Horn, and R. Jackson, "General mass action kinetics," Archive for Rational Mechanics and Analysis (1972)49:81–116.

[20] J. F. Jiang, On the global stability of cooperative systems, Bull. London Math. Soc. 26, 455–458 (1994).

[21] H. Kunze and D. Siegel,Monotonicity properties of chemical reactions with a single initial bimolecular step, J. Math. Chem. 31, 339–344 (2002).

[22] J. Mierczynski, Strictly cooperative systems with a first integral, SIAM J. Math. Anal. 18, 642–646 (1987).

[23] M. Mincheva, D. Siegel, "Stability of mass action reaction diffusion systems," Nonlinear Analysis 56(2004): 1105–1131. 13

[24] A. J. Shapiro, "The statics and dynamics of multicell reaction systems," Ph.D. Thesis, The University of Rochester, 1975, 176pp. (http://wwwlib.umi.com/dissertations/fullcit/7614785)

[25] D. D. Siljak, Large-scale dynamic systems, Elsevier North-Holland, 1978.

[26] J. Smillie, Competitive and cooperative tridiagonal systems of differential equations, SIAM J. Math. Anal. 15, 530–534 (1984).

[27] H. L. Smith, Monotone Dynamical Systems, AMS, Providence, 1995.

[28] H. L. Smith and P. Waltman, The Theory of the Chemostat, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[29] E. D. Sontag, "Structure and stability of certain chemical networks and applications to the kinetic proofreading model of T-cell receptor signal transduction," IEEE Trans. Automatic Control (2001)46:1028–1047. Errata in IEEE Trans. Automatic Control (2002)47:705.

[30] A.I. Volpert, V.A.Volpert and V.A.Volpert, Traveling wave solutions of parabolic systems (AMS, Providence, 1994)

[31] S. Walcher, On cooperative systems with respect to arbitrary orderings, J. Math. Anal. Appl. 263, 543–554 (2001).

Fordította: Várdai Judit
matematikus PhD hallgató