

TÖMEGHATÁS TÍPUSÚ REAKCIÓDIFFÚZIÓ-RENDSZEREK STABILITÁSA

MAYA MINCHEVA ÉS DAVID SIEGEL

Fordította: Egri Edit

Kétféle típusú, megfordítható, illetve aciklikus gráffal megadott kémiai reakció stabilitásával kapcsolatos eredményeket terjesztünk ki reakciódifúzió-rendszerekre. Főként a Ljapunov-függvények módszerével igazoljuk a térben homogén stacionárius állapot aszimptotikus stabilitását. Néhány példával illusztráljuk az elmondottakat.

1. Bevezetés

Tekintsünk egy n anyagfajtából és m lépésből álló kémiai rendszert:

$$\sum_{k=1}^n \alpha_{ik} A_k \xrightarrow{k_i} \sum_{k=1}^n \beta_{ik} A_k \quad (i = 1, \dots, m). \quad (1)$$

Jelölje A_k , $k = 1, \dots, n$ a kémiai anyagfajtákat. A k_i konstans az i -edik reakció sebességi együtthatója és pozitív minden i -re. Az α_{ik}, β_{ik} nemnegatív egészek az i -edik reakcióban résztvevő részecskék számát adják meg. Jelölje u_k a reakcióban jelenlevő A_k anyagfajták koncentrációját. Feltételezve, hogy fennáll a tömeghatás törvénye, az i -edik reakció sebessége a következőképpen írható:

$$f_i(\mathbf{u}) = k_i u_1^{\alpha_{i1}} \dots u_n^{\alpha_{in}} \quad (i = 1, \dots, m).$$

Feltételezzük, hogy $(u_k)^0 = 1$, ha $u_k \geq 0$ ($k = 1, \dots, n$). Legyen $\gamma_{ik} = \beta_{ik} - \alpha_{ik}$ minden i, k esetén. A

$$\frac{du_k}{dt}(t) = \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i(\mathbf{u}(t)) \quad (k = 1, \dots, n) \quad (2)$$

$$u_k(0) = (u_k)^0 \geq 0 \quad (3)$$

⁰Ez a dolgozat fordítása a következőnek: Mincheva, M. and Siegel, D., "Stability of mass action reaction-diffusion systems", *Nonlinear Analysis*, 56(8)(2004) 1105–1131. A fordítás a T.047132 OTKA-pályázat támogatásával készült.

kezdetiérték-feladat u megoldása az A_k ($k = 1, \dots, n$) anyagfajták koncentrációjának időbeli változását adja meg. A (2)–(3) probléma nem függ a reakcióban résztvevő kémiai anyagfajták atomi felépítésétől. Érdi és Tóth [5]-ben rámutattak, hogy az atomfüggetlen sztöchiometria Volpert [18], valamint Horn és Jackson [7] írásával kezdődik. A (2)–(3) problémát kémiai kinetikai kezdetiérték-problémának nevezzük.

Volpert [19, 12. fejezet] tömeghatás típusú kémiai kinetikai kezdetiérték-problémák stabilitását tanulmányozza. Először egy aciklikus gráf (a fogalmat a 4. szakaszban értelmezzük) esetében mutatja ki: $u(t)$ -nek létezik határértéke, mikor $t \rightarrow +\infty$, és $\lim_{t \rightarrow +\infty} u(t) = \bar{u}$, ahol $\bar{u}$ stacionárius pont. Az eredményhez úgy jut el, hogy lineáris Ljapunov-függvényt alkalmaz, amelynek a megválasztása azonban nem egyértelmű. Ugyanazt a függvényt használja fel periodikus megoldás nemlétének kimutatására is.

Egy későbbi fejezetben, lásd [19, 635. oldal], a megfordítható reakciók elméletét tanulmányozza (értelmezésük az 5. fejezetben). Ez némiképp megegyezik a komplex kiegyensúlyozottság elméletével, amelyet Horn, Jackson és Feinberg dolgozott ki az 1970-es években, noha ez utóbbi általánosabb eredményhez vezet. [19, 642. oldal] tétele megfordítható reakciókra vonatkozó stabilitási eredményeket ír le. A bizonyítás felhasználja a (21) egyenletben szereplő nemlineáris Ljapunov-függvényt. Egy megoldás ω -határhalmaza vagy nemnegatív stacionárius pontokból vagy egyetlen pozitív stacionárius pontból áll. Mindegyik pozitív stacionárius pont benne van egy invariáns síkban. Ebben az invariáns síkban a megoldás relatíve aszimptotikusan stabilis, egyébként csak stabilis. A szerző a Ljapunov-függvény alkalmazásával igazolja azt is, hogy nem létezik periodikus pálya.

Ezek [19] eredményei, amelyeket itt kiterjesztünk reakciódiffúzió-rendszerekre. Munkánk a fentiekre épül és a [10, 11] írásokra.

Ebben a cikkben feltételezzük, hogy az u_k koncentrációk függenek az x térbeli változótól is. Ennek következtében reakciódiffúzió-egyenletrendszert kapunk a megfelelő kezdetiérték- és peremfeltétellel:

$$\frac{\partial u_k}{\partial t}(x, t) = d_k \Delta_k u(x, t) + \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i(u(x, t)), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (4)$$

$$u_k(x, 0) = (u_k)_0(x) \geq 0, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial u_k}{\partial \nu}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T], \quad (6)$$

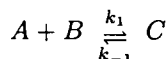
ahol $k = 1, \dots, n$. T lehet $+\infty$ is, amikor stabilitást tárgyalunk. Jelölje $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ az n számú u_k ($k = 1, \dots, n$) koncentrációból alkotott vektort. Feltételezzük, hogy az összes d_k diffúziós együttható állandó és $d > 0$ -val egyenlő. Az Ω halmaz $\mathbb{R}^s$ -beli ($s > 0$) korlátos tartomány, megfelelően sima határral. Az (1) kémiai rendszert zártnak tekintjük abban az értelemben, ami zéró fluxusú peremfeltételnek felel meg. A ν vektor a külső (kifelé mutató) normális egységvektor Ω határán, $\partial\Omega$ -n.

[9]-ből tudjuk, hogy $u(x, t) \geq 0$ minden $x \in \Omega$ és $t \geq 0$ esetén mindaddig, míg létezik a megoldás. Csak olyan $u_0(x) \geq 0$ kezdeti értékeket fogunk tekinteni, amelyekre $u(x, t) > 0$ teljesül minden $(x, t) \in \bar{\Omega} \times (0, T]$ esetén. Ezt a típusú szigorú pozitivitást [9] tárgyalja.

A parciális differenciálegyenlet felállításánál tekintsük a Volpert által tanulmányozott két típusú rendszert. Mindkét esetben Ljapunov-függvényt használva megmutatjuk, hogy a PDE-nek létezik olyan megoldása, amely $\forall t > 0$ esetére értelmezve van.

Fő eredményeink a következők: aciklikus gráf esetén $u(x, t)$ olyan állandó megoldáshoz, $\bar{u}$ -hoz konvergál, amint $t \rightarrow +\infty$, amely a megfelelő közöséges differenciálegyenlet-rendszer (KDE-rendszer) stacionárius pontja. Megfordítható reakciók esetén a megoldás ω -határhalmaza vagy egyetlen pozitív stacionárius pontja lesz, vagy pedig nemnegatív stacionárius pontjai lesznek a megfelelő KDE-rendszernek.

Érdekes lesz megvizsgálni a fenti rendszer megoldásának stabilitását, mikor a diffúziós együtthatók különbözőek. Először igazolnunk kell, a Ljapunov-függvénytől eltérő módszert használva, hogy az $u(x, t)$ megoldás létezik minden $t \geq 0$ esetén. Például néhány sajátos esetben alkalmazhatók az invariáns téglalapok, lásd [3]. Az egyedüli eredmény¹ ez irányban, amiről tudomásunk van, félcsoportelméletet használ annak igazolására, hogy az



reakcióban szereplő anyagfajták koncentrációja térben homogén stacionárius pont-hoz tart [13]. Ugyanaz a stabilitási eredmény áll fenn, mint amelyet itt mutatunk be (lásd 3. példa), amikor a három diffúziós együttható különbözik. Ugyanezen kémiai kinetikai kezdeti-peremérték feladat megoldásának globális létezését igazolják [2]-ben, a priori korlátokat használva. Viszont a stabilitás kérdését [2] nem tárgyalja.

Írásunk a következőképpen épül fel: a 2. fejezet háttértájékoztatót tartalmaz. A fő eredményeket a 3. fejezetben jelentjük ki, és a 4. és 5. fejezetben bizonyítjuk be. A 6. fejezet példákat tartalmaz. Az 5. fejezetbeli eredmények kibővítését megfordítható reakciókról gyengén megfordítható esetekre a 7. fejezet vázolja.

¹Néhány további eredmény található itt:

- R.H. Martin, Lecture notes in mathematics; Nonlinear semigroups, partial differential equations and attractors; Proceedings of a symposium held in Washington, D.C., August 5–8, 1985, Springer-Verlag, page 121, Proposition 2.
- A.M. Turing, The chemical basis of morphogenesis, Phil. Trans. Roy. Soc. London, B237, 37–72 (1952) (Two variable systems)
- George R. Gavalas: Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems, Springer-Verlag New York Inc. 1968, pages 86–96 (Stability of nonconstant stationary states).(A fordító)

2. Néhány jelölés, feltevés és felhasznált eredmény

Az u függvény értékkészlete $\mathbb{R}^n$ -beli, és $\mathbb{R}^n$ -ben az euklideszi normát $\|\cdot\|$ jelöli. Az $u > 0$, ill. $u \geq 0$ jelölés jelentése: $u_k > 0$, ill. $u_k \geq 0$, minden $k = 1, \dots, n$ esetén. A $w : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^n$ Hölder-folytonos függvény esetén jelölje $\|\cdot\|_\alpha$, $0 < \alpha \leq 1$ a Hölder-normát,

$$\|w\|_\alpha := \sup_{\substack{x \neq y \\ x, y \in \bar{\Omega}}} \frac{\|w(x) - w(y)\|}{\|x - y\|^\alpha}.$$

Ha w a $C^{2+\alpha}(\bar{\Omega})$ Banach-térből van, akkor

$$\|w\|_{2+\alpha} := \|w\|_\infty + \sum_{p=1}^s \left\| \frac{\partial w}{\partial x_p} \right\|_\infty + \sum_{p,r=1}^s \left\| \frac{\partial^2 w}{\partial x_p \partial x_r} \right\|_\infty + \sum_{p,r=1}^s \left\| \frac{\partial^2 w}{\partial x_p \partial x_r} \right\|_\alpha, \quad (7)$$

ahol $\|\cdot\|_\infty$ a szuprémumnorma. A (7) definíció első három tagja a $C^2(\bar{\Omega})$ tér normáját képezi. Ezt jelölje $\|\cdot\|_2$.

Ω határa, $\partial\Omega$, $C^{2+\alpha}$ sima. Szükségünk van mindezen technikai feltételezésekre, hogy biztosítsuk a lokális megoldás létezését. Egy pillanatra sokkal általánosabb rendszerre térünk át:

$$u_t(x, t) = d\Delta u(x, t) + g(u(x, t)), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (8)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \geq 0, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T]. \quad (10)$$

Tekintsük az alábbi tételt. Első része a lokális létezésre vonatkozólag [1]-ből származik, míg a második, $C^{2+\alpha}$ -beli globális korlátosságról szóló, [12]-ből.

2.1. TÉTEL. *Feltételezzük, hogy $d > 0$, $u_0 \in C^{2+\alpha}(\bar{\Omega})$ és $\partial u_0 / \partial \nu = 0$ $\partial\Omega$ -n. Feltételezzük továbbá, hogy g lokálisan Lipschitz-tulajdonságú függvény. Akkor létezik $T > 0$ úgy, hogy a (8)–(10) rendszernek egyetlen lokális klasszikus megoldása van, $u \in C^2(\Omega \times [0, T]) \cap C^1(\bar{\Omega} \times [0, T])$. Ha találunk egy a priori becslést*

$$\|u(x, t)\| \leq K, \quad (11)$$

úgy, hogy K független t -től, akkor minden $t > 0$ esetén a megoldás létezik és korlátos $C^{2+\alpha}(\bar{\Omega})$ -ban,

$$\sup_{t \geq 0} \|u(x, t)\|_{2+\alpha} = K_1 < +\infty.$$

Az u függvény globális korlátossága, amely a (11) becslésből adódik, biztosítja, hogy az $\{u(x, t) | t \geq 0\}$ halmaz relatív kompakt halmaz $C^2(\bar{\Omega})$ -ban. A kompakt halmaz értelmezése szerint, ha adott egy $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ sorozat, akkor létezik ennek olyan $\{\tau_k\} \rightarrow +\infty$ részsorozata, amelyre

$$v = \lim_{k \rightarrow \infty} u(\cdot, \tau_k) \quad C^2(\bar{\Omega})\text{-ban.}$$

Bevezetjük a (8)–(10) rendszer u megoldásához tartozó ω -határhalmaz fogalmát, mikor $T = +\infty$.

2.1. Definíció. Az u megoldás ω -határhalmaza a következő függvények halmaza:

$$\omega^+ = \left\{ v \in C^2(\overline{\Omega}) \mid \lim_{k \rightarrow +\infty} \|u(\cdot, t_k) - v\|_2 = 0, \right. \\ \left. \text{valamilyen } \{t_k\} \rightarrow +\infty \text{ sorozat esetén} \right\}.$$

[11] 1. tétele szerint az ω^+ halmaz nem üres és kompakt részhalmaza $C^2(\overline{\Omega})$ -nak, ha u korlátos $C^{2+\alpha}(\overline{\Omega})$ -ban.

Idézzünk néhány lemmát [10]-ből, mivel szükségünk lesz rájuk a továbbiakban. A bizonyítások és hivatkozások [10]-ben elérhetőek.

2.1. LEMMA. Ha a $\varphi, \psi \in C^2(\Omega \times (0, T]) \cap C^1(\overline{\Omega} \times [0, T])$ függvények teljesítik a

$$\varphi_t(x, t) \leq L(\varphi)(x, t) + g(\varphi(x, t)),$$

illetve

$$\begin{aligned} \psi_t(x, t) &\geq L(\psi)(x, t) + g(\psi(x, t)), & (x, t) &\in (\Omega \times (0, T]), \\ \varphi(x, 0) &\leq \psi(x, 0), & x &\in \overline{\Omega}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \nu}(x, t) &\leq \frac{\partial \psi}{\partial \nu}(x, t), & (x, t) &\in (\partial\Omega \times (0, T]), \end{aligned}$$

feltételeket, ahol L egyenletesen elliptikus operátor és g lokálisan Lipschitz-tulajdonságú függvény, akkor $\varphi(x, t) \leq \psi(x, t)$, ha $(x, t) \in \overline{\Omega} \times [0, T]$.

2.2. LEMMA. Feltételezzük, hogy a $\varphi \in C^2(\Omega \times (0, T]) \cap C^1(\overline{\Omega} \times [0, T])$ függvény teljesíti a

$$\begin{aligned} \varphi_t(x, t) &= d\Delta\varphi(x, t) & (x, t) &\in \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \nu}(x, t) &= 0 & (x, t) &\in \partial\Omega \times (0, \infty) \end{aligned}$$

feltételeket, és hogy $\varphi(\cdot, 0) \in C^{2+\alpha}(\overline{\Omega})$. Ekkor

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\varphi(\cdot, t) - c\|_2 = 0,$$

ahol

$$c := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varphi(x, 0) \, dx,$$

$|\Omega|$ pedig Ω térfogatát jelenti.

2.3. LEMMA. Feltételezzük, hogy u és v olyan megoldása a (8)–(10) rendszernek, amelyek kezdeti értékei teljesítik az alábbi feltételt:

$$\|u(x, 0) - v(x, 0)\| \leq \rho \quad (x \in \bar{\Omega}).$$

Ha $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ kielégíti a Lipschitz-féle feltételt, vagyis

$$\|g(z) - g(z')\| \leq M \|z - z'\|,$$

akkor

$$\|u(x, t) - v(x, t)\| \leq \rho e^{Mt} \quad (x, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T].$$

2.4. LEMMA. Tegyük fel, hogy a V függvényre teljesül a $V_t(x, t) - d\Delta V(x, t) \leq 0$ egyenlőtlenség, ha

$$(x, t) \in \Omega \times (0, +\infty) \quad \text{és} \quad \partial V(x, t)/\partial \nu = 0, \quad \text{ha} \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, +\infty).$$

Feltételezzük, hogy V alulról korlátos. Akkor a

$$h(t) := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} V(x, t) \, dx$$

függvény csökkenő, valamint $\lim_{t \rightarrow +\infty} h(t) = a$ és $\lim_{t \rightarrow +\infty} V(x, t) = a$, egyenletesen $C^2(\bar{\Omega})$ -ban.

3. A fő eredmények megfogalmazása

A (2)–(3) rendszer bármely u megoldása, mikor nincs jelen diffúzió, benne marad egy invariáns síkban. Legyen $\Gamma = (\gamma_{ik})$ a (2) egyenletben szereplő együtthatók $m \times n$ -es mátrixa, és legyen $\{\lambda_l\}$ a $\Gamma\lambda = 0$ rendszer alapmegoldásainak halmaza. Ha $\text{rang}(\Gamma) = r$, akkor létezik $n - r$ számú lineárisan független megoldás: $\lambda_l, l = 1, 2, \dots, (n - r)$. Ezek egy olyan Λ mátrixot alkotnak, melynek sorai $\lambda_l^T, l = 1, \dots, (n - r)$. A Λ mátrix $(n - r) \times n$ -es. A π invariáns síkot a következőképpen értelmezzük

$$\pi(u_0) = \{u \in \mathbb{R}^n \mid \Lambda(u - u_0) = 0\},$$

ahol u_0 állandó vektor. Ha $u(0) \in \pi(u_0)$ akkor $u(t) \in \pi(u_0)$, lásd [19, 637. oldal].

Most egy hasonló eredményt mutatunk be a (4)–(6) PDE-rendszer u megoldásairól, feltételezve, hogy a megoldások minden $t \geq 0$ esetén léteznek. Skalárisan megszorozzuk (4)-et Λ soraival, λ_l^T -vel, $l = 1, \dots, n - r$. Felhasználva, hogy $\lambda_l^T \Gamma^T = 0$, következik, hogy $(\Lambda u)_t = d\Delta(\Lambda u)$. Miután alkalmazzuk Λ -t $u_0(x)$ -ra, a kezdetiérték $\Lambda u_0(x)$ lesz. A peremfeltételre pedig kapjuk

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Lambda \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial(\Lambda u)}{\partial \nu} = 0.$$

Ha most $w(\mathbf{x}, t) := \Lambda u(\mathbf{x}, t)$, akkor erre a következő rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} w_t(\mathbf{x}, t) &= d\Delta w(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) &\in \Omega \times (0, \infty), \\ w(\mathbf{x}, 0) &= \Lambda u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} &\in \bar{\Omega}, \\ \frac{\partial w}{\partial \nu} &= 0, & (\mathbf{x}, t) &\in \partial\Omega \times (0, \infty). \end{aligned}$$

A 2.2. lemma szerint

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|w(\cdot, t) - \hat{c}\|_2 = 0, \quad \hat{c} := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \Lambda u_0(\mathbf{x}) \, dx.$$

Most bevezetünk egy formális definíciót $\hat{\pi}(u_0(\mathbf{x}))$ -re, az invariáns határsíkra:

3.1. Definíció. A (4)–(6) rendszer egy megoldására nézve (amelyről feltételezzük, hogy létezik $\forall t \geq 0$ -ra), invariáns határsíknak nevezzük az alábbi halmazt

$$\hat{\pi}(u_0) = \{u \in \mathbb{R}_+^n \mid \Lambda u = a\},$$

ahol

$$a := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \Lambda u_0(\mathbf{x}) \, dx.$$

Megemlítettük, hogy Ljapunov-függvényeket fogunk használni a fő eredmények bizonyításában. Aciklikus gráf esetén (lásd 4. fejezet) a Ljapunov-függvény (14) alakú. Megfordítható reakciók esetén (lásd 5. fejezet) a Ljapunov-függvény (21) alakú.

Most a fontosabb tételek kimondásával folytatjuk, amelyeket az aciklikus gráffal rendelkező és a megfordítható reakciók esetén külön-külön bebizonyítunk. Az alábbi két tételben – a megfordítható reakciók esetében – feltételezzük, hogy teljesül az A Feltétel (lásd 5. fejezet).

3.1. TÉTEL. Tekintsük a (4)–(6) rendszert aciklikus gráf, illetve megfordítható reakciók esetében. Mutatunk egy (11) típusú a priori becslést, ennél fogva $u(\mathbf{x}, t)$ globálisan létezik $\forall t \geq 0$ mellett. Az ω^+ -határhalmaz kizárólag konstans függvényeket tartalmaz. Ez azt jelenti, hogy ha $c \in \omega^+$, akkor $c \in \mathbb{R}^n$ és létezik olyan $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ sorozat, amellyel

$$\lim_{t_k \rightarrow +\infty} \|u(\cdot, t_k) - c\|_2 = 0.$$

A lenti tétel a [11]-ben található 2. tételen alapszik. Ez utóbbi egy általánosítása a La Salle–Ljapunov-féle tételnek parabolikus egyenletrendszerekre. A szerzők utalnak egy problémára abban az esetben amikor $V_{uu} \geq 0$ teljesül $V_{uu} > 0$ helyett, de ez nem befolyásolja tételük ide vonatkozó részét.

3.2. TÉTEL. *Feltéve, hogy a 3.1. tétel feltételei teljesülnek, az ω^+ határhalmaz a $\hat{\pi}(u_0)$ invariáns határsíkban fekszik. Az invariáns határsík pozitív invariáns halmaza a megfelelő KDE-rendszernek. Jelölje H vagy a (14)-ban szereplő F Ljapunov-függvényt, vagy V -t (26)-ban, (2)-(3) egy u megoldása mentén. Ekkor $\dot{H} = \nabla H \cdot (\Gamma^T f)$.*

Az ω^+ határhalmaz, mint $\mathbb{R}^n$ részhalmaza, invariáns halmaza a megfelelő $\dot{u} = \Gamma^T f \circ u$ KDE-rendszernek és $\dot{H}$ eltűnik ω^+ -ban.

Aciklikus gráf esetén az ω^+ halmaz csak egyetlen pontot tartalmaz. Ha a reakció megfordítható, ω^+ vagy egyetlen pozitív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pontból áll, vagy pedig a $\hat{\pi}(u_0)$ határsíkbeli nemnegatív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pontokból. Minden pozitív stacionárius pont aszimptotikusan stabilis az azonos invariáns határsíkokkal rendelkező megoldások között.

A részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pontokat az 5. fejezetben értelmezzük. Ezek stacionárius pontok. A 3.2. tétel értelmében ω^+ részhalmaza az invariáns határsíknak, és részhalmaza a KDE-re vonatkozó legnagyobb olyan invariáns halmaznak, ahol $\dot{H}$ eltűnik. Tulajdonképpen a [10]-ben szereplő 2.4. lemma szerint, mivel $\forall t \geq 0$ esetén létezik és korlátos az u megoldás, ezért

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \text{dist}(u(\cdot, t), \omega^+) = 0,$$

ahol dist a C^2 -norma szerinti távolság. A következő tétel azt állítja, hogy a (4)–(6) rendszernek nincs periodikus megoldása.

3.3. TÉTEL. *Aciklikus gráf vagy megfordítható reakciók esetén (4)–(6) nem rendelkezik nemnegatív, nemkonstans periodikus megoldással.*

A 3.1–3.3. tételt kiterjesztjük gyengén megfordítható esetekre is a 7. szakaszban.

4. Aciklikus gráfok esete

Volpert a [18] cikkben a kémiai reakció fogalmát mint gráfot vezeti be. Erre a gráfra Volpert-gráf néven hivatkozunk, lásd [5]. Egy kémiai reakció Volpert-gráfiának csúcsai két halmazba sorolhatók. Az egyikbe a kémiai reakcióban résztvevő $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ anyagfajtákat soroljuk, míg a másikba a $B = \{B_1, \dots, B_m\}$ reakciólépéseket. Ha a B_i reakcióban α_{ik} egység (molekula, atom) A_i anyag vesz részt, ezt a gráf (A_k, B_i) élén α_{ik} súllyal jelöljük. Hasonlóképpen rendelünk a (B_i, A_k) élhez β_{ik} súlyt, amely arra utal, hogy β_{ik} egység A_k anyag keletkezett a B_i reakciólépés során. Ha $\alpha_{ik} = 1$ vagy $\beta_{ik} = 1$, akkor ezt a Volpert-gráf élein nem tüntetjük fel. Azokat a gráfokat, amelyek csúcsait két diszjunkt halmazba sorolhatjuk, páros gráfoknak nevezzük. Bővebb magyarázatok és példák [19, 608–609. oldal]-on találhatók.

Most megmagyarázzuk az aciklikus gráf fogalmát. Ez olyan gráf, amely nem tartalmaz köröket, azaz a páros Volpert-gráfban nem létezik olyan útvonal (irányított élek sorozata), amely több mint egyszer halad keresztül egy csúcson. Az aciklikus gráf valamelyest ellentettje a Horn, Jackson és Feinberg elmélete szerinti megfordítható (lásd a következő fejezetben) vagy gyengén megfordítható gráfoknak. Ennek ellenére a kapott eredmény tipikus viselkedést mutat: konvergenciát egy térben homogén stacionárius állapothoz.

Itt a Λ mátrix jelentése eltér a 3. fejezetben szereplőétől. Tekintsük az

$$L_i(\lambda) = \sum_{k=1}^n \gamma_{ik} \lambda_k \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (12)$$

egyenlőtlenségrendszer λ megoldásait. Ez a rendszer n lineárisan független nemnegatív megoldással rendelkezik, jelölje ezeket λ^l ($l = 1, \dots, n$), lásd [19, a 624. oldal tétele]. Tekintsük a Λ mátrixot $(\lambda^1)^T, \dots, (\lambda^n)^T$ sorokkal. Ez alsó háromszög-mátrix, az átlóján 1-esekkel. A [19, 626. oldal] következményének értelmében létezik olyan megoldás, legyen ez épp λ^n , amely pozitív vektor, és amelyre (12) szigorú egyenlőtlenséggé válik, azaz

$$\mu_i := \sum_{k=1}^n \gamma_{ik} \lambda_k^n < 0 \quad (i = 1, \dots, m). \quad (13)$$

Legyen

$$F(\mathbf{u}) := \sum_{k=1}^n \lambda_k^n u_k \quad (14)$$

a (4)–(6) reakciódifúzió-rendszer Ljapunov-függvénye aciklikus gráf esetén. Ugyanezt a Ljapunov-függvényt használja [19, 633. oldal] a megfelelő KDE-rendszerre.

Bizonyítás. (3.1. tétel)

Először $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ globális létezésével foglalkozunk. $F(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t))$ -re egy differenciális egyenlőtlenséget alkalmazunk, így igazoljuk $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ globális korlátosságát, mikor $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, +\infty)$. Tekintsük az alábbi összefüggést

$$\begin{aligned} (F \circ \mathbf{u})_t - d\Delta(F \circ \mathbf{u}) &= \sum_{k=1}^n \lambda_k^n \left(\frac{\partial u_k}{\partial t} - d\Delta u_k \right) = \sum_{k=1}^n \lambda_k^n \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i \circ \mathbf{u} = \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^n \lambda_k^n \gamma_{ik} f_i \circ \mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mu_i f_i \circ \mathbf{u} \leq 0. \end{aligned}$$

Az utolsó egyenlőtlenség (13)-ból és $f_i \circ \mathbf{u} \geq 0$ -ból következik, mivel $f_i \circ \mathbf{u}$ [9] szerint az $u_k \geq 0$ ($k = 1, \dots, n$) nemnegatív koncentrációk szorzata. Mivel $\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) \geq 0$, az $(F \circ \mathbf{u})(\mathbf{x}, 0)$ kezdeti érték az alábbi összefüggést elégíti ki:

$$(F \circ \mathbf{u})(\mathbf{x}, 0) = \sum_{k=1}^n \lambda_k u_k(\mathbf{x}, 0) \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Mivel u teljesíti a (6) egyenletet, következik, hogy

$$\frac{\partial(F \circ u)}{\partial \nu} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{\partial u_k}{\partial \nu} = 0.$$

Tehát $(F \circ u)(\mathbf{x}, t)$ -re teljesülnek az alábbiak:

$$\begin{aligned} (F \circ u)_t(\mathbf{x}, t) - d\Delta(F \circ u)(\mathbf{x}, t) &\leq 0, & (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T], \\ (F \circ u)(\mathbf{x}, 0) &\geq 0, & \mathbf{x} \in \bar{\Omega} \\ \frac{\partial(F \circ u)}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) &= 0, & (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T]. \end{aligned}$$

Most alkalmazzuk a 2.1. lemmát $\varphi = F \circ u$ és $\psi = \xi$ esetében, ahol

$$\xi \geq \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} F(u(\mathbf{x}, 0)).$$

Kapjuk, hogy $0 \leq F(u(\mathbf{x}, t)) \leq \xi$, és ezért $0 \leq u_k(\mathbf{x}, t) \leq \delta$ ($k = 1, \dots, n$). A δ konstans csak ξ -től függ, azaz az $(F \circ u)(\cdot, 0)$ kezdetiérték-függvénytől és T -től nem. Mivel a megoldásnak euklideszi normában T -től független korlátja van, a 2.1. tétel értelmében u korlátos $C^{2+\alpha}(\bar{\Omega})$ -ban, azaz

$$\sup_{t \geq 0} \|u(\cdot, t)\|_{2+\alpha} = K_1 < +\infty. \quad (15)$$

Így igazoltuk, hogy $u(\mathbf{x}, t)$ létezik, $\forall t \geq 0$ -ra.

Legyen $v \in \omega^+$. (15)-ből következik, hogy létezik olyan $\{t_k\}$ sorozat, amelyre $t_k \rightarrow +\infty$ és

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u(\cdot, t_k) = v \quad C^2(\bar{\Omega}) \text{ - ban.}$$

Ki fogjuk mutatni, hogy $\nabla u(\mathbf{x}, t_k) \rightarrow 0$ $\mathbf{x}$ -ben egyenletesen konvergál, mikor $\{t_k\} \rightarrow +\infty$. Ebből következni fog, hogy a $v(\mathbf{x})$ állandó vektor, vagy $\nabla v(\mathbf{x}) = 0$. A $\Lambda = (\lambda_k^l)$ mátrix olyan alsó háromszög-mátrix, amelyre $\lambda_k^l = 1$, ha $k = l$; $\lambda_k^l = 0$, ha $k > l$; és $\lambda_k^l \geq 0$, ha $k < l$.

Tekintsük az

$$(F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^n \lambda_k^l u_k(\mathbf{x}, t), \quad l = 1, \dots, n \quad (16)$$

függvényeket. Mivel $u_k(\mathbf{x}, t) \geq 0$, mindegyik $(F \circ u)^{(l)} \geq 0$, és

$$\begin{aligned} (F \circ u)_t^{(l)} - d\Delta(F \circ u)^{(l)} &= \sum_{k=1}^n \lambda_k^l \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i \circ u = \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\sum_{k=1}^n \lambda_k^l \gamma_{ik} \right) f_i \circ u = \sum_{i=1}^m L_i(\lambda^l) f_i \circ u \leq 0, \end{aligned}$$

mivel (12) szerint $L_i(\lambda^l) \leq 0$, és $f_i \circ u \geq 0$ ($i = 1, \dots, m$).

Tekintsük továbbá a következő integrálokat:

$$I^{(l)}(t) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} [(F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t)]^2 dx \geq 0.$$

Ha ezt deriváljuk, a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{I}^{(l)}(t) &= \int_{\Omega} (F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t) (F \circ u)_t^{(l)}(\mathbf{x}, t) dx \leq \\ &\leq d \int_{\Omega} (F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t) \Delta (F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t) dx = \\ &= -d \int_{\Omega} \left\| \nabla_x (F \circ u)^{(l)}(\mathbf{x}, t) \right\|^2 dx \leq 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Ez utóbbi számolásnál felhasználtuk az

$$(F \circ u)^{(l)}(F \circ u)_t^{(l)} \leq d(F \circ u)^{(l)} \Delta (F \circ u)^{(l)}$$

összefüggést, a divergencia tételét és a zéró fluxusú peremérték-feltételt, amely teljesül $F^{(l)}$ -re $\forall l$ esetén. Az $I^{(l)}$ függvény monoton csökkenő, alsó korlátja 0. Így a

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} I^{(l)}(t) = a_l \geq 0$$

határérték létezik, és minden $l = 1, \dots, n$ esetén

$$\dot{I}^{(l)}(t) \rightarrow 0, \text{ mikor } t \rightarrow +\infty. \quad (18)$$

(18) érvényessége attól függ, hogy $\dot{I}^l(t)$ korlátos-e, ha $t \rightarrow +\infty$, lásd [14, 101. oldal]. $(F \circ u)_{tt}^{(l)}$ korlátossága (vagy, ami ezzel egyenértékű: u_{tt} korlátossága) [4, 16, 225–226. oldal] érveléséhez hasonlóan bizonyítható. A 2.1. tételből már tudjuk, hogy

$$\sup_{t \geq 0} \|u(\cdot, t)\|_{2+\alpha} = K_1.$$

Vegyük (4)-ből a k -adik egyenletet $T = +\infty$ -re, és legyen $w(\mathbf{x}, t) := u_k(\mathbf{x}, t)$, valamint

$$g := \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i.$$

Tehát egy adott időpontban csak egy egyenletet tekintünk:

$$w_t(\mathbf{x}, t) = d \Delta w(\mathbf{x}, t) + g(u(\mathbf{x}, t)),$$

ahol $g \circ u$ differenciálható és egyenletesen korlátos $\bar{\Omega} \times [0, \infty)$ -ben. Figyeljük meg, hogy ez utóbbi azért igaz, mivel $g(u(\mathbf{x}, t))$ olyan u_i -k szorzata, amelyek nemnegatív

egész hatványokra vannak emelve. Az [1]-ben szereplő 1. tétel szerint $w(\cdot, t)$ korlátos $C^{2+\alpha}$ -ban, $\forall t \geq 0$ -ra, tehát w_t egyenletesen korlátos $\forall t \geq 0$ -ra $C^\alpha(\bar{\Omega})$ -ban. Mivel ez utóbbi fennáll minden u_k -ra ($k = 1, \dots, n$), u_t egyenletesen korlátos $C^\alpha(\bar{\Omega})$ -ban. Deriváljuk a fenti egyenletet t szerint:

$$w_{tt} = d\Delta w_t + \nabla_{\mathbf{u}} g \circ \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_t.$$

A reakciós tag ismét egyenletesen korlátos minden $t \geq 0$ esetén. Ebből következik, hogy $w_t \in C^{2+\alpha}$, tehát w_{tt} egyenletesen korlátos $\forall t \geq 0$ mellett, lásd [16, 225. oldal]. Így u_{tt} egyenletesen korlátos, és ennél fogva $(F \circ \mathbf{u})_{tt}^{(l)}$ is az. (18) és (17) szerint ebből az következik, hogy $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ esetében

$$\nabla_x (F \circ \mathbf{u})^{(l)}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = 0, \forall l.$$

Tekintsük rendre az $F^{(l)}(\mathbf{v}(\mathbf{x}))$ -eket ($l = 1, \dots, n$). Ha $l = 1$, akkor

$$F^{(1)}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = v_1(\mathbf{x}),$$

azaz $\nabla v_1 = 0$. Ha $l = 2$, $F^{(2)}(\mathbf{v}) = \lambda_1^2 v_1 + v_2$, és következik, hogy $\lambda_1^2 \nabla v_1 + \nabla v_2 = 0$, innen pedig

$$\nabla v_2 = (\lambda_1^2 \nabla v_1 + \nabla v_2) - \lambda_1^2 \nabla v_1 = 0.$$

Alkalmazzuk a matematikai indukciót. Feltételezzük, hogy

$$\nabla v_k = 0, k = 1, \dots, j-1.$$

Használva az

$$(F \circ \mathbf{u})^{(j)}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = \sum_{k=1}^{j-1} \lambda_k^j v_k(\mathbf{x}) + v_j(\mathbf{x})$$

összefüggést és alkalmazva a

$$\nabla (F \circ \mathbf{u})^{(j)} = 0, \nabla v_k = 0, (k = 1, \dots, j-1)$$

egyenlőségeket, következik, hogy:

$$\nabla v_j = \left(\sum_{k=1}^{j-1} \lambda_k^j \nabla v_k + \nabla v_j \right) - \sum_{k=1}^{j-1} \lambda_k^j \nabla v_k = 0.$$

Tehát $\nabla(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = 0$ bármely $\mathbf{x} \in \Omega$ mellett. Ezért $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}$, ahol $\mathbf{c}$ konstans vektor. Ezzel a 3.1. tétel bizonyítását befejeztük. $\square$

Megjegyzés. A [11]-ben lévő elmélet nem alkalmazható a (14)-ben szereplő lineáris Ljapunov-függvény esetében. Az

$$(F \circ u)_t - d\Delta(F \circ u) \leq 0$$

művelet elvégzése után az egyenlőtlenség bal oldalán nem fog szerepelni a $-c \|\nabla_x u\|$, $c > 0$ tag.

Bizonyításunk során egy energiát jelentő integrált használtunk, hogy megkapjuk u gradiensét.

Bizonyítás. (3.2. tétel)

Csak a bizonyítás második felét ismertetjük. A [11] 2. tétele szerint az ω^+ határhalmaz, mint $\mathbb{R}^n$ részhalmaza, invariáns halmaza az $\dot{u} = \Gamma^T f(\cdot, u)$ KDE-rendszernek és $\dot{H}(u)$ eltűnik az ω^+ halmazon.

Kimutatjuk, hogy $\omega^+ \subset \hat{\pi}(u_0(x))$. Amint korábban bizonyítottuk, ha $v \in \omega^+$, akkor létezik olyan $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ sorozat, hogy $u(x, t_k) \rightarrow v(x)$ x -ben egyenletesen. A 3.1. tétel értelmében $v(x) = p$, ahol p konstans. Tehát $\Lambda u(x, t_k) \rightarrow \Lambda p$, mikor $\{t_k\} \rightarrow +\infty$. Viszont a 2. értelmezés szerint $\Lambda u(x, t) \rightarrow a$, ha $t \rightarrow +\infty$. Így $\Lambda p = a$ és $p \in \hat{\pi}(u_0(x))$. Az invariáns sík definíciójából könnyen következik, hogy $\hat{\pi}(u_0(x))$ pozitív invariáns a (2)–(3) KDE-rendszerre nézve.

Felhasználjuk azt a tényt, hogy ω^+ részhalmaza az alábbi halmaznak:

$$\left\{ u \in \mathbb{R}^n \mid \dot{H}(u) = \sum_{i=1}^m \mu_i f_i(u) = 0 \right\},$$

ahol μ_i az, amit (13) értelmez. Aciklikus gráf esetén

$$\omega^+ \subset \{u \in \mathbb{R}^n \mid f_i(u) = 0, \forall i = 1, \dots, m\}.$$

Ebből következik, hogy legalább egy k értékre $u_k = 0$ ($k = 1, \dots, n$). Tehát egyes kémiai anyagfajták elfogynak, amire a reakció véget ér.

Most kimutatjuk, hogy ω^+ csak egyetlen pontot tartalmaz. Felhasználjuk a (16)-ban értelmezett F^l ($l = 1, \dots, n$) függvényeket. Tekintsük a

$$G^{(l)}(t) := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} F^{(l)}(u(x, t)) \, dx$$

integrálokat. Mivel $F^{(l)}(u(x, t)) \geq 0$, következik, hogy $G^{(l)}(t) \geq 0$. Majd felhasználva a

$$\partial F^{(l)} / \partial \nu = 0, \quad F_t^{(l)} - d\Delta F^{(l)} \leq 0$$

összefüggéseket és a divergencia tételét, kapjuk:

$$\frac{dG^{(l)}}{dt} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (F \circ u)_t^{(l)} \leq \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} d\Delta F^{(l)} = 0.$$

Tehát $G^{(l)}(t) \rightarrow g^{(l)}$, ha $t \rightarrow +\infty$, ahol $g^{(l)}$ -ek állandók ($l = 1, \dots, n$). Ezért, ha $t \rightarrow +\infty$, felírhatjuk, hogy

$$G^{(1)}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_1(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \rightarrow g^{(1)} = p_1,$$

$$G^{(2)}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\lambda_1^2 u_1(\mathbf{x}, t) + u_2(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} \rightarrow g^{(2)} = \lambda_1^2 p_1 + p_2,$$

$\vdots$

$$G^{(n)}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \left(\sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k^n u_k(\mathbf{x}, t) + u_n(\mathbf{x}, t) \right) \, d\mathbf{x} \rightarrow g^{(n)} = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k^n p_k + p_n.$$

Mivel mindegyik $G^{(i)}$ konvergens, ha $t \rightarrow +\infty$, következik, hogy

$$\mathbf{U}(t) := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{p}, \quad t \rightarrow +\infty.$$

Legyen $\mathbf{q} \in \omega^+$, vagyis bizonyos $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ esetén $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k) \rightarrow \mathbf{q}$, ha $k \rightarrow +\infty$. Feltételezzük, hogy létezik egy másik $\{\tau_k\} \rightarrow +\infty$ sorozat, amelyre

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \tau_k) \rightarrow \hat{\mathbf{q}}, \quad k \rightarrow +\infty \quad \text{és} \quad \mathbf{q} \neq \hat{\mathbf{q}}.$$

Ekkor viszont $\mathbf{U}(t_k) \rightarrow \mathbf{q}$ és $\mathbf{U}(\tau_k) \rightarrow \hat{\mathbf{q}}$, $k \rightarrow +\infty$. Ez azonban ellentmond annak, hogy $\mathbf{U}(t) \rightarrow \mathbf{p}$, ha $t \rightarrow +\infty$. Ténylegesen $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{p}$, ha $t \rightarrow +\infty$. $\square$

Megjegyzés.

- Amint Volpert tárgyalja [19, 12. fejezet]-ben, KDE-ek esetén a fenti elmélet más kémiai reakciókra is vonatkozik, nem csak aciklikus Volpert-gráffal rendelkezőkre, mindaddig, míg a (12) egyenlőtlenségnek létezik pozitív megoldása. Bizonyításunkban felhasználtuk azt a tényt, hogy a (12) rendszernek n nemnegatív megoldása van. Levonhatjuk azt a következtetést, hogy ez a kiterjesztés reakciódiffúzió-rendszerekre nem érvényes. [20, 299. oldal]-án található olyan példa, amelyben (12)-nek van pozitív megoldása, de nincs n számú nemnegatív megoldása. A páros gráf, amely a reakciót fejezi ki, nem bizonyul aciklikusnak.
- Az a stacionárius pont, amelyhez a megoldás konvergál, függhet a k_i reakciósebességi együtthatóktól, amint ez látható [19, 627. oldal] II. példájában. Ez a helyzet bekövetkezhet PDE-ek esetén is, lásd a 6. fejezet 6.2. példáját.

Most kiterjesztjük a [19, 632. oldal] tételének második részét. Ez azt mondja ki, hogy aciklikus gráf esetében (2)–(3) megoldása nem lehet nemnegatív nemtriviális periodikus megoldás.

Bizonyítás. (3.3. tétel)

A (14) Ljapunov-függvényt fogjuk használni a (13) feltételekkel. Legyen u egy nemtriviális, nem állandó megoldása (4)–(6)-nak. Ha u periodikus megoldás, akkor $\exists \bar{T} > 0$, hogy $\forall \mathbf{x} \in \Omega$ és $t \geq 0$ esetén

$$u(\mathbf{x}, t + \bar{T}) = u(\mathbf{x}, t).$$

Ebből következik, hogy

$$F(u(\mathbf{x}, t)) = F(u(\mathbf{x}, t + \bar{T})).$$

Tekintsük az F Ljapunov-függvényt az $\bar{\Omega} \times [0, T]$ halmazon, ahol $\bar{T} < T$. Ekkor $u(\mathbf{x}, t) > 0$, ha $(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times (0, T]$. Tehát $f_i(u(\mathbf{x}, t)) > 0$ ($i = 1, \dots, m$). Figyelembe véve (13)-at, a (19) egyenlőtlenség szigorú lesz:

$$(F \circ u)_t(\mathbf{x}, t) - d\Delta(F \circ u)(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \mu_i f_i(u(\mathbf{x}, t)) < 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (19)$$

$$F(u(\mathbf{x}, 0)) \leq \xi, \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

$$\frac{\partial(F \circ u)}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T].$$

A (19)-ben szereplő szigorú egyenlőtlenségnek és a nulla fluxusú peremfeltételnek tulajdoníthatóan $F(u(\mathbf{x}, t))$ eléri a maximumát $t = 0$ -ban. Feltételezzük, hogy ez valamely $\mathbf{x}_0 \in \bar{\Omega}$ mellett következik be. Akkor minden $(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times (0, T]$ esetén

$$F(u(\mathbf{x}, t)) < F(u(\mathbf{x}_0, 0)) = F(u(\mathbf{x}_0, \bar{T})).$$

Legyen $F(u(\mathbf{x}_0, 0)) > 0$, $\mathbf{x}_0 \in \Omega$. Így a maximumát $(\mathbf{x}_0, \bar{T}) \in \Omega \times (0, T]$ -ben éri el. Ez ellentmond a (19)-beli szigorú egyenlőtlenségnek. Ha $F(u(\mathbf{x}_0, 0)) = 0$, ellentmondásba kerülünk $F(u(\mathbf{x}, t)) \geq 0$ -val.

Ha $\mathbf{x}_0 \in \partial\Omega$, akkor F az $(\mathbf{x}_0, \bar{T}) \in \partial\Omega \times (0, T]$ pontban éri el a maximumát. A nulla fluxusú peremfeltétel $(\mathbf{x}_0, \bar{T})$ -ban ellentmond az erős maximumelvnek. $\square$

5. Megfordítható reakciók

Megfordítható reakciók az alábbi típusú kémiai reakciók

$$\sum_{k=1}^n \alpha_{ik} A_k \xrightleftharpoons[k_i^-]{k_i^+} \sum_{k=1}^n \beta_{ik} A_k, \quad i = 1, \dots, m, \quad (20)$$

ahol $k_i^+, k_i^- > 0$ az i -edik reakció előre-, ill. visszafele mutató reakciósebességi együtthatói. Egy megfordítható reakció Ljapunov-függvénye lehet az a

$$V(u) = \sum_{k=1}^n u_k (\ln(u_k) - (c_k + 1)) \quad (21)$$

függvény, ahol mindegyik c_k konstans. A V függvény tartalmaz egy logaritmikus tagot, ami azt jelenti, hogy $V(\mathbf{u})$ csak $\mathbf{u} > \mathbf{0}$ -ra van értelmezve. Emlékeztetünk, hogy csak olyan megoldások érdekelnek bennünket, amelyekre

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) > 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty).$$

A $V(\mathbf{u})$ függvény folytonossá tehető a nemnegatív ortánszon, mivel

$$\lim_{u \rightarrow 0^+} u \ln(u) = 0.$$

Részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont az olyan $\mathbf{u}$ pont, amelyre az

$$f_i^+ = k_i^+ \prod_{k=1}^n u_k^{\alpha_{ik}} \quad \text{és} \quad f_i^- = k_i^- \prod_{k=1}^n u_k^{\beta_{ik}} \quad (22)$$

sebességértékek azonosak. Tehát részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont esetén $f_i^+ = f_i^-$ ($i = 1, \dots, m$). Megmutatható, hogy egy részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont stacionárius pontja a (2)–(3) KDE-nek. Most bevezetünk egy, a részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pontok létezésére és egyértelműségére vonatkozó feltételt.

A. FELTÉTEL: Feltételezzük, hogy létezik $\bar{\mathbf{u}}$ pozitív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont PDE-re.

Ha az A. feltétel teljesül, akkor [19, 613. oldal] tétele szerint minden invariáns síkban létezik egyetlen $\bar{\mathbf{u}}$ pozitív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont. Legyen a (21)-ben szereplő c_k olyan, hogy $\bar{u}_k = \exp(c_k)$. A V függvény bizonyos tulajdonságokkal rendelkezik, amelyet [19] tárgyal KDE-rendszerek esetén:

1. $\exists \bar{\mathbf{u}} \in \hat{\pi}(\mathbf{u}_0(\mathbf{x}))$ úgy, hogy $V(\mathbf{u}) \geq V(\bar{\mathbf{u}})$, $\forall \mathbf{u} \in \hat{\pi}(\mathbf{u}_0(\mathbf{x}))$, ahol $\mathbf{u} \geq 0$, azaz $\bar{\mathbf{u}}$ abszolút minimumhely.
2. $V(\mathbf{u}) \rightarrow +\infty$, ha $\|\mathbf{u}\| \rightarrow +\infty$ és $V(\mathbf{u}) \rightarrow 0$, ha $\|\mathbf{u}\| \rightarrow 0$.

A KDE esetét lásd bővebben [17, 19]-ben.

Bizonyítás. (3.1. tétel)

Tekintsük a $V(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t))$ függvényt, ahol $\mathbf{u}$ megoldása a (4)–(6) reakciódiffúzió-rendszernek. Először kimutatjuk, hogy

$$(V \circ \mathbf{u})_t(\mathbf{x}, t) - d\Delta(V \circ \mathbf{u})(\mathbf{x}, t) \leq 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T]$$

Kiszámoljuk V_t -t:

$$(V \circ \mathbf{u})_t = (\nabla_{\mathbf{u}} V) \circ \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_t = \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \left(d\Delta u_k + \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} f_i \circ \mathbf{u} \right).$$

ΔV kiszámolása végett kiszámítjuk az alábbi parciális deriváltakat:

$$\frac{\partial(V \circ \mathbf{u})}{\partial x_j} = \nabla_{\mathbf{u}} V \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} = \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \frac{\partial u_k}{\partial x_j},$$

illetve

$$\frac{\partial^2(V \circ \mathbf{u})}{\partial x_j^2} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{u_k} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)^2 + \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j^2}.$$

Tehát

$$\Delta(V \circ \mathbf{u}) = \sum_{j=1}^s \frac{\partial^2(V \circ \mathbf{u})}{\partial x_j^2} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{u_k} \|\nabla u_k\|^2 + \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \Delta u_k.$$

Most tekintsük a $(V \circ \mathbf{u})_t - d\Delta(V \circ \mathbf{u})$ kifejezést:

$$\begin{aligned} (V \circ \mathbf{u})_t - d\Delta(V \circ \mathbf{u}) &= \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) (d\Delta u_k + \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} (f_i \circ \mathbf{u})) - \\ &\quad - d \left[\sum_{k=1}^n \frac{1}{u_k} \|\nabla u_k\|^2 + \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \Delta u_k \right] = \\ &= \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} (f_i \circ \mathbf{u}) - d \sum_{k=1}^n \frac{1}{u_k} \|\nabla u_k\|^2 \leq 0. \end{aligned}$$

A második összeg nem pozitív, mivel

$$d > 0, u_k > 0, \quad \text{és} \quad \|\nabla u_k\|^2 \geq 0 \quad (k = 1, \dots, n).$$

Az első összeg a KDE esetében is szereplő $\dot{H}$, és egyenlő az alábbival:

$$- \sum_{i=1}^m (f_i^+ - f_i^-) (\ln(f_i^+) - \ln(f_i^-)) \leq 0,$$

ahol f_i^+ és f_i^- a (22) képlettel értelmezett kifejezések. Az egyenlőtlenség érvényes, mivel $(a - b)(\ln(a) - \ln(b)) \geq 0$, ha $a, b > 0$. A teljes számítás megtalálható itt: [19, 641. oldal].

Lévén, hogy $V(\cdot, 0)$ folytonos $\overline{\Omega}$ -ban, feltételezzük, hogy létezik olyan ξ konstans, amelyre fennáll:

$$\max_{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}} V(\mathbf{x}, 0) \leq \xi.$$

Az $\mathbf{u}$ -ra vonatkozó nulla fluxusú peremérték-feltételből következik, hogy

$$\begin{aligned} \frac{\partial(V \circ \mathbf{u})}{\partial \boldsymbol{\nu}} &= \left(\nabla_{\mathbf{u}} V \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1}, \dots, \nabla_{\mathbf{u}} V \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_s} \right) \cdot \boldsymbol{\nu} \\ &= \left(\sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \frac{\partial u_k}{\partial x_1}, \dots, \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \frac{\partial u_k}{\partial x_s} \right) \cdot \boldsymbol{\nu} \\ &= \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \nu_j \\ &= \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \sum_{j=1}^s \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \nu_j \\ &= \sum_{k=1}^n (\ln(u_k) - c_k) \nabla u_k \cdot \boldsymbol{\nu} = 0. \end{aligned}$$

A fentieket összegezve V -re kapjuk:

$$\begin{aligned} (V \circ \mathbf{u})_t(\mathbf{x}, t) - d\Delta(V \circ \mathbf{u})(\mathbf{x}, t) &\leq 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T], \\ V(\mathbf{x}, 0) &\leq \xi, \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \\ \frac{\partial V}{\partial \boldsymbol{\nu}}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T]. \end{aligned}$$

A $\varphi = V \circ \mathbf{u}$ és $\psi = \xi$ függvényekre alkalmazzuk az 2.1. lemmát az $\bar{\Omega} \times [0, T]$ halmazon. Következésképpen $V(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \leq \xi$. Így $0 \leq u_k(\mathbf{x}, t) \leq \delta$, $\bar{\Omega} \times [0, T]$ -ben, mivel $V(\mathbf{u}) \rightarrow +\infty$, ha $\|\mathbf{u}\| \rightarrow +\infty$. Ez az eredmény nem függ T -től. Tehát az $\mathbf{u}$ megoldás $C^{2+\alpha}$ norma szerinti globális korlátossága következik a 2.1. tételből.

Legyen ω^+ az $\mathbf{u}$ megoldás ω -határhalmaza. A [10]-ben szereplő 2.1. tétel bizonyítása szerint járunk el annak igazolására, hogy ha $\bar{\mathbf{v}} \in \omega^+$, akkor $\bar{\mathbf{v}} = \text{konstans}$. Legyen

$$\bar{\mathbf{v}} := \lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{u}(\circ, t_k), \quad C^2(\bar{\Omega})$$

ω^+ tetszőleges eleme. Legyen $\mathbf{v}$ megoldása a (4)–(6) rendszernek a $\mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x})$ kezdetiérték-feltétellel.

A tömeghatás típusú kémiai kinetikai rendszerek megoldásának pozitivitására és szigorú pozitivitására vonatkozó elméletből [9] mindegyik v_k komponensre két lehetőség áll fenn: vagy $v_k(\mathbf{x}, t) \equiv 0$ minden t esetén, vagy $v_k(\mathbf{x}, t) > 0$ minden $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$ és $t > 0$ esetén.

A (4)–(6) rendszerből kizárjuk az összes olyan v_k -ra vonatkozó egyenletet, amelyre $v_k(\mathbf{x}, t) \equiv 0$. A megmaradó egyenletekben valahányszor $v_k = 0$ egy többszörös f_i^+ , ill. f_i^- -ban, egyenlővé tesszük 0-val. Tulajdonképpen minden i esetén van f_i^+ és f_i^- pozitív, ha $t > 0$, vagy mindegyik azonosan 0. Ha $f_i^+ = 0$ akkor legalább az egyik A_k (20) bal oldalán 0 koncentrációjú lesz. Tehát a (20) jobb oldalán szereplő valamely A_j termék nem fog tudni létrejönni, és nulla koncentrációjú

lesz, f_i^- -t nullává téve. A (20) bal oldalán előforduló összes A_k kémiai anyag megfelelő $v_k > 0$ koncentrációja esetén $f_i^+ > 0$. Ekkor a (20) jobb oldalán előforduló összes A_j termék létre fog jönni, maga után vonva az $f_i^- > 0$ egyenlőtlenséget, lásd [9]. Most van egy (4) típusú alrendszerünk a megfelelő kezdeti- és peremérték feltétellel úgy, hogy $v_k(\mathbf{x}, t) > 0$, $\forall \mathbf{x} \in \Omega, t > 0$. Ugyanazt a jelölést fogjuk használni a leegyszerűsített rendszer $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ megoldására. Legyen $W(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{v}(\mathbf{x}, t))$ a $\mathbf{v}$ megoldáshoz tartozó Ljapunov-függvény. Rögzített t esetén alkalmazzuk a 2.3. lemmát $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k + t)$ -re, illetve $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ -re:

$$\|\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k + t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)\| \leq \|\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k) - \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x})\|_2 e^{Mt},$$

ahol M az

$$F(\mathbf{u}) = \left(\sum_{i=1}^m \gamma_{i1} f_i(\mathbf{u}), \dots, \sum_{i=1}^m \gamma_{in} f_i(\mathbf{u}) \right)$$

vektorfüggvényhez tartozó Lipschitz-állandó az $\{\mathbf{u} \in \mathbb{R}_+^n : V(\mathbf{u}) \leq \xi\}$ kompakt konvex halmazon. Tehát a

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k + t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$$

konvergencia egyenletes $\mathbf{x}$ -ben, mivel $t = 0$ -ra teljesül a

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{u}(\cdot, t_k) = \bar{\mathbf{v}}$$

összefüggés $C^2(\bar{\Omega})$ -ban. Ebből következik, hogy

$$\lim_{k \rightarrow \infty} V(\mathbf{u}(\cdot, t_k + t)) = V(\mathbf{v}(\cdot, t)) = W(\cdot, t) \quad C^2(\bar{\Omega})\text{-ban.} \quad (23)$$

Ugyanakkor $W(\mathbf{x}, t)$ -re fennáll

$$W_t - d\Delta W = -d \sum_k \frac{1}{v_k} \|\nabla v_k\|^2 - \sum_i (f_i^+ - f_i^-)(\ln(f_i^+) - \ln(f_i^-)) \leq 0, \quad (24)$$

ahol az első összeg $v_k > 0$ -ra vonatkozik, míg $\sum_i$ -t csak a pozitív f_i^+, f_i^- értékekre vesszük. A 2.4. lemma szerint a $\lim_{t \rightarrow +\infty} V(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + t_k)) = \text{konstans}$ konvergencia egyenletes $\mathbf{x}$ -ben, és (23) szerint $W(\mathbf{x}, t) = \text{konstans}$ bármely $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}, t > 0$ esetén. Tehát (24) bal oldala 0, így $\|\nabla v_k(\mathbf{x}, t)\| = 0$ minden olyan k -ra, amely esetén $v_k(\mathbf{x}, t) > 0$, ha $t > 0$. Tehát $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \text{konstans}$ és a folytonosság szerint $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \text{konstans}$. Ezzel a 3.1. tétel bizonyítását megfordítható reakciók esetére befejeztük. $\square$

Bizonyítás. (3.2. tétel)

A 3.2. tétel első része ugyanaz, mint aciklikus gráfok esetében. Legyen $\bar{u}$ a

$$\hat{\pi} = \{u \in \mathbb{R}_+^n \mid \Lambda u = a\}$$

síkban egy pozitív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont, bizonyos a -ra, ahol

$$a = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \Lambda u_0(x) dx. \quad (25)$$

Az $\bar{u}$ részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont létezése és egyértelmősége az A. feltétel alapszik. [19, 645. oldal]-át követjük. Vegyük az $u(x, 0)$ kezdetiérték feltételt a

$$D_C = \{u > 0 \mid V(u) \leq C\},$$

halmazból, ahol C -t a

$$V(\bar{u}) < C < V_s = \min_{S'} V(u)$$

összefüggés adja, és $S' := \partial \mathbb{R}_+^n \cap \{u \in \hat{\pi}\}$.

Kimutatjuk, hogy D_C pozitívan invariáns halmaza $u(x, t)$ -nek. Alkalmazva a 2.1. lemmát $\varphi = V(u(x, t))$ -re és $\psi = C$ -re, következik, hogy $V(u(x, t)) \leq C$, mikor $t \rightarrow +\infty$. Tehát $\omega^+ \subset D_C$. Ez az érvelés kizárja annak lehetőségét, hogy $u(x, t)$ egy határon fekvő stacionárius ponthoz tartson, lásd a 6. fejezet 6.4. példáját. Tudjuk, hogy $\omega^+ \in S = \hat{\pi} \cap \{u \in \mathbb{R}^n \mid \dot{H} = 0\}$. Ha teljesül az A. feltétel, akkor a [19, 644. oldal]-án szereplő tétel szerint mindegyik invariáns sík egyetlen stacionárius pontot tartalmaz, amely pedig részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont. Tehát $\bar{u}$ részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont. Mivel $\omega^+ \neq \emptyset$ és $S = \{\bar{u}\}$, következik, hogy $\omega^+ = \{\bar{u}\}$. Így $\bar{u}$ aszimptotikusan stabilis azon megoldások között, amelyek teljesítik (25)-öt. $\square$

Bizonyítás. (3.3. tétel)

Feltételezzük, hogy a (4)–(6) PDE-rendszer rendelkezik periodikus megoldással. Ekkor létezik $\bar{T} > 0$ úgy, hogy $u(x, t + \bar{T}) = u(x, t)$, $\forall x \in \bar{\Omega}$. Feltételezzük, hogy ez a periodikus megoldás nem egy konstans stacionárius pont. Tudjuk, hogy a $V \circ x$ függvényre teljesül

$$(V \circ u)_t - d\Delta(V \circ u) = - \sum_{i=1}^m (f_i^+ - f_i^-)(\ln(f_i^+) - \ln(f_i^-)) - d \sum_{k=1}^n \frac{1}{u_k} \|\nabla u_k\|^2 \leq 0. \quad (26)$$

Tekintsük $V \circ u$ -t $\bar{\Omega} \times [0, T]$ -ben, bizonyos $T > \bar{T}$ -ra. Ez eleget tesz az alábbi problémának:

$$\begin{aligned} (V \circ u)_t - d\Delta(V \circ u) &\leq 0, & (x, t) &\in \Omega \times (0, T], \\ V(x, 0) &= V_0(x), & x &\in \bar{\Omega}, \\ \frac{\partial(V \circ u)}{\partial \nu}(x, t) &= 0, & (x, t) &\in \partial\Omega \times (0, T]. \end{aligned}$$

V eléri a maximumát bizonyos $(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T]$ pontban.

Tételezzük fel, hogy a maximum valamely $(\mathbf{x}, t_1) \in \Omega \times [0, T]$ pontban következik be, bizonyos $t_1 > 0$ -ra. Ekkor az erős maximumelv szerint $V((\mathbf{x}, t)) = konstans$ és

$$(V \circ u)_t(\mathbf{x}, t) = \Delta(V \circ u)(\mathbf{x}, t) = 0,$$

ahol $(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times [0, t_1]$. Ily módon (26) szerint, felhasználva, hogy egyik összeg sem negatív, azt kapjuk, hogy $u(\mathbf{x}, t)$ kielégíti a

$$\|\nabla u(\mathbf{x}, t)\| = 0 \quad \text{és} \quad f_i^+(u(\mathbf{x}, t)) = f_i^-(u(\mathbf{x}, t))$$

feltételeket minden $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in (0, t_1]$ esetén ($i = 1, \dots, m$). Ekkor a folytonosság szerint

$$\|\nabla u(\mathbf{x}, 0)\| = 0, \quad \text{és} \quad f_i^+(u(\mathbf{x}, 0)) = f_i^-(u(\mathbf{x}, 0)),$$

ahol $\mathbf{x} \in \Omega$ ($i = 1, \dots, m$). Tehát $u(\mathbf{x}, 0)$ egy állandó, részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont. A (4)–(6) rendszer $u(\mathbf{x}, t)$ megoldásának egyértelműségéből következik, hogy $u(\mathbf{x}, t)$ konstans megoldás és részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pontja az $(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T]$ -nek. Így ellentmondásba kerültünk azzal a feltételezéssel, hogy $u(\mathbf{x}, t)$ nem konstans megoldás.

Ha $V(u(\mathbf{x}, t))$ maximumát valamely $(\mathbf{x}, 0)$ pontban éri el, ahol $\mathbf{x} \in \Omega$, akkor abból a feltételezésből, hogy $u(\mathbf{x}, t)$ periodikus, következni fog, hogy $V(u(\mathbf{x}, t))$ az $(\mathbf{x}, \bar{T})$ pontban eléri a maximumát. Ugyanaz a megfontolás, mint az előbbi bekezdésben levő átvihető az $\bar{\Omega} \times [0, \bar{T}]$ tartományra.

Ha $V(u(\mathbf{x}, t))$ maximumát $(\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T]$ -ben éri el, akkor az erős maximumelv szerint

$$\partial V \circ a / \partial \nu(\mathbf{x}, t) > 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, T],$$

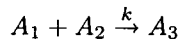
ami azonban ellentmond a nulla fluxusú határfeltételnek. Ha pedig a maximum $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ -ban fordul elő, és $t = 0$, akkor ez $(\mathbf{x}, \bar{T}) \in \partial\Omega \times (0, T]$ -ben van. Így ellentmondásba ütközünk az erős maximumelvvel.

Tehát u nem lehet nemkonstans, nemnegatív, periodikus megoldás. $\square$

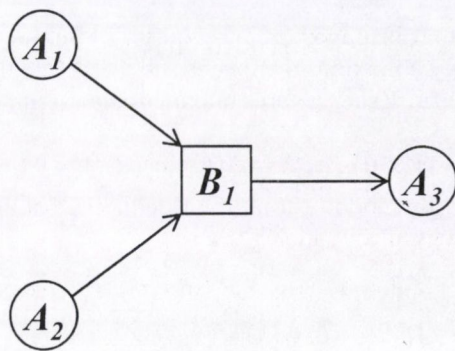
6. Példák

Először két aciklikus gráffal rendelkező kémiai reakciót veszünk. Azokat pedig két megfordítható reakció követi.

6.1. Példa. Tekintsük az egyszerű



kémiai reakciót, amelyet elemi reakciónak nevezünk. Mindegyik A_i ($i = 1, 2, 3$) kémiai anyagfajtát jelöl, $k > 0$ pedig a reakciósebességi együttható. (1)-nek megfelelően a (nullától különböző) sztöchiometriai együtthatók a következők: $\alpha_{11} = \alpha_{12} = \beta_{13} = 1$. Volpert-gráfját az 1. ábra szemlélteti.



1. ábra. A 6.1. példabeli reakció Volpert-gráfja

A reakció aciklikus, tehát a 4. fejezetben szereplő elmélet alkalmazható rá. Felállítjuk a PDE-problémát:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u_1}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_1(\mathbf{x}, t) - ku_1(\mathbf{x}, t)u_2(\mathbf{x}, t), \\
 \frac{\partial u_2}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_2(\mathbf{x}, t) - ku_1(\mathbf{x}, t)u_2(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\
 \frac{\partial u_3}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_3(\mathbf{x}, t) + ku_1(\mathbf{x}, t)u_2(\mathbf{x}, t), \\
 u_i(\mathbf{x}, 0) &= (u_i)_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \overline{\Omega}, \quad i = 1, 2, 3, \\
 \frac{\partial u_i}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \quad i = 1, 2, 3.
 \end{aligned}$$

Az $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ vektor az A_i anyagfajta $u_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, 2, 3$) koncentrációit tartalmazza. A $\Gamma = (-1, -1, 1)$ mátrix lesz a sztöchiometriai mátrix, míg a sebességfüggvény $f(\mathbf{u}) = ku_1u_2$. Tehát a reakciós tag $\Gamma^T f(\mathbf{u})$. Feltételezzük, hogy

$$u_1(\mathbf{x}, 0) \geq 0, \quad u_2(\mathbf{x}, 0) \geq 0,$$

és mindegyik

$$u_1(\mathbf{x}, 0) > 0, \quad u_2(\mathbf{x}, 0) > 0$$

valamilyen pozitív mértékű $\mathbf{x} \in \overline{\Omega}$ mellett, de $u_3(\mathbf{x}, 0) \equiv 0$. Következik, hogy $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) > \mathbf{0}$, ha $t > 0$, lásd [9].

Most leírjuk a Λ mátrixot úgy, hogy (12) teljesüljön, és innen kiszámítjuk az F Ljapunov-függvényt. Arra a következtetésre fogunk jutni, hogy $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_k) \rightarrow \mathbf{c}$ valamilyen $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ esetén, mint ahogy ezt kimutattuk a 4. fejezetben.

Szükségünk van a $\Gamma\lambda \leq 0$, vagy $\lambda_3 \leq \lambda_1 + \lambda_2$ egyenlőtlenség három lineárisan független megoldására. Λ meghatározásának algoritmusát megtalálhatjuk [19, 624–625. oldal]-án. A számítások a következő mátrixot adják:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

ami egy alsó háromszög-mátrix, az átlóin 1-esekkel, amint vártuk. Tehát (14) szerint a Ljapunov-függvény

$$F(u(x, t)) = \lambda^3 \cdot u(x, t) = \sum_{i=1}^3 u_i(x, t)$$

lesz. A 3.1. tétel értelmében az ω -határhalmaz, ω^+ , konstans függvényekből áll. A 3.3. tétel szerint ez abban a $\hat{\pi}(u_0(x))$ invariáns határsíkban fekszik, amelyre:

$$u_1 + u_3 = a_1,$$

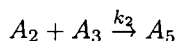
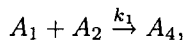
$$u_2 + u_3 = a_2,$$

ahol

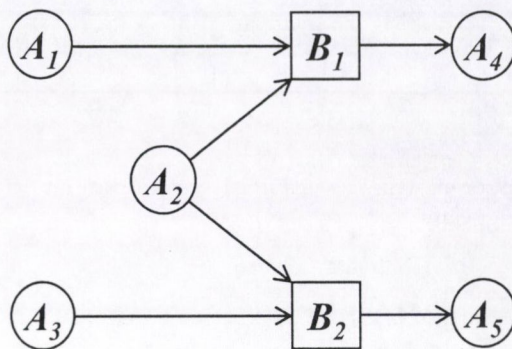
$$a_i := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_i(x, 0) dx, \quad i = 1, 2.$$

Mivel $u_i(x, 0)$ -t nem vettük identikusan nullának Ω -n, ezért $a_i > 0$ ($i = 1, 2$). A 3.2. tétel értelmében $\omega^+ \subset \{u | \dot{H}(u) = 0\}$. Mivel $u \in \omega^+$, ezért $\dot{H} = -ku_1u_2 = 0$ maga után vonja azt, hogy vagy $u_1 = 0$, vagy pedig $u_2 = 0$. Mivel $\omega^+ \subset \hat{\pi}(u_0(x))$, ha $u_1 = 0$, akkor $u_3 = a_1$ és $u_2 = a_2 - a_1$. Ez akkor következik be, ha $a_2 \geq a_1$. Ha $u_2 = 0$, akkor $u_3 = a_2$ és $u_1 = a_1 - a_2$. Ez pedig akkor teljesül, ha $a_1 \geq a_2$. Az $u(x, t)$ megoldás x szerint egyenletesen konvergál $t \rightarrow +\infty$ -re az $E_1 = (0, a_2 - a_1, a_1)$ ponthoz, ha $a_2 \geq a_1$, vagy az $E_2 = (a_1 - a_2, 0, a_2)$ ponthoz, ha $a_1 \geq a_2$. Mindkét esetben vagy az A_1 , vagy az A_2 anyagfajta elfogy.

6.2. Példa. Tekintsük az



reakciólépésekből álló kémiai reakciót. Itt mindegyik (nullától különböző) sztöchiometriai együttható értéke 1. A reakció páros gráfja a 2. ábrán látható. A gráf aciklikus, mivel nem tartalmaz köröket. A KDE esetére vonatkozó bővebb magyarázat áll rendelkezésünkre [19, 627. oldal]-án.



2. ábra. A 6.2. példabeli reakció Volpert-gráfja

Írjuk fel a reakcióhoz tartozó PDE-problémát:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u_1}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_1(\mathbf{x}, t) - k_1 u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t), \\
 \frac{\partial u_2}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_2(\mathbf{x}, t) - k_1 u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t) - k_2 u_2(\mathbf{x}, t) u_3(\mathbf{x}, t), \\
 \frac{\partial u_3}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_3(\mathbf{x}, t) - k_2 u_2(\mathbf{x}, t) u_3(\mathbf{x}, t), & (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\
 \frac{\partial u_4}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_4(\mathbf{x}, t) + k_1 u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t), \\
 \frac{\partial u_5}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_5(\mathbf{x}, t) + k_2 u_2(\mathbf{x}, t) u_3(\mathbf{x}, t), \\
 u_i(\mathbf{x}, 0) &= (u_i)_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, \\
 \frac{\partial u_i}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) &= 0, & (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \quad i = 1, 2, 3, 4, 5.
 \end{aligned}$$

Az $u_i(\mathbf{x}, 0)$ kezdeti koncentrációkat pozitív mértékű halmazon nem azonosan nullának vesszük $i = 1, 2, 3$ -ra és $u_i(\mathbf{x}, 0) \equiv 0$ -nak $i = 4, 5$ -re. Ekkor a [9]-ben szereplő elmélet szerint $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) > \mathbf{0}$ a $t > 0$ esetén.

A továbbiakban megadjuk Λ -t és az F Ljapunov-függvényt. Megoldjuk az alábbi egyenlőtlenségrendszert:

$$\begin{aligned}
 \lambda_4 &\leq \lambda_1 + \lambda_2, \\
 \lambda_5 &\leq \lambda_2 + \lambda_3.
 \end{aligned}$$

A [19, 624–625. oldal]-án található algoritmust alkalmazva a megoldások a

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrixot alkotják. Tehát a Ljapunov-függvény

$$F(\mathbf{u}) = \lambda^5 \cdot \mathbf{u} = \sum_{i=1}^5 u_i$$

lesz. A 3.1. tétel szerint ω^+ konstans függvényekből áll. Lássuk, milyen c konstanshoz tart $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Meghatározzuk $\mathbf{u}$ -t úgy, hogy $\dot{H} = 0$ legyen, mert a 3.2. tételt felhasználva $\omega^+ \subset \{\mathbf{u} \mid \dot{H} = 0\}$. Mivel

$$\dot{H} = -f_1(u) - f_2(u) = -k_1 u_1 u_2 - k_2 u_2 u_3 \leq 0,$$

ezért $\dot{H} = 0$, ha $u_1 u_2 = 0$ és $u_2 u_3 = 0$. Ha egy $\mathbf{u}$ megoldás ω^+ -ban van, akkor vagy az $u_2 = 0$ eset, vagy pedig az $u_1 = u_3 = 0$ eset áll fenn. Az $\mathbf{u}$ megoldás $t \rightarrow +\infty$ -re az alább megadott invariáns határsíkhhoz tart:

$$\begin{aligned} u_1 + u_4 &= a_1, \\ u_3 + u_5 &= a_3, \\ u_2 + u_4 + u_5 &= a_2, \end{aligned}$$

ahol

$$a_i := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_i(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Mivel $u_i(\mathbf{x}, 0)$ ($i = 1, 2, 3$) nem azonosan nulla valamely pozitív mértékű halmazon, következik, hogy $a_i > 0$ minden i -re.

Ha $u_2 \neq 0$ és $a_2 > a_1 + a_3$, akkor $\omega^+ = \{E_1\}$, ahol

$$E_1 = (0, a_2 - a_1 - a_3, 0, a_1, a_3).$$

Ha $u_2 = 0$, akkor $a_2 < a_1 + a_3$ -ra, és minden olyan α paraméterre, amely esetén

$$\max\{0, a_1 - a_2\} < \alpha < \min\{a_1, a_1 + a_3 - a_2\}, \quad \omega^+ = \{E_2\},$$

ahol

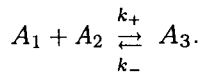
$$E_2 = (\alpha, 0, a_1 + a_3 - a_2 - \alpha, a_1 - \alpha, a_2 - a_1 + \alpha).$$

Az α -ra vonatkozó egyenlőtlenségek E_2 nemnegatív stacionárius voltát biztosítják minden α -ra. A KDE esetében az u megoldás olyan stacionárius ponthoz tart, amely nem csak az $u(0)$ kezdeti értéktől függ, de a k_1, k_2 reakciósebességi együtthatóktól is. Az α paraméter egyértelműen kifejezhető a k_1, k_2 reakciósebességi együtthatókkal a

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{\ln(\alpha) - \ln(u_1(0))}{\ln[(u_1(0) + u_3(0) - u_2(0) - \alpha)] - \ln(u_3(0))}$$

egyenletből. Az $u_k(0) > 0$ ($k = 1, 2, 3$) konstansok kezdeti értékei az $u_k(t)$ -nek. A PDE esetében nem tudunk hasonló összefüggést találni a -ra és α -ra. Mindazonáltal tudunk következtetni arra, hogy ω^+ egyetlen pontból áll a 3.2. tétel értelmében.

6.3. Példa. Tekintsük az első példában szereplő kémiai reakciót, és adjuk hozzá a fordított irányú reakciót:



Felírhatjuk a reakcióhoz tartozó PDE problémát:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_1(\mathbf{x}, t) - k_+ u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t) + k_- u_3(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_2(\mathbf{x}, t) - k_+ u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t) + k_- u_3(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u_3}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_3(\mathbf{x}, t) + k_+ u_1(\mathbf{x}, t) u_2(\mathbf{x}, t) - k_- u_3(\mathbf{x}, t), \\ u_i(\mathbf{x}, 0) &= (u_i)_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \overline{\Omega}, \quad i = 1, 2, 3, \\ \frac{\partial u_i}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

Akár $u_1(\mathbf{x}, 0)$ -t és $u_2(\mathbf{x}, 0)$ -t választhatjuk nem azonosan nullának, akár $u_3(\mathbf{x}, 0)$ -t. Ezért feltételezhetjük, hogy $u_1(\mathbf{x}, 0) \equiv 0$, $u_2(\mathbf{x}, 0) \equiv 0$, és $u_3(\mathbf{x}, 0) > 0$ bizonyos $\mathbf{x} \in \Omega$ -ra, amelyek halmazának mértéke pozitív. Tehát $u(\mathbf{x}, t) > 0$, ha $t > 0$, lásd [9].

Példánkra alkalmazzuk az 5. fejezetben szereplő elméletet. A 3.1. tétel értelmében az ω -határhalmaz csak konstansokból áll. Az u megoldás $t \rightarrow +\infty$ esetén ahhoz az invariáns határsíkhoz tart, amelyet a következőképpen értelmezünk:

$$\begin{aligned} u_1 + u_3 &= a_3, \\ u_2 + u_3 &= a_3. \end{aligned}$$

Az

$$a_3 := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_3(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x}$$

konstans pozitív, mivel $u_3(\mathbf{x}, 0)$ nem azonosan nulla. Mint tudjuk, a 3.2. tétel szerint az ω -határhalmaz egy invariáns határsíkban fekszik. Ugyanakkor az $\{\mathbf{u} \in \mathbb{R}_+^n \mid f^+(\mathbf{u}) = f^-(\mathbf{u})\}$ halmazban is benne van minden olyan $\mathbf{u}$ -ra, amely esetén $k_+u_1u_2 = k_-u_3$. Ahhoz, hogy megtaláljuk az egyetlen pozitív stacionárius megoldást, meg kell oldanunk a

$$\begin{aligned}u_1 + u_3 &= a_3, \\u_2 + u_3 &= a_3, \\k_+u_1u_2 &= k_-u_3.\end{aligned}$$

rendszert. Némi számolás után a

$$\mathbf{P} = \left(\frac{\sqrt{4ka_3 + 1} - 1}{2k}, \frac{\sqrt{4ka_3 + 1} - 1}{2k}, \frac{2ka_3 + 1 - \sqrt{4ka_3 + 1}}{2k} \right)$$

pontot kapjuk, ahol $k = k_+/k_-$. Következésképpen $\omega^+ = \{\mathbf{P}\}$.

A következő példa arra mutat rá, miért fontos, hogy az $\mathbf{u}$ megoldás ne legyen az $\mathbb{R}_+^n$ határán, mint ahogy ezt a 3.2. tétel is állítja.

6.4. Példa. Ebben a példában tekintjük a

$$2A_1 \underset{k_-}{\overset{k_+}{\rightleftharpoons}} A_1 + A_2$$

megfordítható reakciót.

A reakcióhoz tartozó PDE-probléma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_1(\mathbf{x}, t) - k_+u_1^2(\mathbf{x}, t) + k_-u_1(\mathbf{x}, t)u_2(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= d\Delta u_2(\mathbf{x}, t) + k_+u_1^2(\mathbf{x}, t) - k_-u_1(\mathbf{x}, t)u_2(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ u_i(\mathbf{x}, 0) &= (u_i)_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \overline{\Omega}, \quad i = 1, 2, \\ \frac{\partial u_i}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \quad i = 1, 2.\end{aligned}$$

Ahhoz, hogy biztosítsuk az $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ megoldás pozitivitását, tételezzük fel, hogy $u_1(\mathbf{x}, 0) > 0$ az $\mathbf{x} \in \Omega$ pontok pozitív mértékű halmazán, és $u_2(\mathbf{x}, 0) \equiv 0$ minden $\mathbf{x} \in \Omega$ -ra. A 3.1. tétel értelmében az $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ megoldás konstanshoz konvergál valamely $\{t_k\} \rightarrow +\infty$ sorozatra. A $\hat{\pi}(\mathbf{u}_0(\mathbf{x}))$ invariáns határsíkot az

$$u_1 + u_2 = a_1$$

egyenlet írja le, ahol

$$a_1 := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u_1(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} > 0.$$

Az ω -határhalmaz, ω^+ benne van az $\{u \in \mathbb{R}_+^n \mid f^+(u) = f^-(u)\}$ halmazban. Itt az $f^+(u) = f^-(u)$ egyenlet $k_+ u_1^2 = k_- u_1 u_2$ -nek felel meg, és két megoldással rendelkezik: $u_1 = 0$ és $u_2 = k u_1$, ahol $k = k_+/k_-$. Tehát az invariáns határsíkban két stacionárius pont van: $(0, a_1)$ és $P = (a_1/(1+k), k a_1/(1+k))$. Az első pont $\mathbb{R}_+^2$ határán helyezkedik el. A 3.2. tétel szerint $\omega^+ \subset \{(0, a_1), P\}$, kivéve, ha a kezdeti értéket nem a D_C halmazból vesszük.

Ezt a feltevést nem használó további bizonyítást adunk az $\omega^+ = \{P\}$ egyenlőségre.

Legyen $t_1 > 0$ és

$$\begin{aligned} \min_{x \in \bar{\Omega}} u_i(x, t_1) &= \mu_i & i &= 1, 2, \\ \max_{x \in \bar{\Omega}} u_i(x, t_1) &= \bar{\mu}_i & i &= 1, 2. \end{aligned}$$

A szigorú pozitivitásból következik, hogy $\mu_i > 0$, $\bar{\mu}_i > 0$ ($i = 1, 2$), lásd [9]. A következő halmaz a PDE-rendszer invariáns téglalapja:

$$R = \{(u_1, u_2) \mid r \leq u_1 \leq \bar{r}, kr \leq u_2 \leq k\bar{r}\},$$

és $\bar{r} > r > 0$ esetén (μ_1, μ_2) , illetve $(\bar{\mu}_1, \bar{\mu}_2)$ R -hez tartozik. Az invariáns téglalapról bővebben lásd [3]-at és [16]-ot. Következésképpen $u(x, t) \in R$, mikor $t \geq t_1$. Tehát $\omega^+ \subset R$. Így $(0, a_1) \notin \omega^+$, és $\omega^+ = \{P\}$.

7. Komplex kiegyensúlyozottság

A gyengén megfordítható reakciók esetére Horn, Jackson és Feinberg kifejlesztett egy általánosabb elméletet. Ez magába foglalja az 5. fejezetbeli megfordítható reakciók esetét is. Azon olvasók számára, kik nem jártasak a témában, könnyebb a megfordítható reakciók esetét követni, mint a gyengén megfordíthatókat, mert ez utóbbinál több szakszóra és jelölésre van szükség. A teljesség kedvéért megmagyarázzuk azt a néhány módosítást, amelyekre a bizonyításaink során szükség volt, mikor gyengén megfordítható reakciót tekintettünk. Az a tény, hogy gyengén megfordítható reakciónál a (21) Ljapunov függvény teljesen ugyanaz marad, leegyszerűsíti a megfordítható reakciókról a gyengén megfordítható reakciók esetére való kibővítést.

Most bevezetünk néhány új szakszót. Tekintsük az (1) kémiai rendszert. A kémiai anyagfajtáknak a nyíl bal, illetve jobb oldalon szereplő lineáris kombinációit komplexeknek nevezzük. Ha feltételezzük, hogy p számú különböző komplexünk van, jelölje ezeket $C_1, C_2, \dots, C_p$, akkor (1) a következőképpen ábrázolható:

$$C_i \xrightarrow{k_{ij}} C_j, \quad i, j = 1, 2, \dots, p,$$

ahol

$$C_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} A_k$$

egy komplex, C_j hasonlóan definiálható, és k_{ij} a reakciósebességi együtthatója annak a reakciónak, amelyben a reagenskomplex C_i , míg a termékkomplex C_j .

7.1. Definíció. Az $\bar{u}$ koncentráció (2) komplex kiegyensúlyozott stacionárius pontja, ha a kémiai rendszer minden C_s ($s = 1, 2, \dots, p$) komplexe esetén a C_s -et, mint reagenst tartalmazó reakciók sebességeinek összege megegyezik a C_s -et, mint terméket tartalmazó reakciók sebességeinek összegével. Azt mondjuk, hogy a reakció komplex kiegyensúlyozott, ha rendelkezik pozitív komplex kiegyensúlyozott stacionárius ponttal.

Két komplex, C és C' akkor és csakis akkor tartozik ugyanahhoz a láncosztályhoz, ha léteznek $D_1, \dots, D_q$ komplexek és léteznek reakciólépések úgy, hogy $C \longleftrightarrow D_1 \longleftrightarrow D_2 \longleftrightarrow \dots \longleftrightarrow D_q \longleftrightarrow C'$, ahol a $\longleftrightarrow$ szimbólum jelentése a következő: fennáll vagy az előre, vagy a visszafele mutató reakció. Ha a kémiai reakció megfordítható reakciólépéseket tartalmaz, azaz minden $C \longrightarrow C'$ reakció esetén a $C' \longrightarrow C$ fordított reakció is jelen van a rendszerben, akkor a megfordítható reakció jól ismert esetével van dolgunk. Ha az ugyanabban a láncosztályban levő összes $C \longrightarrow C'$ reakcióhoz létezik egy $C' \longrightarrow D_1 \longrightarrow D_2 \longrightarrow \dots \longrightarrow D_q \longrightarrow C$ reakciólépésekből alkotott lánc, ahol $D_1, D_2, \dots, D_q$ komplexeket jelöl, akkor azt mondjuk, hogy a kémiai reakció gyengén megfordítható. Ebből következik, hogy a gyengén megfordíthatóság magába foglalja a megfordíthatóságot. A megfordítható reakciók elméletében feltételeztük egy $\bar{u}$ pozitív részletesen kiegyensúlyozott stacionárius pont létezését. Horn, Jackson és Feinberg elmélete olyan elegendő feltételt szolgáltat, amely biztosítja pozitív komplex kiegyensúlyozott stacionárius pont létezését gyengén megfordítható reakciók esetében.

Jelölje l az (1) kémiai rendszer láncosztályainak számát. Legyen s a Γ sztöchiometriai mátrix rangja, a már említett p pedig a komplexek száma. A $\delta = p - l - s$ számot az (1) kémiai rendszer deficienciájának nevezzük. Horn [7]-ben kimutatta, hogy az (1) kémiai rendszer tetszőleges pozitív sebességi együtthatók mellett akkor és csak akkor komplex kiegyensúlyozott, ha az (1) reakció gyengén megfordítható és deficienciája 0: $\delta = 0$. Ezt később kiterjesztette a zéródeficiencia-tételre, amely azt állítja, hogy egy zéró deficienciájú, gyengén megfordítható rendszer minden invariáns síkban, KDE esetében egyetlen aszimptotikusan stabilis pozitív stacionárius pontot tartalmaz, lásd [6], [7], [8]. A Horn-, Jackson-, Feinberg-féle eredmények általánosítják a megfordítható reakciók esetét gyengén megfordíthatókra, és választ adnak a pozitív komplex kiegyensúlyozott stacionárius pont létezésének és egyértelműségének kérdésére minden invariáns síkban, ha $\delta = 0$. A [15]-ben található 3.2. tétel a stabilitást az ω -határhalmaz felhasználásával adja meg, általánosítva Volpert megfordítható reakciókra vonatkozó tételét.

Már említettük, hogy a (21) egyenletben szereplő V Ljapunov-függvény ugyanaz lesz gyengén megfordítható reakcióknál is. Mikor az (1) kémiai rendszer gyengén megfordítható és komplex kiegyensúlyozott, akkor egyetlen $\bar{u}$ komplex kiegyensúlyozott stacionárius pontja létezik a KDE-rendszernek, és ez aszimptotikusan stabilis minden invariáns síkban. A $(V \circ u)_t - d\Delta(V \circ u)$ kifejtésében szereplő első összeg, amely $\dot{H}$ -nak felel meg, nempozitív lesz [15] 3.4. tétele értelmében. Tehát

a 3.1. tétel bizonyítása ugyanaz marad. Most tekintsük a 3.2. tétel bizonyítását. [15] 3.4. tételéből és a stacionárius pont egyértelműségéből a 3.2. tétel bizonyítása következik. Hasonlóan hivatkozhatunk a [15]-ben szereplő 3.4. tételre a 3.3. tétel bizonyítása során, mivel $\dot{H} = 0$ és $\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0$ akkor és csak akkor áll fenn, ha $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$, vagyis $\mathbf{u}$ megegyezik a komplex kiegyensúlyozott stacionárius ponttal. Tehát a 3.1–1.3. tételek a gyengén megfordítható komplex kiegyensúlyozott esetben is teljesülnek, csak hogy itt a részletesen kiegyensúlyozott egyensúlyú stacionárius pont helyett komplex kiegyensúlyozott stacionárius pontot kell vennünk.

Hivatkozások

- [1] AMANN, H.: *Invariant sets and existence theorems for semilinear parabolic and elliptic systems*, J. Math. Anal. Appl., **65** (1978), 432–467.
- [2] CHEN, W., LI, C. AND WRIGHT, E.: *On a nonlinear parabolic system – modelling chemical reactions in rivers*, Comm. Pure & App. Anal. **4**(4) (2005), 889–899.
- [3] CHEUH, K.H., CONLEY, C.C. AND SMOLLER, J.A.: *Positively invariant regions for systems of nonlinear diffusion equations*, Indiana Univ. Math. J., **26** (1977), 373–392.
- [4] CONWAY, E., HOFF, D. AND SMOLLER, J.: *Large time behavior of systems of nonlinear reaction-diffusion equations*, SIAM J. Appl. Math., **1**(35) (1978), 1–16.
- [5] ÉRDI, P. AND TÓTH, J.: *Mathematical Models of Chemical Reactions: Theory and Applications of Deterministic and Stochastic Models*, Princeton University Press, Princeton, 1978.
- [6] FEINBERG, M.: *Complex balancing in general kinetic systems*, Arch. Ratl. Mech. Anal., **49** (1972), 187–194.
- [7] HORN, F.: *Necessary and sufficient conditions for complex balancing in chemical kinetics*, Arch. Ratl. Mech. Anal., **49** (1972), 172–186.
- [8] HORN, F. AND JACKSON, R.: *General mass action kinetics*, Arch. Ratl. Mech. Anal., **47** (1972), 81–116.
- [9] MINCHEVA, M. AND SIEGEL, D.: *Nonnegativity and positiveness of solutions to reaction-diffusion systems modeling mass action chemical kinetics*(submitted).
- [10] REDHEFFER, R., REDLINGER, R. AND WALTER, W.: *A theorem of La Salle-Lyapunov type for parabolic systems*, SIAM J. Math. Anal., **1**(19) (1988), 121–132.
- [11] REDHEFFER, R. AND WALTER, W.: *On parabolic systems of Volterra predator-prey type*, J. Nonlinear Anal., **7** (1983), 333–347.
- [12] REDLINGER, R.: *Über die C^2 -Kompaktheit der Bahn von Lösungen semilinearer parabolischer System*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A, **93** (1982), 99–103.
- [13] ROTHE, F.: *Global Stability of Reaction-Diffusion Systems*, Springer, 1984, Berlin.

- [14] RUDIN, W.: *Principles of Mathematical Analysis*, 3rd edition, McGraw-Hill, 1976, New York.
- [15] SIEGEL, D. AND MACLEAN, D.: *Global stability of complex balanced mechanisms*, J. Math. Chem., **27** (2000), 89–110.
- [16] SMOLLER, J.: *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer, 1983, New York.
- [17] VASILEV, V., VOLPERT, A. AND KHUDAYEV, S.: *A method of quasi-stationary concentrations for the equations of chemical kinetics*, Zh. Vychisl. Mat. Fiz., **3**(13) (1973), 683–697.
- [18] VOLPERT, A.I.: *Differential equations on graphs*, Mat. Sb., **130**(88) (1972), 571–582.
- [19] VOLPERT, A.I. AND HUDYAEV, S.I.: *Analyses in Classes of Discontinuous Functions and Equations of Mathematical Physics*, Martinus Nijhoff Publishers, 1985, Dordrecht.
- [20] VOLPERT, A.I. AND VOLPERT, V.A. AND VOLPERT, V.L.A.: *Traveling Wave Solutions of Parabolic Systems*, American Mathematical Society, 1994, Providence, RI.

MAYA MINCHEVA

DAVID SIEGEL

Department of Applied Mathematics, University of Waterloo

Waterloo, Ont., N2L 3G1

Kanada

EGRI EDIT

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Matematikai és Informatikai Kar

400084 Kolozsvár, M. Kogălniceanu u. 1.

Románia

egriedit@yahoo.com

STABILITY OF MASS ACTION REACTION-DIFFUSION SYSTEM

MAYA MINCHEVA AND DAVID SIEGEL

TRANSLATED BY EDIT EGRI

Results on stability of two types of chemical reactions, one represented by an acyclic graph and the other as a reversible reaction have been extended to the case of reaction-diffusion systems. Lyapunov functions are used as the major method for showing asymptotic stability of spatially homogeneous equilibria. Some examples are considered for illustration.