Prof. Dr. M. Röger
Dipl.-Math. S. Hausberg

Fakultät Mathematik
Technische Universität Dortmund

7. Übungsblatt - Lösungsvorschläge

Aufgabe 23: (Ein detailed-balanced System - 4 Punkte)
Wir betrachten ein an Beispiel 3.7 angelehntes Reaktionsnetzwerk

$$\begin{array}{ccc} X_1 & \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} & X_3 \\ {\scriptstyle k_1}\downarrow\uparrow{\scriptstyle k_{-1}} & & \\ X_2 & \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} & X_3 \end{array} \qquad X_1 + X_2 \underset{k_{-4}}{\overset{k_4}{\rightleftharpoons}} 2X_4$$

Ihre Arbeitsaufträge lauten:

(i) Nehmen Sie an, dass der Vektor $n^* = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}, \frac{1}{5})^T \in (\mathbb{R}^+)^4$ und die Reaktionsraten $k_1 = 10,\ k_2 = 2,\ k_3 = 5$ und $k_4 = 8$ gegeben sind. Berechnen Sie die Reaktionsraten k_{-1}, k_{-2}, k_{-3} und k_{-4}, sodass das gegebene System in n^* detailed balanced ist.

(ii) Zeigen Sie, dass n^* ein stationärer Punkt des zugehörigen Reaktionsnetzwerks $\dot{n} = CAn^C$ ist.

Lösungsvorschlag:

zu (i) Mit Hilfe der detailed balanced Annahme aus Satz 3.21 berechnet man, dass

$$k_{-1} = 10, \quad k_{-2} = 10, \quad k_{-3} = 25, \quad k_{-4} = 50$$

gilt.

zu (ii) Durch Nachrechnen folgt:

$$\dot{n} = CAn^C = C \cdot \begin{pmatrix} -15 & 10 & 25 & 0 & 0 \\ 10 & -12 & 10 & 0 & 0 \\ 5 & 2 & -35 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & 50 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & -50 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.1 \\ 0.25 \\ 0.04 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -15 & 10 & 25 & -8 & 50 \\ 10 & -12 & 10 & -8 & 50 \\ 5 & 2 & -35 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 16 & -100 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.1 \\ 0.25 \\ 0.04 \end{pmatrix} = 0$$

Aufgabe 24: (Stetige Abhängigkeit der stationären Punkte von den Anfangsdaten - 4 Punkte)
Sei $\mathcal{R}$ ein System elementarer Reaktionen, das die Voraussetzungen aus Satz 3.21 erfüllt. Bezeichne S den zugehörigen stöchiometrischen Raum. Zu einem Intervall $I \subset \mathbb{R}$ sei eine differenzierbare Kurve

$$n_0 : I \longrightarrow (\mathbb{R}_0^+)^m$$

von „Anfangsdaten“ gegeben.
Zeigen Sie, dass eine stetig differenzierbare Abbildung

$$p : I \longrightarrow (\mathbb{R}^+)^m$$

existiert, die $t \in I$ den eindeutig bestimmten stationären Punkt der Reaktionskinetik in $n_0(t) + S$ zuordnet.

Lösungsvorschlag:

1. Fall: In einem ersten Fall sei die Kurve von Anfangswerten $n_0(t)$ komplett im affinen Unterraum $n_0(0) + S$, d.h. es gilt: $n_0(t) \subset n_0(0) + S$, für alle $t \in (-\delta, \delta)$. Aus dem Beweis von Satz 3.21 folgt, dass dann alle Startwerte in M_0 liegen und die Abbildung F_0 aus Schritt 2 genau ein Minimum hat, welches mit p^* bezeichnet wird. Somit existiert eine konstante Abbildung $\Phi : (-\delta, \delta) \longrightarrow (\mathbb{R}^+)^m$ mit $\Phi(t) \equiv p^*$.

2. Fall: Seien nun die Anfangswerte gegeben durch eine Kurve $n_0(t)$, deren Richtungsvektoren $n_0'(t)$ nicht im affinen Unterraum $n_0(t) + S$ liegen, d.h. diese Kurve von Anfangswerten verschiebt für jedes $t \in (-\delta, \delta)$ den Untervektorraum S wirklich. Aus Satz 3.21 folgt dann, dass für jedes $t \in (-\delta, \delta)$ ein eindeutig bestimmter stationärer Punkt $p^*(t)$ existiert. Somit existiert auch eine Abbildung $\Phi(t) = p^*(t)$.

3. Fall: Eine Mischform der beiden obigen Fälle. Wir können nun das Intervall $(-\delta, \delta)$ in die entsprechenden Fälle 1 und 2 zerlegen und die dort gefundenen Aussagen anwenden.

Der Beweis der letzten Aussage kann mit Hilfe des Satzes über implizite Funktionen erreicht werden. Wir finden folgende Situation:

Wir haben eine offene Umgebung $(-\delta, \delta) \subset \mathbb{R}$, welche in stetig differenzierbarer Form die Anfangswerte in Form einer Kurve parametrisiert, d.h. $t \longmapsto n_0(t)$ stetig differenzierbar. Die Eigenschaften aus Satz 3.21 sind erfüllt, also existiert eine Abbildung F_*, die lokal eine Ljapunovfunktion ist. Es gilt, dass zu $t = 0$, dem Anfangswert n_0 ein eindeutig bestimmter stationärer Punkt p^* gehört. Den Wert des stationären Punktes p^* erhielten wir über eine Minimierungsaufgabe im Unterraum $n_0 + S$ bezüglich F_*. Entlang F_* eingeschränkt auf $M_0 = (n_0 + S) \cap (\mathbb{R}^+)^m$ ist p^* das Minimum. Wenn nun $n_0(t)$ auf einer kleinen Umgebung $t \in (-\delta, \delta)$ variiert wird, sollten wir sicher stellen, dass das Differenzial der Ableitung von F_* in Richtung der Komplementärkomponente von $n_0(t) + S$ nicht verschwindet. Diese Aussage folgt über die Eigenschaft, dass

$$0 = \frac{d}{dt} F_*(p^* + s \cdot v) = \nabla F_*(p*) \cdot v$$

für kleine s und $v \in S + n_0(t)$ verschwindet. Somit ist für alle Vektoren in der Komplementärkomponente $w \in S^\perp$ dieses Skalarprodukt von Null verschieden. Aus diesem Grund können wir den Satz über implizite Funktionen anwenden und es existiert somit eine Funktion Φ, die nicht nur für jeden Anfangswert $n_0(t)$ einen bestimmten stationären Punkt $p^*(t)$ annimmt, sondern ebenfalls stetig differenzierbar ist, weshalb eine stetige Abhängigkeit von $n_0(t)$ besteht und somit $p^*(t)$ ebenfalls eine Kurve ist.

Aufgabe 25: (Flüsse auf parameterabhängigen linearen Systemen - 4 Punkte)
Betrachten Sie das lineare System

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -a & b & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Bestimmen Sie Klassen von Parametern

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \in (\mathbb{R}^+)^3,$$

sodass innerhalb der jeweiligen Klassen die von (1) erzeugten Flüsse topologisch konjugiert sind.

Hinweis: Zeigen Sie zuerst, dass $\forall (a, b, c)^T \in (\mathbb{R}^+)^3$ ein Eigenwert $\lambda_1 > 0$ existiert. Bestimmen Sie in Abhängigkeit von λ_1 die weiteren Eigenwerte und benutzen Sie Satz 4.4. Argumentieren Sie dann ähnlich wie in Beispiel 4.5.

Lösungsvorschlag:
Zunächst die Berechnung der Eigenwerte:

$$0 = \det \begin{pmatrix} -a - \lambda & b & -1 \\ 1 & -\lambda & 0 \\ 0 & -c & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda^2(a + \lambda) + c + b\lambda = -\lambda^3 - a\lambda^2 + b\lambda + c =: \phi(\lambda)$$

Es gilt $\phi(0) > 0$ und „$\phi(+\infty) = -\infty$“. Das impliziert, dass $\lambda_1 > 0$ existiert. Als Faktorisierung von ϕ erhalten wir

$$\phi(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)(\alpha\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma).$$

Es folgt: $\alpha = -1$ und $\gamma = -\frac{c}{\lambda_1}$. Die Bestimmung von β folgt durch

$$-\alpha\lambda_1 + \beta \overset{!}{=} -a \;\Rightarrow\; \beta = \alpha\lambda_1 - a.$$

Zur Kontrolle:

$$\begin{aligned} \gamma - \beta\lambda_1 &= -\frac{c}{\lambda_1} - \alpha\lambda_1^2 + a\lambda_1 \\ &= -\frac{c}{\lambda_1} + \lambda_1^2 + a\lambda_1 \\ &= \frac{-1}{\lambda_1}(-\lambda_1^3 - a\lambda_1^2 + c) \\ &= \frac{-1}{\lambda_1}(-b\lambda_1) = b. \end{aligned}$$

Weitere Eigenwerte erfüllen damit

$$
\begin{aligned}
&-\lambda^2 - (\lambda_1 + a)\lambda - \frac{c}{\lambda_1} = 0 \\
&\lambda_{2,3} = -\frac{\lambda_1 + a}{2} \pm \sqrt{\frac{(\lambda_1 + a)^2}{4} - \frac{c}{\lambda_1}}.
\end{aligned}
$$

Es können also 4 Fälle unterschieden werden:

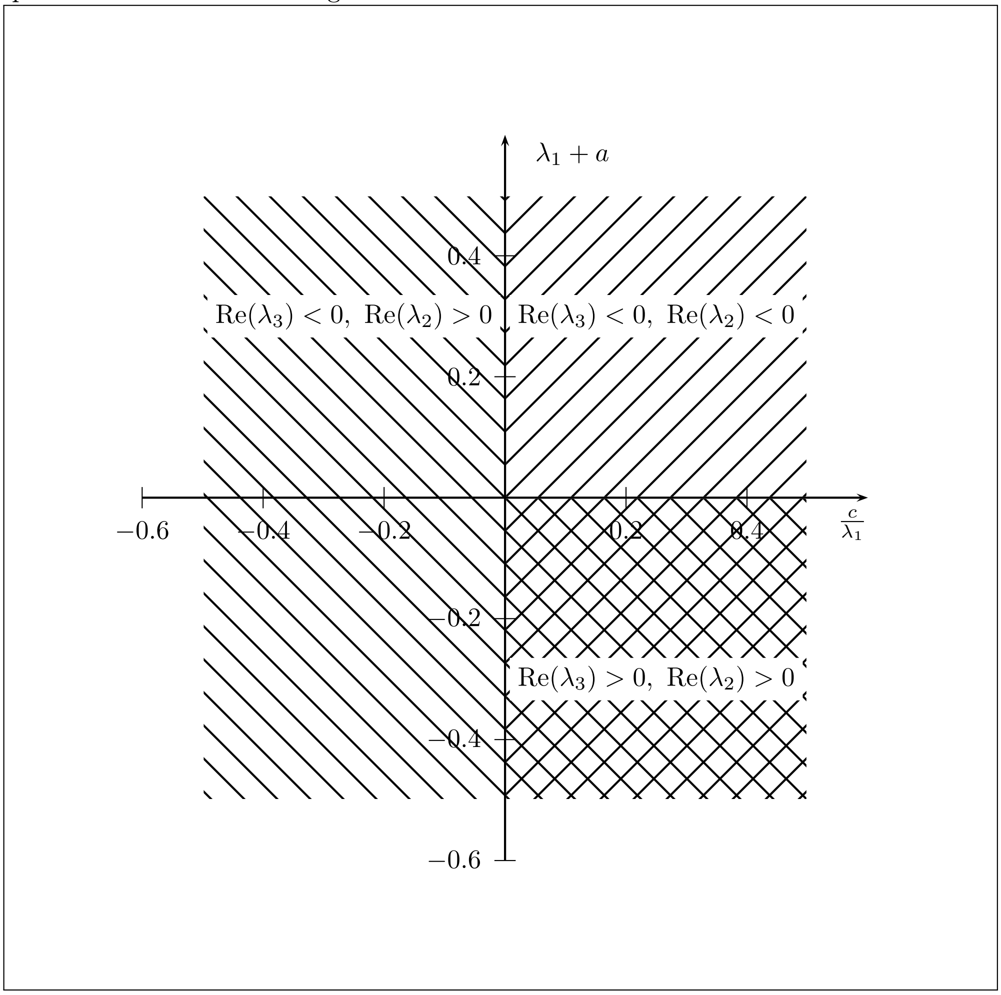
$\lambda_1 + a > 0,\ \frac{c}{\lambda_1} > 0$ Hier gilt: $\mathrm{Re}(\lambda_3) < 0$ und $\mathrm{Re}(\lambda_2) < 0$.

$\lambda_1 + a > 0,\ \frac{c}{\lambda_1} < 0$ Hier gilt: $\mathrm{Re}(\lambda_3) < 0$ und $\mathrm{Re}(\lambda_2) > 0$.

$\lambda_1 + a < 0,\ \frac{c}{\lambda_1} < 0$ Hier gilt: $\mathrm{Re}(\lambda_3) < 0$ und $\mathrm{Re}(\lambda_2) > 0$.

$\lambda_1 + a < 0,\ \frac{c}{\lambda_1} < 0$ Hier gilt: $\mathrm{Re}(\lambda_3) > 0$ und $\mathrm{Re}(\lambda_2) > 0$.

Diese Fälle lassen sich zu 3 Fällen zusammenfassen, da keine Änderung von 2. zum 3. Fall auftritt, also analog zu Beispiel 4.5. Wir haben also folgende Situation:



Aufgabe 26: (Hartman-Grobman Theorem - topologische Konjugation - 4 Punkte)
Gegeben seien die Matrizen

$$
A := \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}, \qquad B := \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}.
$$

(i) Zeigen Sie, dass A und B nicht ähnlich sind. (A und B heißen *ähnlich*, falls eine Matrix $H \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ mit vollem Rang existiert, sodass $HA = BH$ gilt.)

(ii) Zeigen Sie, dass die jeweiligen Flüsse $\varphi_t(x) = e^{tA}x$ und $\psi_t(y) = e^{tB}y$ topologisch konjugiert sind und berechnen Sie einen konkreten Homeomorphismus h, sodass

$$
h(\varphi_t(x)) = \psi_t(h(x)) \text{ gilt.}
$$

Lösungsvorschlag:

(i) Wir nehmen an, dass $(u,v)^T$ eine Spalte von H ist. Für die Ähnlichkeit der beiden Matrizen A und B gilt dann also

$$\begin{aligned} -2u + v &= -2u, \text{ und} \\ -2v &= -2v. \end{aligned}$$

Es folgt also $v = 0$ und $u = c$ für jede Spalte. Somit kann H nicht vollen Rang besitzen und demnach sind A und B nicht ähnlich.

(ii) Die zugehörigen Flüsse sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \varphi_t(x) &= (e^{-2t}x_1, e^{-2t}x_2), \\ \psi_t(y) &= (e^{-2t}(y_1 + ty_2), e^{-2t}y_2). \end{aligned}$$

Wir schreiben die Abbildung h komponentenweise als $y = h(x) = (h_1(x_1,x_2), h_2(x_1,x_2))$. Unsere Bestimmungsgleichungen lauten also

$$h_1(e^{-2t}x_1, e^{-2t}x_2) = e^{-2t}(h_1(x_1,x_2) + th_2(x_1,x_2)) \tag{2}$$

$$h_2(e^{-2t}x_1, e^{-2t}x_2) = e^{-2t}(h_2(x_1,x_2)) \tag{3}$$

Es folgt, dass $h_2(x_1,x_2) = x_2$ Gleichung (3) löst. Für Gleichung (2) nehmen wir eine Funktion $h_1(x_1,x_2) = x_1 + f(x_2)$ an und separieren somit die Unbekannten. Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} e^{-2t}x_1 + f(e^{-2t}x_2) &= e^{-2t}(x_1 + f(x_2) + tx_2) \\ f(e^{-2t}x_2) &= e^{-2t}(f(x_2) + tx_2) \end{aligned}$$

Eine solche Funktion f ist beispielsweise gegeben durch $f(x) = -\frac{1}{2}x\ln|x|$. Hierbei sei $f(0) = 0$ definiert, wodurch f stetig in 0 wird. Insgesamt haben wir also eine stetige Abbildung h gefunden, die durch

$$h(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} x_1 - \frac{1}{2}x_2\ln|x_2| \\ x_2 \end{pmatrix}$$

gegeben ist. Zusammen mit Aufgabenteil (i) verdeutlicht diese Aufgabe, dass topologische Konjugation insbesondere durch nichtlineare stetige Abbildungen realisiert werden und Ähnlichkeitstransformationen nur auf linearen Abbildungen beruhen.