

# Az “On the Positive Steady States of Deficiency-One Mass Action Systems” című Ph.D. értekezés összefoglalása

Boros Balázs

A kémiai reakcióhálózatok elméletének alapjait Feinberg, Horn és Jackson fektették le az 1970-es években. Az elmélet kémiai és biológia rendszerek matematikai modelljének vizsgálatával foglalkozik. Az értekezés célja, hogy bemutassuk és továbbfejlesszük a tömeghatás kinetikájú rendszerek *deficiencia-orientált* eredményeit. A klasszikus 0- és 1-*Deficiencia Tételek* a rendszer pozitív egyensúlyi pontjainak létezésével, egyértelműségével és stabilitásával foglalkoznak. Fő célkitűzésünk olyan 1-deficienciájú tömeghatás kinetikájú rendszerek pozitív egyensúlyi pontjainak létezését vizsgálni, melyek nem teljesítik az 1-Deficiencia Tétel feltételeit.

Az 1-Deficiencia Tétel szerint minden egyetlen láncosztállyal rendelkező gyengén megfordítható 1-deficienciájú tömeghatás kinetikájú rendszernek pontosan egy pozitív egyensúlyi pontja van minden pozitív sztöchiometriai osztályában (függetlenül a sebességi együtthatók értékeitől). Ha elhagyjuk a gyenge megfordíthatóságot, viszont feltesszük, hogy létezik pozitív egyensúlyi pont, akkor az előző tétel következtetése érvényben marad. Azonban a nem gyengén megfordítható esetben a pozitív egyensúlyi pontok létezésével kapcsolatban korábban nem születtek eredmények. Az értekezésben megmutatjuk, hogy a pozitív egyensúlyi pontok létezéséhez egy triviálisan adódó szükséges feltétel egyúttal elégséges is. Ezzel teljessé tesszük az 1-Deficiencia Tételt a pozitív egyensúlyi pontok létezése tekintetében. A kapott ekvivalens feltételben szerepelnek a sebességi együtthatók, így természetes módon vetődik fel az igény, hogy karakterizáljuk azon reakcióhálózatokat, melyek esetén a pozitív egyensúlyi pontok létezése nem függ a hálózathoz rendelt sebességi együtthatók értékeitől. Összetettebb gráfelméleti gondolatmenetek felhasználásával bemutatunk egy ilyen karakterizációt az értekezésben.

Az 1-Deficiencia Tétel más irányú általánosításaként megmutatjuk, hogy minden több láncosztállyal rendelkező gyengén megfordítható 1-deficienciájú tömeghatás kinetikájú rendszernek létezik pozitív egyensúlyi pontja minden pozitív sztöchiometriai osztályában (függetlenül a sebességi együtthatók értékeitől). Időközben kiderült, hogy tőlünk függetlenül Deng, Feinberg, Jones és Nachman ugyanerre a következtetésre jutott, ők azonban nem tételeztek fel semmit a deficienciáról. Így az ő (egyelőre nem publikált) eredményük lényegesen általánosabb a miénkénél. Deng és mtsai. geometriai eszközöket használnak, míg mi főképpen algebrai módszereket alkalmazunk. A Deng és mtsai. által bemutatott gondolatmenet legtöbb közbülső eredményénél lényegesen szerepe van a gyenge megfordíthatóságnak, míg a mi bizonyításunkban ez csak a záró lépések során válik fontossá. Nálunk inkább a deficienciáról tett megkötés játssza az alapvető szerepet.