arXiv:2304.03611v1 [math.DS] 7 Apr 2023

秩一动力学系统中的绝对浓度鲁棒性

预印本

爱德华多·R.·门多萨[*†]
数学与统计学系 自然科学与环境研究中心 德拉萨尔大学 马尼拉 0922，菲律宾
eduardo.mendoza@dlsu.edu.ph

DylanAntonio SJ. Talabis菲律宾大学洛斯巴尼奥斯校区数学科学与物理研究所，菲律宾拉古纳省 4031，
dstalabis1@up.edu.ph

伊迪莎·C·何塞菲律宾大学洛斯巴尼奥斯分校数学科学与物理研究所，拉古纳省 4031，菲律宾 ecjose1@up.edu.ph

劳罗·L·丰塔尼尔[†‡]菲律宾洛斯巴尼奥斯拉古纳4031数学科学与物理研究所，菲律宾 llfontanil@up.edu.ph

2023年4月10日

摘要

如果某个分子物种的浓度在系统的每个正稳态中都保持不变，则该动力学系统对该物种具有绝对浓度鲁棒性（ACR）。就在最近，人们发现了一个条件，足以保证秩一质量作用动力学系统中存在 ACR。本文将说明，该 ACR 判据通常并不适用于幂律动力学系统。此外，本文还讨论了多稳态秩一动力学系统中 ACR 的一个必要条件，可用于 ACR 分析。最后，本文将引入一种动力学系统平衡态变化的概念，该概念以系统中 ACR 物种的数量为依据。

1 引言

鲁棒性是指系统在存在内部或外部压力的情况下维持基本功能的能力 [17]。这是帮助生物系统适应环境变化并蓬勃发展的重要特征。人们已经识别出多种类型的鲁棒性，但本文关注的是要求系统的正稳态具备某些特性的鲁棒性。

如 [24], 所定义，如果在生物系统所允许的每个正稳态下，某分子物种的浓度都相同，则该系统对该物种具有绝对浓度鲁棒性（ACR）。识别系统的稳态并非易事，因此这种性质也难以确定。Shinar 和 Feinberg 提出了一项充分条件，

[*]马克斯·普朗克生物化学研究所，德国慕尼黑附近的马丁斯里德
[†]物理学院，路德维希-马克西米利安大学，德国慕尼黑80539
[‡]通讯作者

该条件可保证亏格为一的质量作用动力学（MAK）系统具有 ACR [24]。该条件要求相应网络中存在两个非终端络合物，且它们仅在某个特定物种上有所不同。这种结构条件在大多数小型网络中很容易观察到，因此具有一定优势。

2018年，Fortun等人证明，Shinar和Feinberg的结果可以直接推广到具有反应物决定相互作用（PL-RDK）的亏格为一的幂律动力学系统 [13]。PL-RDK系统是一种比MAK系统更一般的动力学系统；MAK系统要求具有相同反应物复合物的反应具有相同的动力学阶数向量。在MAK系统中，动力学阶数向量的各元素就是相应反应物复合物中的化学计量系数。

上述结果所提到的亏格为一要求，在分析一个系统具备实现绝对浓度鲁棒性（ACR）的能力时具有很大的局限性。幸运的是，Fortun和Mendoza [11] 以及Lao等人 [18]提出了更为一般的结果，这些结果不要求网络具有特定的亏格。他们的结果利用了网络分解这一概念，即对网络的反应集进行划分，使得每个分区都生成一个小于给定网络的网络（称为子网络）。随后，分析集中于包含Shinar-Feinberg对（SF对）的低亏格子网络（亏格至多为一）。SF对是这样一对反应：它们的动力学级数向量仅在某个特定物种上有所不同。这一结果使得绝对浓度鲁棒性（ACR）的判定可以局限于已识别出的子网络，而这些子网络相对更易于处理。

最近，Meshkat 等人 [20] 给出了秩为一的 MAK 系统中存在稳定绝对浓度鲁棒性的充要条件。如果一个系统具有某个绝对浓度鲁棒性，且其每个正稳态都是稳定的，则称该系统具有稳定绝对浓度鲁棒性。然而，与 Horn 和 Jackson 在 1972 [15] 中针对低亏格系统给出的充分条件（ Fortun 和 Mendoza 在 2021 [11] 中对其进行了推广）以及 Shinar 和 Feinberg 在 2010 [24]中给出的充分条件相比，这一绝对浓度鲁棒性判据通常无法推广到 PL-RDK系统。本文讨论了该绝对浓度鲁棒性判据的反例以及 PL-RDK系统的示例。

本文还讨论了多稳态秩一动力学系统中 ACR 的一个必要条件。通过 Pantea 和 Voitiuk 在 2022 [26] 中引入的多稳态秩一质量作用系统类别的示例，展示了这一条件在 ACR 分析中的应用。此外，本文还引入了一个基于 ACR 物种数量的动力学系统平衡态变化概念，并推导了其基本性质，还计算了零缺陷 PL-RDK 系统的一般下界。然而，对于多稳态秩一系统，这一必要条件给出的下界要精确得多。

本文的组织结构如下。第2节介绍化学反应网络、动力学系统和鲁棒性的基本概念。第3节提出将Meshkat等人在 PLK 系统中的结果加以推广的问题。第4节给出秩一多稳态动力学系统中绝对浓度鲁棒性的必要条件。第5节讨论绝对浓度鲁棒性和平衡态变化。最后一节对全文进行总结并展望未来。

2 化学反应网络与动力学系统基础

2.1 化学反应网络的结构

本节将回顾有关化学反应网络的一些必要概念和结果，详情可参见 [2, 6, 11]。

首先，我们介绍本文中使用的一些记号。实数、非负实数和正实数的集合分别记为 $\mathbb{R}, \mathbb{R}_{\geq 0}$ 和 $\mathbb{R}_{>0}$。设 $\mathscr{I}$ 是一个有限指标集，$\mathbb{R}^{\mathscr{I}}$ 表示定义域为 $\mathscr{I}$ 的实值函数的通常向量空间，其中加法、减法和数乘均按通常方式定义。对于 $x \in \mathbb{R}^{\mathscr{I}}$ 和 $i \in \mathscr{I}$，x_i 表示 x的 i^{th} 坐标。最后，如果 $x \in \mathbb{R}^{\mathscr{I}}_{>0}$ 和 $y \in \mathbb{R}^{\mathscr{I}}$，则 $x^y \in \mathbb{R}^{\mathscr{I}}_{>0}$ 定义为 $x^y = \prod_{i \in \mathscr{I}} x_i^{y_i}$。

定义2.1.1。 A **化学反应网络** 是三个非空有限集合的三元组 $\mathscr{N} = (\mathscr{S}, \mathscr{C}, \mathscr{R})$:

1. 一个集合**物种** $\mathscr{S}$;

2. 一组 $\mathscr{C}$ 的**复合物**，它们是物种的非负整数线性组合；一个
d 3. 一组 $\mathscr{R} \subseteq \mathscr{C} \times \mathscr{C}$ 反应，使得

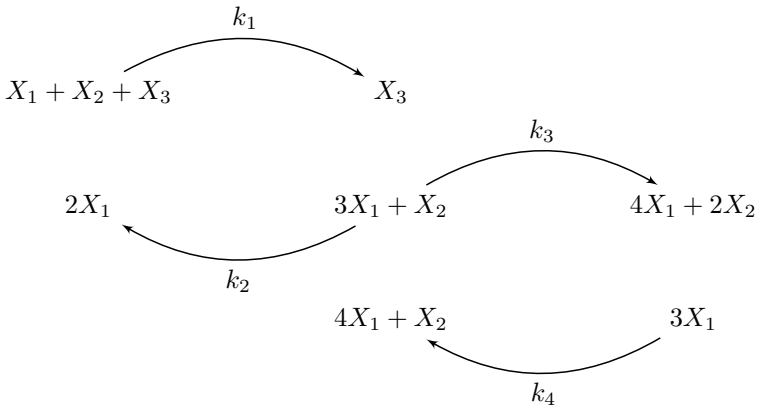
- $(y, y) \notin \mathscr{R}$ 对于所有 $y \in \mathscr{C}$，且
- 对于每个 $y \in \mathscr{C}$，都存在一个 $y' \in \mathscr{C}$ 使得 $(y, y') \in \mathscr{R}$ 或 $(y', y) \in \mathscr{R}$。

复合物中物种的非负系数称为**化学计量系数**。在本文中，反应 $R_i = (y_i, y_i')$ 也记作 $R_i: y_i \to y_i'$ 和 y_i 和 y_i' 分别称为R_i的**反应物** 和**生成物复合物** 。此外，我们用符号 σ, κ 和 ρ 分别表示物种、复合物和反应的数量。下面的例子展示了 CRN 可以表示为有向图，其中复合物和反应分别作为该有向图的顶点和弧。

运行示例 1

化学反应网络（CRN）可以表示为有向图。顶点或节点是复合物，反应是边。该化学反应网络并不唯一，也可能没有物理解释。让我们考虑

以下反应网络：



k_i 被称为反应速率常数。我们有 $m = 3$ （物种）、 $n = 7$ （复合物）、 $n_r = 3$ （反应物复合物）和 $r = 4$（反应）。在这里，我们可以写出

$$\mathscr{S} = \{X_1, X_2, X_3\}, \quad \mathscr{C} = \{X_1 + X_2 + X_3, X_3, 2X_1, 3X_1 + X_2, 4X_1 + 2X_2, 4X_1 + X_2, 3X_1\}.$$

另一方面，反应集合 $\mathscr{R}$ 由以下部分组成：

$$\begin{array}{ll} R_1 : X_1 + X_2 + X_3 \to X_3 & R_3 : 3X_1 + X_2 \to 4X_1 + 2X_2 \\ R_2 : 3X_1 + X_2 \to 2X_1 & R_4 : 3X_1 \to 4X_1 + X_2 \end{array}$$

我们将反应网络 $\mathscr{N}$记为 $\mathscr{N} = (\mathscr{S}, \mathscr{C}, \mathscr{R})$。反应网络的**连接类**是反应图的子图，其中，对于子图中的任意络合物 C_i、 C_j，两者之间都存在一条路径。因此，运行示例 1 的连接类数量记为 l，为三（$l = 3$）。连接类如下：

$$\mathscr{L}_1 = \{R_1\}, \quad \mathscr{L}_2 = \{R_2, R_3\} \quad \mathscr{L}_3 = \{R_4\}.$$

连接类的一个子集，如果其中任意两个顶点都能沿两个方向分别通过有向路径相连，则称为**强连接类**。对于运行示例 1，不存在强连接类，其数量记为 sl。我们还确定**终端强连接类**，其数量记为 t；这类强连接类中，不存在从类内某个络合物指向类外络合物的反应。终端强连接类可以分为两种：循环（不一定是简单循环）和单点（我们称之为“终端点”）。

现在我们定义重要的 CRN 类。如果每个连接类都是强连接类，则称 CRN 为**弱可逆**。如果 $t = l$，即每个连接类只有一个终端强连接类，则称 CRN 为**t-极小**。设 n_r 为某个 CRN 的反应物复合物数量。那么 $n - n_r$ 就是终端点的数量。如果且

仅当 $n - n_r = 0$，即每个复合物都是反应物复合物。显然，运行示例 1 中的 CRN 既不是 t-极小的，也不是弱可逆的。

对于每个反应 $y \to y'$，我们通过从产物络合物 y'中减去反应物复合物 y，将其与一个 **反应向量**相关联。CRN 的**化学计量子空间** S 是由 $\mathbb{R}^{\mathscr{S}}$ 定义的线性子空间

$$S := \text{span}\left\{y' - y \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}} \mid y \to y' \in \mathscr{R}\right\}.$$

复合物映射 Y：$\mathbb{R}^{\mathscr{C}} \to \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{\geq}$将基向量 ω_y 映射到复合物 $y \in \mathscr{C}$。**关联映射**I_a：$\mathbb{R}^{\mathscr{R}} \to \mathbb{R}^{\mathscr{C}}$ 定义为：对于每个反应 R_i：$y \to y' \in \mathscr{R}$，将基向量 ω_{R_i}（或简称 ω_i）映射到向量 $\omega_{y'} - \omega_y \in \mathscr{C}$。**化学计量映射** N：$\mathbb{R}^{\mathscr{R}} \to \mathbb{R}^{\mathscr{S}}$ 定义为 $N = Y \circ I_a$。

在运行示例 1 中，矩阵 Y和 I_a 是

$$Y = \begin{array}{c} \begin{matrix} C_1 & C_2 & C_3 & C_4 & C_5 & C_6 & C_7 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 3 & 4 & 4 & 3 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} \\ X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{matrix}$$

$$I_a = \begin{array}{c} \begin{matrix} R_1 & R_2 & R_3 & R_4 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 \\ C_7 \end{matrix}.$$

亏格 δ 定义为 $\delta = n - l - \dim S$。正如 Shinar 和 Feinberg 在 [25], 中指出的，这个非负整数本质上衡量了网络中反应的线性依赖性。在运行示例 1 中，该网络的亏格为 3。

2.2 化学反应网络的动力学

一个**动力学** 是为CRN中的每个反应分配速率函数。网络 $\mathscr{N}$与动力学 K 一起称为**化学动力学系统** （化学动力学系统），在此记作 $(\mathscr{N},\ K)$。**幂律动力学**由 **动力学级数矩阵**确定，该矩阵是一个 $\rho \times \sigma$ 矩阵 $F = [F_{ij}]$ 和向量 $k \in \mathbb{R}^{\mathscr{R}}_{>0}$，称为**速率向量**。

定义 2.2.1。 动力学 K：$\mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>0} \to \mathbb{R}^{\mathscr{R}}$ 是 **幂律动力学** 如果

$$K_i(x) = k_i x^{F_{i,\cdot}} \text{ for } i = 1, \ldots, r$$

其中，$k_i \in \mathbb{R}_{>0}$、$F_{i,\ j} \in \mathbb{R}$和$F_{i,\ \cdot}$ 是与反应 R_i相关联的 F 行。

我们可以根据分配给其**分支反应**的动力学级数对PLK系统进行分类（即，共享同一反应物复合物的反应）。

定义 2.2.2. 如果对于任意两个分支反应 R_i, $R_j \in \mathscr{R}$，其在 F中的动力学级数对应行都相同，即 $F_{ih} = F_{jh}$ 对于 $h = 1, \ldots, m$，则 PLK 系统具有**反应物决定型动力学**（PL-RDK 类型）。否则，PLK 系统具有**非反应物决定型动力学**（PL-NDK 类型）。

考虑运行示例 1 中的 CRN，其动力学级数矩阵如下。

$$F = \begin{array}{c} \begin{matrix} X_1 & X_2 & X_3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \end{matrix}.$$

注意， R_2 和 R_3 是两个分支反应，它们在 F（或**动力学级数向量**）中的对应行相同。因此，该 CRN 是一个 PL-RDK 系统。

著名的**质量作用动力学系统**（MAK）是 PL-RDK 系统的一个子集。具体而言，对于所有反应 R_i : $y_i \to y_i' \in \mathscr{R}$，MAK 由 $K_i(x) = k_i x^{Y_{\cdot,i}}$ 给出，其中 $k_i \in \mathbb{R}_{>0}$（称为**速率常数**）。向量$Y_{\cdot,i}$ 包含反应物复合物 $y_i \in \mathscr{C}$的化学计量系数。

定义 2.2.3。 化学动力学系统的**物种生成速率函数**是如下向量场

$$f(c) = NK(c) = \sum_{y_i \to y_i' \in \mathscr{R}} K_i(c)(y_i' - y_i), \text{ where } c \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{\geq 0},$$

其中 N是 $m \times r$ 矩阵，称为**化学计量矩阵**，其列为系统的反应向量。方程 $dc/dt = f(c(t))$ 是该化学动力学系统的**常微分方程（ODE）或动力系统**。满足 $f(c^*) = 0$ 的 $c^* \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>0}$称为系统的**正平衡态**或**稳态**。我们用 $E_+(\mathscr{N}, K)$ 表示化学动力学系统所有正平衡态构成的集合。

亏格是化学反应网络理论（CRNT）中的重要参数之一，可用于确立有关正稳态集合的存在性、多重性、有限性和参数化的结论。

运行示例 1 的动力系统 $f(x)$（或物种生成速率函数（SFRF））可写为

$$\begin{bmatrix} \dot{X}_1 \\ \dot{X}_2 \\ \dot{X}_3 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{matrix} R_1 & R_2 & R_3 & R_4 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} k_1 X_3^2 \\ k_2 X_1 X_2 \\ k_3 X_1 X_2 \\ k_4 X_1 \end{bmatrix} = NK(x).$$

An类似于物种生成速率函数，我们也有络合物生成速率函数。 n.

定义 2.2.4。该**络合物生成速率函数** g： $\mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>0} \to \mathbb{R}^{\mathscr{C}}$ 是化学动力学系统的向量场

$$g(c) = I_a K(c) = \sum_{y_i \to y_i' \in \mathscr{R}} K_i(c)(\omega_{y_i'} - \omega_{y_i}), \text{ where } c \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{\geq 0}.$$

其中， I_a 是关联映射。如果一个 CKS 存在络合物平衡稳态，则称其为**络合物平衡**，也就是说，存在一个组成 $c^{**} \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>0}$，使得 $g(c^{**}) = 0$。我们用 $Z_+(\mathscr{N}, K)$ 表示该系统所有络合物平衡稳态的集合。

定理2.2.1 (推论 4.8, [7])。如果一个化学动力学系统的亏格为 *0*，那么其稳态均为络合物平衡。

2.3 浓度鲁棒性的简要回顾

绝对浓度鲁棒性（ACR）的概念最早由 Shinar 和 Feinberg 在发表于《科学》 [24]上的一篇广受引用的论文中提出。ACR 指的是这样一种现象：无论初始条件如何，动力学系统中的某个物种在网络可能具有的任意正稳态下都具有相同的取值。特别是，若某个 PL-RDK系统（$\mathscr{N}, K$）在物种 $X \in \mathscr{S}$上具有 ACR，则存在 $c^* \in E_+$（$\mathscr{N}, K$），并且对于每个其他的 $c^{**} \in E_+$（$\mathscr{N}, K$），都有 $c_X^{**} = c_X^*$，其中 c_X^{**}和 c_X^* 分别表示 X 在 c^* 和 c^{**}中的浓度。

Fortun和Mendoza [11] 强调，ACR作为一种动力学性质，在动力学等价下保持不变，即它们生成相同的常微分方程集合。他们还研究了幂律动力学系统中的ACR，并推导出新的结果，保证某些类别的PLK系统具有ACR。对于这些PLK系统，物种 X 具有ACR的关键性质是存在一对Shinar–Feinberg 反应对。在PLK系统中，若一对反应的动力学阶数向量仅在 X上不同，则称其为**Shinar-Feinberg对**（或**SF对**），且涉及物种 X。若PLK系统的某个子网络在 X中包含一对SF对，则该子网络具有**Shinar–Feinberg 型**。

3 秩一系统绝对浓度鲁棒性判据的推广问题

最近，Meshkat等人给出了一个必要且充分的条件，以保证秩一质量作用动力学系统中存在稳定绝对浓度鲁棒性 [20]。如果一个系统具有绝对浓度鲁棒性，且其每个正稳态都是稳定的，则称该系统具有稳定绝对浓度鲁棒性。该条件要求存在一个遵循某些结构的嵌入式单物种网络，而这些结构是使用箭头图描述的。

3.1 Meshkat 等人关键研究成果回顾

如果存在一个物种 A_i，使得对于所有物种 $A_j \in S - \{A_i\}$，$(y,\ y') \in \mathscr{R}$蕴含$y_j = y_j' = 0$，则称网络 $\mathscr{N} = (\mathscr{S},\ \mathscr{C},\ \mathscr{R})$ 为单物种网络。换言之，该网络中的每个络合物都具有 kA_i 的形式，其中 k 是非负整数。以下定义和例子取自 [20]。

定义 3.1.1。 设 $\mathscr{N}=(\{A\},\ \mathscr{C},\ \mathscr{R})$ 是一个具有 $|\mathscr{R}|\geq 1$ 的单物种网络。设 $\mathscr{N}$ 的每个反应都具有 $aA\to bA$ 的形式，其中 $a,\ b\geq 0$ 且 $a\neq b$。假设 $\mathscr{N}$ 有 m 个不同的反应物复合物，它们的化学计量物种为 $a_1<a_2<\cdots<a_m$。 $\mathscr{N}$ 的**箭头图**记为 $\rho=(\rho_1,\ \rho_2,\ \ldots\ldots,\ \rho_m)$，是 $\{\rightarrow,\leftarrow,\longleftrightarrow\}^m$ 中的元素，其定义如下：

$$\rho_i=\begin{cases}\rightarrow & \text{if for all reactions } a_iA\to bA \text{ in } G,\ \text{it is the case that } b>a_i\\ \leftarrow & \text{if for all reactions } a_iA\to bA \text{ in } G,\ \text{it is the case that } b<a_i\\ \longleftrightarrow & \text{otherwise}\end{cases}$$

例 3.1.1. 考虑由 $\{B\to A, 2A+B\to A+2B\}$ 确定的网络。移除物种 A 后，得到的嵌入网络具有反应集 $\{0\leftarrow B\to 2B\}$，其箭头图为 $(\longleftrightarrow)$。另一方面，移除 B 后得到的嵌入网络为 $\{0\to A, A\to 2A\}$，其箭头图为 $(\rightarrow,\ \leftarrow)$。

以下是 [20] 中的主要结果，它给出了某些秩一质量作用动力学系统存在绝对浓度鲁棒性的充要条件。他们的结果基于箭头图这一概念。

定理 3.1.1. 令 t $\mathscr{N}$ 是一个秩为一、物种为 A_1、A_2、……、A_m 的网络。那么，以下条件等价：

1. $\mathscr{N}$ 具有稳定绝对浓度鲁棒性，并且存在一个正状态。

2. 存在一个物种 A_{i^*}，使得以下条件成立：

   (a) 对于通过移除除 A_{i^*}以外的所有物种而从 $\mathscr{N}$得到的嵌入网络，其箭头图具有以下形式之一：

$$\begin{matrix}(\longleftrightarrow,\leftarrow,\leftarrow,\ldots,\leftarrow), & (\rightarrow,\rightarrow,\ldots,\rightarrow,\longleftrightarrow)\\ (\rightarrow,\rightarrow,\ldots,\rightarrow,\longleftrightarrow,\leftarrow,\leftarrow,\ldots,\leftarrow), & (\rightarrow,\rightarrow,\ldots,\rightarrow,\leftarrow,\leftarrow,\ldots,\leftarrow)\end{matrix}\tag{3.1.1}$$

   (b) $\mathscr{N}$的反应物复合物仅在物种 A_{i^*} 上有所不同（即，若 y 和$\hat{}y$ 均为反应物复合物，则对所有 $i\neq i^*,\ y_i=\hat{}y_i$）。

请注意，在上述例子中，从 $\mathscr{N}$中移除物种 A 后得到的嵌入网络，其箭头图为（$\longleftrightarrow$），属于上述定理所列举的箭头图。此外， $\mathscr{N}$中的反应物复合物仅在 A上有所不同。因此， $\mathscr{N}$具有稳定绝对浓度鲁棒性。

3.2 不满足绝对浓度鲁棒性判据的 PL-RDK系统示例

下面是 PLK-系统和形式化中定理 3.1.1充分条件的直接改写。设 $(\mathscr{N},\ K)$ 是一个具有物种 $A_1,\ A_2$、……、A_m的秩一 PLK-系统。此外，设 F为该系统的动力学级数矩阵。那么，$\mathscr{N}$具有绝对浓度鲁棒性，当且仅当存在物种 A_{j^*} 使得以下条件成立

1.对于通过移除除 A_{j^*} 之外的所有物种而获得的 $\mathscr{N}$ 嵌入网络，箭头图具有以下形式之一：

$$\begin{array}{cc} (\longleftrightarrow, \leftarrow, \leftarrow, \ldots, \leftarrow), & (\rightarrow, \rightarrow, \ldots, \rightarrow, \longleftrightarrow) \\ (\rightarrow, \rightarrow, \ldots, \rightarrow, \longleftrightarrow, \leftarrow, \leftarrow, \ldots, \leftarrow), & (\rightarrow, \rightarrow, \ldots, \rightarrow, \leftarrow, \leftarrow, \ldots, \leftarrow) \end{array} \tag{3.2.1}$$

2. 动力学级数向量两两构成 SF对，其中 A_{j^*} （即，对于所有 $j \neq j^*$， $F_{ij} = F_{lj}$ ）。

下面的反例表明，上述陈述不一定成立。

例 3.2.1.考虑 $\mathscr{N} = (\{A, B\}, \mathscr{C}, \mathscr{R})$，其中 $\mathscr{R}$ 由以下反应和速率常数组成：

$$\begin{aligned} R_1: &\quad B \xrightarrow[r_1]{} A \\ R_2: &\quad 2A + B \xrightarrow[r_2]{} 3A \\ R_3: &\quad 3A + B \xrightarrow[r_3]{} 2A + 2B \\ R_4: &\quad 4A + B \xrightarrow[r_4]{} 3A + 2B \end{aligned}$$

这是一个秩一网络，其化学计量子空间为 $S = \text{span } \{A - B\}$。假设它具有

幂律动力学，其动力学级数矩阵如下：

$$F = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} A & B \end{array} \\ \begin{bmatrix} p_1 & q \\ p_2 & q \\ p_3 & q \\ p_4 & q \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \end{array}$$

其中， p_i为整数。移除 B后，我们得到如下嵌入网络。

$$\begin{array}{c} 0 \rightarrow A \\ 2A \leftrightarrow 3A \leftarrow 4A \end{array}$$

在该网络中的四个不同反应物复合物所对应的箭头图如下（$\rightarrow$， $\rightarrow$， $\leftarrow$， $\leftarrow$）。

现在注意到，$(\mathscr{N}, K)$ 满足以下常微分方程：

$$\begin{aligned} \dot{A} = &\quad r_1 A^{p_1} B^q + r_2 A^{p_2} B^q - r_3 A^{p_3} B^q - r_4 A^{p_4} B^q \\ \dot{B} = &\quad -r_1 A^{p_1} B^q - r_2 A^{p_2} B^q + r_3 A^{p_3} B^q + r_4 A^{p_4} B^q \end{aligned}$$

求解正平衡态时，将其中一个方程设为零，得到

$$\begin{aligned} B^q (r_1 A^{p_1} + r_2 A^{p_2} - r_3 A^{p_3} - r_4 A^{p_4} &= 0 \\ \Leftrightarrow r_1 A^{p_1} + r_2 A^{p_2} - r_3 A^{p_3} - r_4 A^{p_4} &= 0 \end{aligned}$$

注意，当 $p_1 < p_2 < p_3 < p_4$ 时，多项式

$$r_1 A^{p_1} + r_2 A^{p_2} - r_3 A^{p_3} - r_4 A^{p_4} \tag{3.2.2}$$

根据笛卡尔符号法则，该方程恰好有一个正根。这意味着该系统在 A 中具有绝对浓度鲁棒性。另一方面

另一方面，假设

$$\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \text{ and } \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

那么，式 (3.2.2) 中的多项式变为

$$4 + A^3 - 2A - 3A^2 = 4 - 2A - 3A^2 + A^3 \tag{3.2.3}$$

该多项式有两个正根，即 1 和 $1 + \sqrt{5}$。这意味着在这种情况下，该系统在 A 中没有绝对浓度鲁棒性。

从上述反例中可以观察到， p_i 的参数发挥了关键作用。如果这些参数未经过仔细选择，系统中可能无法观察到绝对浓度鲁棒性。当 p_i为非整数时，问题会变得更加复杂，因为式 (3.2.2)中多项式的可解性可能无法立即确定。这不利于将Meshkat等人 的结果推广到允许 p_i 为实数的 PLK 系统。

3.3 质量作用系统齐次 PL 商系统的稳定绝对浓度鲁棒性判据

在本节中，我们介绍满足稳定绝对浓度鲁棒性判据的质量作用系统齐次单项式商集合（PL-MMK）。为了定义 PL-MMK，我们回顾 [16] 中的一些定义和结果。

定义3.3.1。 若对所有$x \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>}$及每个反应 q， $K_q(x)$ $K'_q(x)$ 都仅是 x 的正函数，即与 q.无关，则称 K， K' 中的两个动力学为**正函数因子等价**（PPF等价）。

以下命题阐述了 PFF-等价性的一个关键性质：

命题3.3.1 ([16])。如果 K、 K' 是*PPF*，则 $E_+(\mathscr{N}$、 $K) = E_+(\mathscr{N}$、 $K')$。

设 $(\mathscr{N}, K)$ 是一个含有 m 个物种和 r 个反应的 MAK 系统，$(\beta_1, \cdots, \beta_m)$ 是任意实向量。设 F_{MAK} 和 F_β 是如下定义的 $r \times m$ 矩阵：

- $F_{MAK,\ q} = Y_\rho^{\top}{}_{(q)}$ ，其中 q 是一种反应， Y是（$\mathscr{N}$， K）的络合物矩阵。
- F_β 具有相同行 $\beta = (\beta_1, \cdots, \beta_m)$。

定义 3.3.2。MAK系统的一个**齐次 PL商**是一个具有相同速率常数和动力学级数矩阵 的 PLK系统 $(\mathscr{N}, K_{PLK})$，其形式为 $(\mathscr{N}, K)$。

我们得到以下结果：

命题3.3.2。对于秩一质量作用系统的齐次 *PL*-商，稳定绝对浓度鲁棒性判据成立。

证明。 令 $(\mathscr{N}, K_{PLK})$ 为秩一 MAK 系统 $(\mathscr{N}, K)$ 的齐次 PL 商，其中$(\mathscr{N}, K)$满足稳定绝对浓度鲁棒性判据。对于每个物种，记为 $X_i^{\alpha_i} = X_i^{\beta_i}(X_i^{\alpha_i - \beta_i})$。对于反应 q，每个 $K_q(x) =$

$k_q \prod X_i^{\beta_i} \prod (X_i^{\alpha_i - \beta_i})$。请注意， $\prod X_i^{\beta_i}$与反应 q无关，因此，根据定义3.3.1， K_{PLK}和K是PFF等价的。根据命题3.3.1， $E_+(\mathscr{N},\ K) = E_+(\mathscr{N},\ K_{PLK})$。因此，它们的绝对浓度鲁棒性相同，所以$(\mathscr{N},\ K_{PLK})$也满足稳定绝对浓度鲁棒性判据。

□

4 多稳态秩一动力学系统中绝对浓度鲁棒性的必要条件

在本节中，我们给出任意多稳态秩一动力学系统中出现绝对浓度鲁棒物种的必要条件。我们引入共保守动力学系统这一类，并证明这类多稳态秩一系统不含任何绝对浓度鲁棒物种。我们还利用 Pantea 和 Voitiuk 最近提出的此类系统分类 [26]，说明该条件在若干多稳态秩一质量作用系统中的应用。

4.1 秩一稳态动力学系统中实现绝对浓度鲁棒性的必要条件

必要条件是以下基本观察:

定理 4.1.1。 如果 $\mathscr{N}$的秩为一，并且$(\mathscr{N}、\ K)$ 是多稳态的，那么（该直线） S 位于每个绝对浓度鲁棒物种 X的物种超平面内。换句话说，对于 S的任意基向量 v ，其 X坐标为0。

证明。 由于 $(\mathscr{N}, K)$ 是多稳态的，因此存在一个化学计量类，其中包含两个不同的正平衡态 x_1和 x_2。换言之， $x_1 - x_2 \in S$和 $x_1 - x_2 \neq 0$。对于$(\mathscr{N}, K)$的任意绝对浓度鲁棒物种 X ，可知 $x_1 - x_2$ 的第 X 个坐标为 0。由于 $x_1 - x_2 \neq 0$，它是秩一系统的一维子空间 S 的一个基向量，从而得证。

□

该必要条件立即导出了多稳态秩一系统中绝对浓度鲁棒物种数量的上界:

推论4.1.1。 令 m_{ACR} 为秩一多稳态系统 $(\mathscr{N}, K)$的$m_{\text{ACR}} \leq m - |$绝对浓度鲁棒性 物种数。则$m_{\text{ACR}} \leq m - |$支撑 $v|$，其中支撑 v 是 S的任一基向量的支撑。

注意，推论4.1.1中不等式右端仅仅是 v中的零的个数。现在，回顾一下，如果 S 的正交补包含一个正向量，则称网络是保守的。因此，我们定义以下术语。

定义4.1.1. 如果 S 包含一个正向量，则称该网络为**共保守**。

一般而言， S 中的一个正向量可以是反应向量的线性组合，其中坐标为 0或负数。例如，对于 $m = 3$，反应 $X_1 \to X_1 + X_2$ 和 $2X_1 \to 3X_1 + 2X_3$ 的反应向量为 $(0, 1, -1)$ 和

(1, 0, 2) 其和为 (1,1,1)。然而，在秩一网络中，正向量要求存在一个正反应向量 $y' - y$。这又意味着存在一个具有以下特征的反应 $y \to y'$：

- 所有物种都出现在产物络合物中；
- 每种物种在产物络合物中的化学计量系数都高于其在相应反应物复合物中的化学计量系数；并且
- 反应不受酶调控。

推论 4.1.2. 如果一个秩为一且共保守的网络是多稳态的，那么它不含有绝对浓度鲁棒性 物种。

证明。 任意非零向量 v in S 的坐标都只有正值或负值，即 $|\text{supp } v| = m$。因此， $m_{\text{ACR}} = 0$。 □

4.2 多稳态秩一质量作用系统的示例

Pantea 和 Voitiuk 在 [26] 中提出了对多稳态秩一质量作用系统的完整分类。下表概述了他们识别出的八个类别。

网络	定义
类别 1-alt^c：1-alt 完备网络	具有包含 (←，→)和 (→，←) 的一维投影模式
2-alt类：2-交替	具有包含 (←，→，←) 和 (→，←，→) 模式
Class Z：之字形网络	具有包含之字形的二维投影
类别 S_1：单源网络	恰好包含一个源络合物和两个反应方向相反的
类别S_2^z：双源之字形网络	包含两种物种，且恰好有两个源复合物并且有一条斜率为 -1 的锯齿线
类别 L：线网络	具有两个物种和至少三个源复合物，满足-满足某些性质*
类别 S_2^{nz}：双源非之字形网络	一个恰好包含两个源的本质网络复合物和 $N \in$ 1-alt$^c - Z$。
Class C: 角网络	一个本质的 1-alt 完备网络，且至少包含满足某些性质的三个源复合物*

表 4.2.1：秩一网络的类别（有关此处所用概念和符号的详细信息，请参阅 [26]）。

在质量作用下，我们的贯穿示例是一个秩一之字形网络，但并非直线网络、拐角网络或双源之字形网络。我们用两个来自 [26] 中所识别的不同类别的多稳态秩一系统的示例来说明定理 4.1.1。

例 4.2.1 （类 1-alt^c）。 下面的秩一网络是 [26]中例 4.2 的重点。该论文表明，它具有多个正平衡点和非退化平衡点的容量。此外，该网络具有

仅由向量 $v = (1,1,1,0,-1,-1)$ 生成的化学计量子空间。

$$\begin{aligned} R_1: &\quad B + 2C + 2E \to A + 2B + 3C + E \\ R_2: &\quad 2A + 2B + C + 2D + E \to A + B + 2D + 2E \\ R_3: &\quad A + 3C + D + 2E \to 2A + B + 4C + D + E \\ R_4: &\quad 3A + 3B + C + E \to 2A + 2B + 2E \end{aligned}$$

例 4.2.2(2-alt类)。 下面的秩一网络是一个 2-交替网络，其化学计量子空间由向量 $v = (2,\ 1,\ 0)$ 生成。根据 [26]，中的推论 4.3，我们得出结论：该网络能够存在多个正平衡点和非退化平衡点。

$$\begin{aligned} R_1: &\quad 2X + 2Y \to Y \\ R_2: &\quad 3X + Y \to 5X + 2Y \\ R_3: &\quad 4X + 2Y + Z \to Z \\ R_4: &\quad 4X + 2Y + 2Z \to 2X + Y + 2Z \end{aligned}$$

直接计算表明，前述两个系统分别在物种 D 和 Z 中具有绝对浓度鲁棒性。也就是说，它们的 S 基向量在物种 D 和 Z 上的坐标分别为 0。这说明了定理 4.1.1。

5 动力学系统中的绝对浓度鲁棒性和平衡态变化

本节通过引入（正）平衡态变化的概念，简要讨论一般情况下浓度鲁棒性与平衡态变化之间的关系。我们将考察几个例子来说明该概念的用途。本节中我们始终假设动力学系统 $(\mathscr{N},\ K)$ 是正平衡的，即 $E_+(\mathscr{N},\ K) \neq \varnothing$。

5.1 动力学系统的平衡变化

以下定义的动机源于这样一个观察：当且仅当一个动力学系统在其每个物种中都具有绝对浓度鲁棒性时，它在物种空间中才具有唯一的（正）平衡点。

定义 5.1.1. 动力学系统 $(\mathscr{N}, K)$ 的**（正）平衡态变化**等于非绝对浓度鲁棒物种的数量除以物种的数量，即，

$$v_+(\mathscr{N}, K) = \frac{m - m_{ACR}}{m}.$$

显然，变异值介于 0 和 1 之间，下面的命题刻画了极值的取得：

命题 5.1.1。 令 $E_+(\mathscr{N}, K)$ 为一个动力学系统。于是，

i. $v_+(\mathscr{N}, K) = 0 \Leftrightarrow |E_+(\mathscr{N}, K)| = 1$ *and*

ii. $v_+(\mathscr{N}, K) = 1 \Leftrightarrow (\mathscr{N}, K)$ 没有绝对浓度鲁棒物种

证明直接由定义得出。对于任意多稳态系统，我们有以下推论 :

推论 5.1.1。 设（$\mathscr{N}$、 K）为一个动力学系统。

Network number	Value
Number of species	6
Number of complexes	6
Number of reactions	13
Number of reactants	6
Number of linkage classes	1
Number of terminal strong linkage classes	1
Rank	5
Deficiency	0

(a)

$$F = \begin{array}{c} \begin{matrix} M_1 & M_2 & M_3 & M_4 & M_5 & M_6 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0.36 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 9.4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10.2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \\ R_6 \\ R_7 \\ R_8 \\ R_9 \\ R_{10} \\ R_{11} \\ R_{12} \\ R_{13} \end{matrix}$$

(b)

图1：（a）与Schmitz 的地球工业化前碳循环系统反应网络相关的一些数字；（b）该网络的动力学级数矩阵。

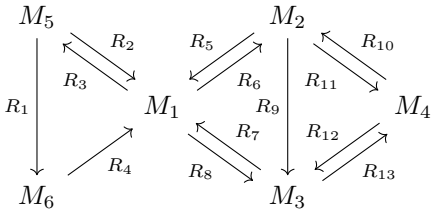
a. 若$(\mathscr{N}, K)$ 是多稳态的，则 $v_+(\mathscr{N}, K) \geq \dfrac{1}{m}$。特别地，若 $v_+(\mathscr{N}, K) = 0$，则$(\mathscr{N}, K)$ 是单稳态的。

b. 若 $\mathscr{N}$是开放的，且 $v_+(\mathscr{N}, K) > 0$，则$(\mathscr{N}, K)$ 是多稳态的。

证明。 对于（a）：多稳态意味着至少存在两个不同的正平衡态，因此 $m_{ACR} \leq m-1$，结论随即成立。对于（b）：若网络是开放的，则只有一个化学计量类。因此，多稳态等价于物种空间中至少出现两个不同的平衡态。

□

例5.1.1。 Fortun 等人在 [12] 中分析了 Schmitz 提出的地球工业化前碳循环系统模型。下面给出其对应的反应网络。



(5.1.1)

在该网络中，M_1、M_2、M_3、M_4、M_5，以及 M_6 分别表示大气、温暖的海洋表层水、凉爽的海洋表层水、深海水、陆地生物群以及土壤和碎屑。该网络的重要数值及其动力学级数矩阵如下所示。

Fortun和Mendoza [12] 证明该系统没有绝对浓度鲁棒物种，即 $v_+(\mathscr{N}、 K) = 1 > \frac{1}{6-}$。由于该系统具有保守、相容且弱可逆的网络，并且动力学弱单调，根据 [23], 的定理 6.6，该系统在每个化学计量类中都有唯一的正平衡，因此是单稳态。另请注意，该网络的秩为 $5 < 6$，因此它是一个封闭网络。

若多稳态动力学系统的秩为一，定理 4.1.1 为平衡态变化提供了更好的下界。

命题 5.1.2。 设$(\mathscr{N}, K)$ 是一个多稳态秩一动力学系统，且 v 是 S 的一个基向量。那么，$v_+(\mathscr{N}, K) \geq \frac{|supp(v)|}{m}$。

证明。根据定理4.1.1， $m_{ACR} \leq m - |supp(v)| \Leftrightarrow |supp(v)| \leq m - m_{ACR}$，从而得到新的下界。注意，由于 v 是一个基向量， $|supp(v)| \geq 1$，这证实了改进。 □

利用 Hernandez 和 Mendoza 在 [14] 中提出的一般物种超平面判据，可以推导出任意动力学系统的平衡态变化下界。该判据基于以下考虑：

定义 5.1.2。 对于任意物种 X，$(m-1)$ 维子空间

$$H_X := \{x \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}} | x_X = 0\}$$

称为 X的**物种超平面**。

对于包含 $\mathbb{R}_{>0}$ 的 U，设 $\phi : U \to \mathbb{R}$ 为单射，即 $\phi : U \to \text{Im } \phi$ 为双射。逐分量应用（m 次）后，我们得到一个双射 $U^{\mathscr{S}} \to \mathbb{R}^{\mathscr{S}}$，也记作 ϕ。我们对 E_+ 的任意子集 Y（$\mathscr{N}, K$）阐述这些概念，尽管我们主要关注 $Y = E_+$（$\mathscr{N}, K$）。

定义 5.1.3。对于 E_+（$\mathscr{N}, K$）的子集 Y，集合

$$\Delta_\phi Y := \{\phi(x) - \phi(x') | x, x' \in Y\}$$

称为 Y 中 ϕ-**变换平衡态的**差集，其张成空间 $\langle \Delta_\phi Y \rangle$ 称为 Y 中 ϕ-变换平衡态的差空间。

在 [14], 的命题 6 中，证明了

$$m_{ACR} \leq m - \dim\langle \Delta_\phi E_+ \rangle.$$

由此可立即得到平衡态变化的以下下界。

命题 5.1.3。 设$(\mathscr{N}, K)$是一个动力学系统。那么，维数$\frac{\langle \Delta_\phi E_+ \rangle}{m} \leq v_+(\mathscr{N}, K)$。

一般而言，计算 dim$\langle \Delta_\phi E_+ \rangle$颇具挑战。不过，对于 PLP 系统，这可以做到；在下一节中，我们将运用这一方法计算弱可逆、零缺陷 PL-RDK 系统的平衡态变化。

5.2 零缺陷 PL-RDK 系统的平衡态变化

动力学系统（$\mathscr{N}$， K）是一个 PLP（**正平衡对数参数化**）系统，如果存在一个参考平衡态 x^* 和通量子空间 P_E，该子空间属于 $\mathbb{R}^{\mathscr{S}}$，且满足 $E_+(\mathscr{N}, K) = \{x \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>} | \log x - \log x^* \in P_E^{\perp}\}$。对于任意 PLP 系统，Lao 等人 [18] 证明，PLP 系统的绝对浓度鲁棒性可由物种超平面判据刻画： X 是绝对浓度鲁棒物种，当且仅当它包含于 $H_X := \{x \in \mathbb{R}_{\mathscr{S}} | x_X = 0\}$。这意味着 $m - \dim P_E \leq m - m_{ACR}$，因此 $1 - \frac{\dim P_E}{m} \leq v_+(\mathscr{N}, K)$。

———

Jose 等人 [16] 证明，CLP（**复合平衡对数参数化**）系统，即 $Z_+(\mathscr{N}, K) = \{x \in \mathbb{R}^{\mathscr{S}}_{>} | \log x - \log x^* \in P_Z^{\perp}\}$ 是绝对复合平衡的，当且仅当它同时是 CLP 和 PLP 系统，并且 $P_E = P_Z$。文献 [21] 证明，任何复合平衡 PL-RDK 系统都是 CLP 系统~，且 $P_Z = S$。由于根据 Feinberg 的结论，任何弱可逆的零缺陷动力学系统都是绝对复合~平衡的，因此弱可逆的零缺陷 PL-RDK 系统是 PLP 系统，且 $P_E = S$。因此，对任何此类~系统， $1 - \frac{s}{m} \leq v_+(\mathscr{N}, K)$，其中 $\tilde{s}$ 是该系统的动力学秩。

—

例 5.2.1。Fortun 及其合作者在 [9] 和 [12] 中研究了 Anderies 等人提出的地球工业化前碳循环模型的变体（见下方反应网络）。

$$
\begin{aligned}
A_1 + 2A_2 &\xrightarrow{R_1} 2A_1 + A_2 \\
A_1 + A_2 &\xrightarrow{R_2} 2A_2 \\
A_2 &\underset{R_4}{\overset{R_3}{\rightleftarrows}} A_3
\end{aligned}
\tag{5.2.1}
$$

请注意， A_1、 A_2和 A_3 分别代表陆地、大气和海洋。下面给出 5.2.1 中网络的一些重要数值及其动力学级数矩阵。

Network number	Value
Number of species	3
Number of complexes	6
Number of reactions	4
Number of reactants	4
Number of linkage classes	3
Number of terminal strong linkage classes	3
Rank	2
Deficiency	1

(a)

$$F = \begin{array}{c} \begin{matrix} A_1 & A_2 & A_3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} p_1 & q_1 & 0 \\ p_2 & q_2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \end{matrix}$$

(b)

图2：（a）Anderies 等人在 [1]中给出的地球工业化前碳循环系统模型的反应网络相关的一些数值；（b）该网络的动力学阶数矩阵。

在 [12], 中，Fortun和Mendoza证明，该系统在动力学上等价于一个具有 $\tilde{S}^{\perp} = \left\langle \begin{pmatrix} -1 & p_2 - p_1 & p_2 - p_1 \\ & q_2 - q_1 & q_2 - q_1 \end{pmatrix} \right\rangle$ 的弱可逆零缺陷系统。令 R 表示比值 $\frac{p_2 - p_1}{q_2 - q_1}$。根据 R的取值，可将 Anderies 系统分为三类： $AND_{>}$（$R > 0$）由没有绝对浓度鲁棒物种的多稳态系统组成；AND_0（$R = 0$）仅包含具有两个绝对浓度鲁棒物种的单稳态系统； $AND_{<}$则既包含单射系统，也包含非单射系统，但同样没有绝对浓度鲁棒物种。 [10]和 [14]中研究的变体分别属于 $AND_{>}$和 AND_0。

根据前面的结果，如果 $(\mathscr{N}, K)$ 包含于 $AND_{>}$ 或 $AND_{<}$，则 $v_{+}(\mathscr{N}, K) = 1$；如果 $(\mathscr{N}, K)$ 位于 AND_0 中，则 $v_{+}(\mathscr{N}, K) = \frac{1}{3}$。

5.3 平衡态变化独立子网络

本节讨论独立子网络的平衡态变化。在这方面，区分我们在先前工作中引入的两种子网络概念至关重要：嵌入式子网络和非嵌入式子网络。因此，我们先回顾这些概念及其与绝对浓度鲁棒性（ACR）相关的性质；绝对浓度鲁棒性是我们平衡态变化概念的基础。接着，我们汇总先前文献中的一些相关结果，并补充一些新细节。最后，我们运用 Lubenia 等人对代谢性胰岛素信号传导的反应网络分析结果 [19] 来阐明这些不同的概念及其关系。事实上，我们证明了不同平衡态变化数值之间的各种不等式都是紧的，即在胰岛素系统的若干子网络中可以达到等号。

5.3.1 子网络性质综述

在分解 $\mathscr{N} = \mathscr{N}_1 \cup \mathscr{N}_2 \cup \cdots \cup \mathscr{N}_k$ 中，子网络中的物种数量通常少于整个网络中的物种数量。若 $\mathscr{N} = (\mathscr{S}, \mathscr{C}, \mathscr{R})$，我们称子网络 $(\mathscr{C}', \mathscr{R}')$（其中 $\mathscr{R}' \subseteq \mathscr{R}$ and $\mathscr{C}' = \mathscr{C}|_{\mathscr{R}'}$）为**嵌入式**，如果其物种空间为 $\mathscr{S}$；若其物种空间为 $\mathscr{S}|_{\mathscr{C}'}$，则称为**非嵌入式**，记作 $\mathscr{S}'$。

我们在分解中使用嵌入表示，因为它可以方便地对平衡集合进行集合运算。以下是一个基本事实：

命题 5.3.1。 如果 X 是子网络中的绝对浓度鲁棒物种，那么 X 是 $\mathscr{S}'$的一个元素。

这意味着我们只需对一个子网络中的绝对浓度鲁棒物种 m'_{ACR}进行一次计数。对于非绝对浓度鲁棒物种和平衡态变化，我们有以下关系：

命题 5.3.2。 设 $m' = |\mathscr{S}'|$ 和 $v_+(\mathscr{N}', K')$， $\tilde{v}_+(\mathscr{N}', K')$ 分别为非嵌入子网络和嵌入子网络的平衡态变化。那么，

i. $m - m'_{ACR} = (m' - m'_{ACR}) + (m - m')$ *and*

ii. $0 \leq \tilde{v}_+(\mathscr{N}', K') - v_+(\mathscr{N}', K') \leq \dfrac{m - m'}{m}$

证明。 $(i.)$应理解为：嵌入网络中的非绝对浓度鲁棒物种数等于非嵌入网络中的非绝对浓度鲁棒物种数加上未出现物种数，并且$(ii.)$：将$(i.)$中的方程除以 m 并使用不等式 $\dfrac{m' - m'_{ACR}}{m} \leq \dfrac{m' - m'_{ACR}}{m'}$，可得 $\tilde{v}_+(\mathscr{N}', K') - v_+(\mathscr{N}', K') \leq \dfrac{m - m'}{m}$。另一方面，左侧通分后现在等于$m'_{ACR}(m - m')$ ≥ 0，因为所有因子均为非负数。 $\dfrac{}{mm'}$

□

5.3.2 独立子网络的平衡态变化

在 [18], 命题4.4中指出，如果物种 X 在 $\mathscr{N}_i$ 中具有绝对浓度鲁棒性且分解是独立的，那么 X 在 $\mathscr{N}$中具有绝对浓度鲁棒性，即$|\mathscr{S}_{ACR,i}| \leq \left|\bigcup_{i=1}^{k} \mathscr{S}_{ACR,i}\right| \leq |\mathscr{S}_{ACR}|$。因此我们有以下推论：**命题5.3.3**。 $v_+(\mathscr{N}, K) \leq \tilde{v}_+(\mathscr{N}', K')$ 对于任意独立的子网络 $\mathscr{N}'$。

证明。由此可得 $m - m_{ACR} \leq m - m'_{ACR}$ 并将两边同除以 m 即可得到该结论。 □

5.3.3 健康细胞中代谢性胰岛素信号传导的例子

Lubenia 等人 [19] 构建了 Sedaghat 等人 [22]提出的广泛使用的代谢胰岛素信号传导模型（在健康细胞中）的质量作用动力学实现。他们利用该动力学系统最精细的独立分解（FID）进行了绝对浓度鲁棒性分析，并证明 $m_{ACR} \geq 8$ 对所有速率常数（只要该系统具有正平衡态）

以及 $m_{ACR} = 8$ 对于某些速率常数。Hernandez 等人 [3] 证实，对于具有正平衡系统的所有速率常数，$m_{ACR} = 8$。因此，$v_+(\mathscr{N},\ K) = \dfrac{20-8}{20} = \dfrac{12}{20} = \dfrac{3}{5} = 0.60$。

下表（见表5.3.1）摘自 [19], , 概述了FID子网络的特征。请注意，除 $\mathscr{N}_1$外，所有子网络都是秩一系统。将Meshkat等人的判据应用于这9个子网络后发现，只有单物种系统 $\mathscr{N}_2$ 和 $\mathscr{N}_{10}$ 分别对物种 X_6和 X_{20}具有绝对浓度鲁棒性。所有其他子网络均不具有绝对浓度鲁棒物种。因此，我们有：

- For $i = 3, \ldots, 9, v_+(\mathscr{N}, K) = 0.60 < 1 = v_+(\mathscr{N}_i, K_i) = \tilde{v}_+(\mathscr{N}_i, K_i)$
- For $i = 2, \ldots, 10, v_+(\mathscr{N}_i, K_i) = 0 < 0.60 = v_+(\mathscr{N}, K) = \tilde{v}_+(\mathscr{N}_i, K_i) = \dfrac{19}{20} = 0.95$

网络编号	$\mathscr{N}_1$	$\mathscr{N}_2$	$\mathscr{N}_3$	$\mathscr{N}_4$	$\mathscr{N}_5$	$\mathscr{N}_6$	$\mathscr{N}_7$	$\mathscr{N}_8$	$\mathscr{N}_9$	$\mathscr{N}_{10}$
物种	7	1	4	3	3	2	3	3	4	1
复合物	7	2	6	2	4	2	4	4	6	2
反应物复合物	7	2	3	2	2	2	2	2	4	2
可逆反应	5	1	0	1	0	1	0	0	1	1
不可逆反应	4	0	3	0	2	0	2	2	2	0
反应	14	2	3	2	2	2	2	2	4	2
连接类	1	1	3	1	2	1	2	2	3	1
强连接类	1	1	6	1	4	1	4	4	5	1
终端强连接类	1	1	3	1	2	1	2	2	3	1
Rank	6	1	1	1	1	1	1	1	1	1
反应物秩	7	1	3	2	2	2	2	2	4	1
亏格	0	0	2	0	1	0	1	1	2	0
反应物亏格	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1

表 5.3.1：FID 子网络的一些数量。

作者还考虑了粗化 $\mathscr{N}_A \cup \mathscr{N}_B$，其中 $\mathscr{N}_A$ 是所有零缺陷子网络的并集，而 $\mathscr{N}_B$ 是所有正亏格子网络的并集。他们还证明，所有绝对浓度鲁棒物种都仅包含在 $\mathscr{N}_A$ 中。因此，在这种情况下，我们有：

- $v_+(\mathscr{N}_A, K_A) = \dfrac{13-8}{13} = 0.38 < 0.6 = v_+(\mathscr{N}, K) = \tilde{v}_+(\mathscr{N}_A, K_A)$
- $v_+(\mathscr{N}, K) = 0.6 < 1 = v_+(\mathscr{N}_B, K_B) = \tilde{v}_+(\mathscr{N}_B, K_B)$

这些例子表明，上述命题中的所有不等式都是紧的。

6 总结与展望

本研究受到 Meshkat等人一项结果的启发，该结果能够分析秩一质量作用动力学系统是否具有稳定绝对浓度鲁棒性。该结果保证，只要满足所识别出的两个结构条件，质量作用系统就具有这种鲁棒性。这些条件要求系统具有符合特定结构的嵌入网络，并且反应物复合物之间仅相差一个物种。我们尝试将这一结果推广到更一般的幂律动力学系统，但未能成功。

我们找到了一个示例，说明这些条件在一般情形下并不总是成立。这意味着，与此前关于绝对浓度鲁棒性的其他结果不同，该结果中的条件并不总能保证幂律动力学系统中绝对浓度鲁棒性的存在。另一方面，我们发现了一类满足 Meshkat等人的稳定绝对浓度鲁棒性判据的幂律动力学系统。我们将这类系统称为质量作用系统的齐次单项式商，简称 PL-MMK。这一子类是通过利用给定质量作用动力学系统的速率常数集合及其修正后的动力学级数矩阵得到的。

我们还发现，具有绝对浓度鲁棒性的多稳态秩一系统必然具备一项性质。具体而言，相应的结果表明，此类具有绝对浓度鲁棒性的系统，其化学计量子空间必定存在一个基向量生成元，该向量在绝对浓度鲁棒物种对应的坐标上取值为 0。我们通过 Pantea 和 Voitiuk 论文中给出的一个多稳态系统阐释了这一结果。

最后，我们在本文中考察了独立子网络的平衡态变化这一概念，并讨论了嵌入子网络与非嵌入子网络的平衡态变化之间的一些数学关系。这些关系通过 [19] 中展示的数据加以说明；Lubenia 等人曾利用这些数据分析健康细胞的代谢胰岛素信号传导。值得注意的是，子网络中的绝对浓度鲁棒物种始终包含于相应的非嵌入子网络中。

未来的研究可以探讨秩一绝对浓度鲁棒性判据的推广问题，即识别出更多适用该判据的动力学系统（不仅限于质量作用系统）。还可以研究多稳态类别与秩一质量作用系统必要条件之间的关系，并将 Pantea-Voitiuk 分类推广到质量作用系统之外。此外，进一步识别能够导出一般下界的动力学集合也很有意义，或者像秩一多稳态系统那样，推导出一个精度更高的替代界。

致谢

D. Talabis、E. Jose 和 L. Fontanil 感谢菲律宾大学洛斯巴尼奥斯分校通过基础研究计划提供的支撑。

参考文献

[1] J. Anderies、S. Carpenter、W. Steffen 和 J. Rockström。《非线性全球碳动态的拓扑：从临界点到行星边界》，环境研究快报**8** （2013）44–48。

[2] C. Arceo, E. Jose, A.Marín-Sanguino, E. Mendoza, 化学反应网络在生化系统理论中的方法，数学生物科学。 **269**(2015) 135–152。

[3] B. Boros, 《关于弱可逆零缺陷质量作用系统正稳态的存在性》, 《数学生物科学》245（2013）157–170。[4] H. Farinas，E. Mendoza，A. Lao, 《化学反应网络分解与S系统的实现》, 已投稿。[5] M. Feinberg, 《化学反应网络结构与复杂等温反应器的稳定性 I：零缺陷定理与一缺陷定理》, 《化学工程科学》42（1987）2229–2268。[6] M. Feinberg, 《化学反应网络理论基础》, 施普林格，2019。[7] M. Feinberg, 《化学反应网络讲义》, 威斯康星大学数学研究中心讲座笔记，1979年。[8] N. Fortun, A. Lao，L. Razon，E. Mendoza, 《具有反应物决定相互作用的幂律动力学的一缺陷算法》, 《数学化学杂志》56（2018）2929–2962。[9] N. Fortun，A. Lao，L. Razon和E. Mendoza, 《地球前工业时代碳循环模型中的多稳态》, 《马尼拉科学杂志》11（2018）81–96。[10] N. Fortun，E. Mendoza，L. Razon, A. Lao, 《具有非反应物决定相互作用的一类幂律动力学系统的零缺陷定理》, 《MATCH数学与计算化学通讯》81（2019）621–638。[11] N. Fortun，E. Mendoza, 《幂律动力学系统中的绝对浓度鲁棒性》, 《MATCH数学与计算化学通讯》85（2021）669–691。[12] N. Fortun，E. Mendoza。《通过动力学表示对碳循环模型进行比较分析》, 《数学化学杂志》（2023年，出版中）。[13] N. Fortun，A. Lao，L. Razon，E. Mendoza, 《具有反应物决定相互作用的幂律动力学系统中的鲁棒性》, 载于：Akiyama，J., Marcelo，R.M.，Ruiz，MJ.P.，Uno，Y.（编）, 《离散与计算几何、图与博弈》, JCDCGGG 2018, 《计算机科学讲义》13034，施普林格，Cham。[14] B. Hernandez和E. Mendoza, 《具有独立连接类的网络上幂律动力学的正平衡态》, 《数学化学杂志》（2023）, 2022年11月25日录用，在线: https://doi.org/10.1007/s10910- 022-01432-w。[15] F. Horn，R. Jackson, 《广义质量作用动力学》, 《有理力学与分析档案》47（1972）187-194。[16] E. Jose，D. Talabis，E. Mendoza, 《绝对复合平衡动力学系统》, 《MATCH数学与计算化学通讯》88（2022）397–436。[17] H. Kitano, 《生物鲁棒性》, 《自然遗传学评论》5（2004）826–837。[18] A. Lao，P. Lubenia，D. Magpantay，E. Mendoza, 《LP动力学系统中的浓度鲁棒性》, 《MATCH数学与计算化学通讯》88（2022）29–66。

[19] P.V.Lubenia,E. Mendoza, A. Lao.代谢胰岛素信号传导的反应网络分析，《数学生物学公报》**84**（2022）129–151。[20] N.Meshkat, A.Shiu,A. Torres. 低维化学计量子空间网络中的绝对浓度鲁棒性，《越南数学杂志》**50**（2022）623–651。[21] S. Müller,G. Regensburger. 广义质量作用系统以及具有实数和符号指数的多项式方程的正解，《*CASC 2014*会议论文集》（编者：*V.P. Gerdt*、*W. Koepf*、*W.M.Seiler*、*E.H. Vorozhtsov*），《计算机科学讲义》**8660**（2014）302–323。[22] A.Sedaghat,A. Sherman, M. Quon. 代谢胰岛素信号传导通路的数学模型，《美国生理学杂志：内分泌与代谢》，**283**（2002）1084–1101。[23] G. Shinar, M. Feinberg.协调化学反应网络，《数学生物科学》**240**（2012）92–113。[24] G.Shinar and M. Feinberg.生化反应网络中鲁棒性的结构来源，《科学》，**327**（2010）1389–1391。[25] G. Shinar,M. Feinberg.鲁棒生化反应网络的设计原则：哪些可行、哪些不可行，以及哪些或许几乎可行，《数学生物科学》**231**（2011）39–48。[26] C.Pantea,G.Voitiuk. 具有一维化学计量子空间的反应网络的多稳态分类（预印本）。