

KfK 262.1  
März 1978

# **Mathematical Treatment of First Order Kinetics Systems with Respect to the Carbon Dioxide Cycle of the Earth**

S. Fenyi, H. Frick  
Institut für Datenverarbeitung in der Technik

**Kernforschungszentrum Karlsruhe**

---

Als Manuskript vervielfältigt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE GMBH

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Datenverarbeitung in der Technik

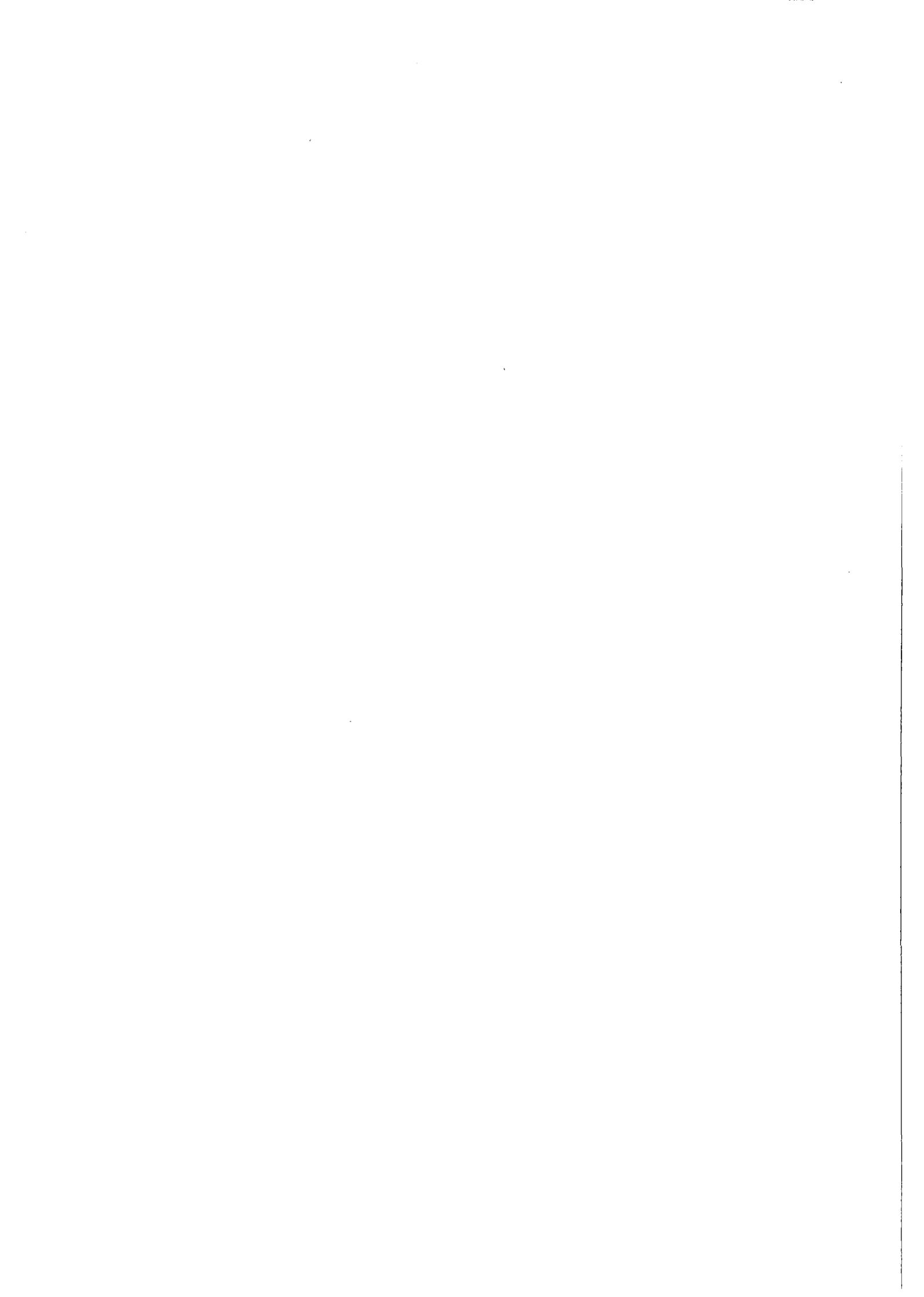
KfK 2621

MATHEMATICAL TREATMENT OF FIRST ORDER KINETICS SYSTEMS  
WITH RESPECT TO THE CARBON DIOXIDE CYCLE OF THE EARTH

S. Fenyi

H. Frick

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe



This KfK-report contains the contributions of the authors to the topic 'CO<sub>2</sub>-cycle of the earth' in that form in which they were presented at the 'IIASA workshop on carbon dioxide, climate and society'. The first part is independent of the second part; responsible is the respective author.

## Abstract

The CO<sub>2</sub>-cycle of the earth is conceived as a 'first order kinetics' system. This leads to a system of coupled first order differential equations. Differential equations systems of general 'first order kinetics' systems are analyzed with respect to equilibrium states and asymptotic behaviour of the solutions. The second part of the report treats the thermodynamic aspect of the first order kinetics systems. According to the idea of J. Meixner the problem was transformed in an analogous problem of electrical networks. Methods for the numerical treatment are presented.

## Zusammenfassung

MATHEMATISCHE BEHANDLUNG VON KINETISCHEN SYSTEMEN ERSTER ORDNUNG MIT ANWENDUNG AUF DEN KOHLENDIOXYDKREISLAUF DER ERDE

Der CO<sub>2</sub>-Kreislauf der Erde wird aufgefaßt als ein kinetisches System erster Ordnung. Dies führt auf ein System gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung. Differentialgleichungssysteme von allgemeinen kinetischen Systemen erster Ordnung wurden analysiert hinsichtlich der Gleichgewichtszustände und des asymptotischen Verhaltens der Lösungen. Im zweiten Teil des Berichts wurde die thermodynamische Seite der kinetischen Systeme erster Ordnung behandelt. Nach dem Verfahren von J. Meixner wurde das Problem auf ein analoges Problem bei elektrischen Netzwerken überführt. Für die numerische Behandlung wurden Verfahren angegeben.

P a r t I

H. Frick

## C o n t e n t s

1. Introduction
2. The four-box model
3. The general n-box model
4. Final and equilibrium states
5. Unique final states
6. Conditions for the uniqueness of the final states and for the non-oscillating asymptotic behaviour of the cycle
7. Computation of the final state

## 1. Introduction

In the last years several authors (e.g. [1], [2], [3]) have developed simple box models for the  $\text{CO}_2$ -cycle of the earth. The boxes represent atmosphere, biosphere and ocean or, by finer subdivisions, parts of these regions, e.g. upper mixed layer of the sea and deep sea. The  $\text{CO}_2$ -mass flow per time between these boxes is described by a system of first order linear differential equations with constant coefficients, which means that the  $\text{CO}_2$ -cycle is conceived as a first order kinetics system. Of interest are the equilibrium states of the cycle and its asymptotic behaviour. Since these problems are relevant not only for  $\text{CO}_2$ -cycles we investigate them for general first order kinetics systems.

## 2. The four-box model

The four-box model for the carbon dioxide cycle of the earth may be described as follows: Given are the four boxes atmosphere (a), biosphere (b), upper mixed layer of the sea (m) and deep sea (d). At time  $t$  these boxes contain the  $\text{CO}_2$  inventories  $I^a(t)$ ,  $I^b(t)$ ,  $I^m(t)$ ,  $I^d(t)$ , measured in mol. In the time interval  $(t, t+dt)$  parts of the inventories are exchanged; the transition from box  $x$  to box  $y$  is determined by the exchange coefficient  $k^{xy}$  (measured in reciprocal years). No  $\text{CO}_2$  leaves the system and none enters it <sup>\*</sup>). Therefore by the figure on page 2-2 we have the following relations for the  $\text{CO}_2$  inventories in the different boxes at time  $t$  :

$$\frac{dI^a(t)}{dt} = -k^{ab} \cdot I^a(t) - k^{am} \cdot I^a(t) + k^{ba} \cdot I^b(t) + k^{ma} \cdot I^m(t)$$

$$\frac{dI^b(t)}{dt} = k^{ab} \cdot I^a(t) - k^{ba} \cdot I^b(t)$$

$$\frac{dI^m(t)}{dt} = k^{am} \cdot I^a(t) + k^{dm} \cdot I^d(t) - k^{ma} \cdot I^m(t) - k^{md} \cdot I^m(t) \quad (+)$$

$$\frac{dI^d(t)}{dt} = k^{md} \cdot I^m(t) - k^{dm} \cdot I^d(t) .$$

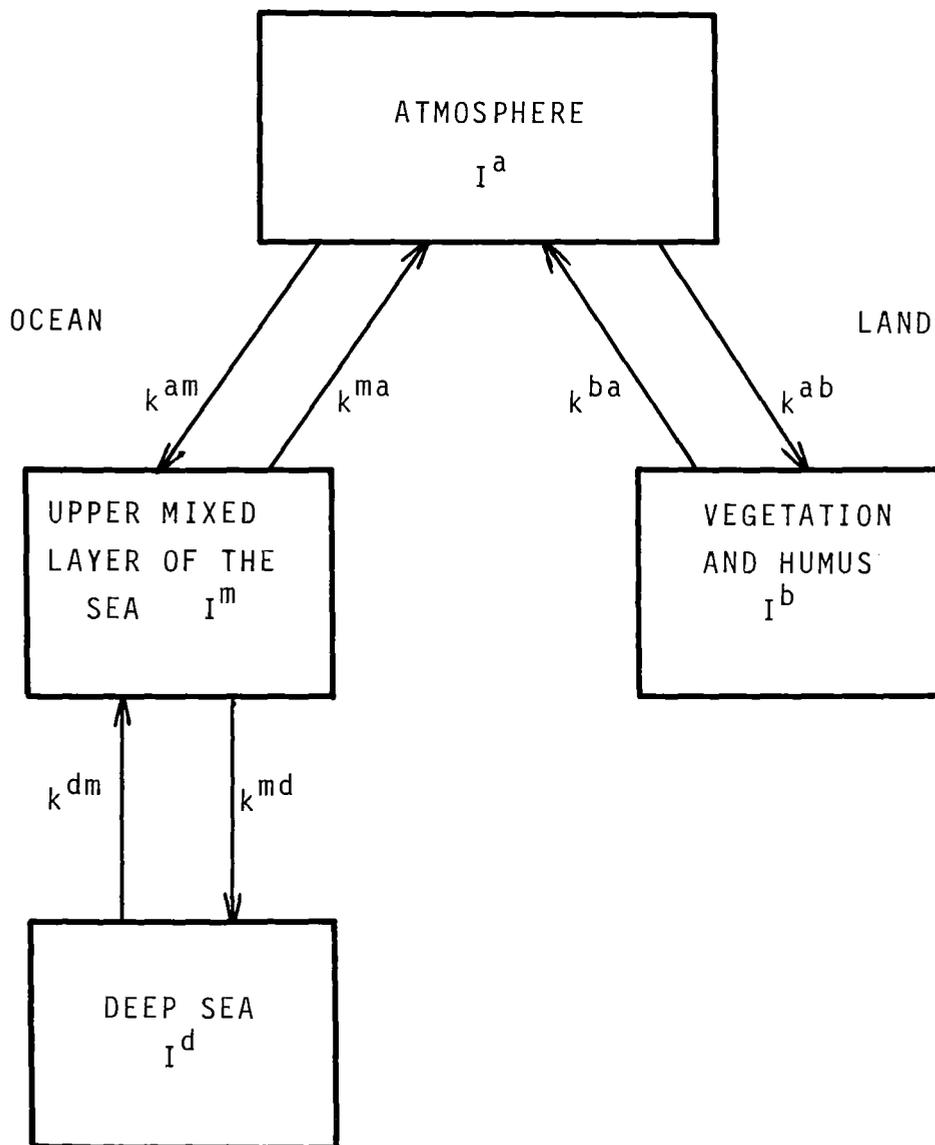
If we define the vector  $\underline{I}(t) := (I^a(t), I^b(t), I^m(t), I^d(t))^T$ , the four components of which describe the  $\text{CO}_2$  inventories of the four boxes at time  $t$  , then we can write the system (+) in matrix form

$$\frac{d\underline{I}(t)}{dt} = A \cdot \underline{I}(t) ,$$

---

<sup>\*</sup>) The last assumption means that there is no burning of fossil fuels, e.g. in case they are exhausted, which could happen before long.

A Four-Box Model



where the matrix A is given by

$$A = \begin{pmatrix} -k^{ab} - k^{am} & k^{ba} & k^{ma} & 0 \\ k^{ab} & -k^{ba} & 0 & 0 \\ k^{am} & 0 & -k^{ma} - k^{md} & k^{dm} \\ 0 & 0 & k^{md} & -k^{dm} \end{pmatrix} .$$

An equilibrium state of the cycle we call a state that, when reached once, will never change in the future, i.e.  $\underline{I}'$  is an equilibrium state when, with

$$\underline{I}(t') = \underline{I}' \quad \text{for some } t$$

we have

$$\underline{I}(t) = \underline{I}' \quad \forall t \geq t' .$$

One can show ([4]) that for the four-box model the unique equilibrium state (normalized to unit atmospheric inventory) is given by

$$\underline{I}' := (1, k^{ab}/k^{ba}, k^{am}/k^{ma}, (k^{am}/k^{ma}) \cdot (k^{md}/k^{dm}))^\tau .$$

### 3. The general n-box model

Clearly the equilibrium states are determined by the matrix  $A$  .

The matrix  $A$  is characterized by the fact that all off-diagonal elements are non-negative -this is clear since they represent the transition coefficients or rate constants- and by the fact that each main diagonal element equals the negative sum of the other column elements. The latter is a consequence of the 'material conservation' property which means that no  $\text{CO}_2$  leaves and none enters the system; we have

$$I^a(t) + I^b(t) + I^m(t) + I^d(t) \equiv \text{const}$$

by

$$\frac{d}{dt}(I^a(t) + I^b(t) + I^m(t) + I^d(t)) = 0 \quad .$$

Since every box-model with mass conservation property has - independent of the number of boxes - the above properties, we consider as a general n-box model the system of differential equations

$$\frac{d}{dt} y = A y \tag{1}$$

where

$$y := (y_1, \dots, y_n)^T, \quad n > 1$$

and where

$$A := (a_{ij}) \quad i, j = 1, \dots, n$$

is a matrix with

$$a_{ij} \in \mathbb{R} \quad \forall i, j$$

$$a_{ij} \geq 0 \quad \forall i \neq j \quad (2)$$

$$a_{ii} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ji} \quad \forall i \quad (3)$$

#### 4. Final and equilibrium states

Clearly an equilibrium state of the general n-box-model is a state  $y'$  such that, when  $y(t)$  is a solution of (1) under the initial condition

$$y(0) = y' \quad ,$$

it is

$$y(t) \equiv y' \quad \forall t \geq 0 \quad .$$

(Trivially  $y' = 0$  is excluded).

In what we are interested is

- a) what do the equilibrium states look like
- b) does any cycle tend to an equilibrium state  
and, if it is so
- c) in which way does the final state depend on the initial state at time zero.

The latter point is of importance. It may happen that the transition coefficients and the total amount of material contained in the cycle are known with some accuracy whereas the initial inventories of the boxes are roughly estimated (e.g. this is the case for the  $\text{CO}_2$  cycle). This turns out to be

no problem if the final state depends only on the total amount of material in the cycle and not on its initial distribution to the boxes.

In practise our initial states are restricted to those  $y^{(0)}$  with

$$y_i^{(0)} \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (4)$$

One can show that every solution  $y(t)$  of (1) with a non-negative initial state vector remains in the non-negative orthant.

Since for the mathematical treatment the restriction to non-negative initial states is irrelevant, in the following we admit arbitrary initial states  $y^{(0)}$ .

We first answer question b). Therefore we introduce the definition of stochastic matrices (cf. e.g. [5]).

A real matrix  $(b_{ij})_{i, j = 1, \dots, n}$  is called stochastic if

$$b_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j, \quad (5)$$

$$\sum_{j=1}^n b_{ij} = 1 \quad \forall i. \quad (6)$$

Using some well-known properties of stochastic matrices we will prove

Lemma 1. The matrix  $A$  defined by (2), (3) has an eigenvalue 0. All other eigenvalues have real parts less than 0 .

Proof. Since  $A$  has a rank less than  $n$  by (3)

0 is an eigenvalue. Let

$$\lambda = a + i b \neq 0$$

be another eigenvalue of  $A$ . There is a  $\mu > 0$  such that

$$B := (\mu A + E)^T \quad (E \text{ unit matrix})$$

is a stochastic matrix and

$$\lambda' := \mu a + 1 + i \mu b$$

is an eigenvalue of  $B$ . Since the modulus of an eigenvalue of a stochastic matrix is bounded by 1 ([5]), we have

$$a < 0 \quad .$$

□

If the eigenvalue 0 has multiplicity  $m$  then (by [5], p 74, Th. 10) there exist  $m$  linear independent eigenvectors  $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}^n$  .

Denote  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  the real eigenvalues of  $A$  different from 0 and

$$\mu_j := a_j + i b_j, \quad j = 1, \dots, l$$

the complex eigenvalues.

Then the theory of differential equations tells that the solution  $y(t)$  of (1) with an initial condition  $y(0) = y^{(0)}$  has the form

$$y(t) = \sum_{r=1}^m \alpha_r c_r + \sum_{s=1}^k P_s(t) e^{\lambda_s t} + \sum_{w=1}^l e^{a_w t} [Q_w(t) \sin(b_w t) + T_w(t) \cos(b_w t)] \quad , \quad (7)$$

where the  $P_s, Q_w, T_w$  are vectors of polynomials of degree less than the multiplicity of the corresponding eigenvalue and  $\alpha_r \in \mathbb{R}$ .

Now the question b) is easy to settle.

Theorem 2. Let  $y(t)$  be a solution of (1) with an initial condition  $y(0) = y^{(0)}$ . Then  $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$  exists and is an equilibrium state.

Proof. The solution  $y(t)$  has the form (7). Since the  $\lambda_s, a_w$  are all less than 0 by Lemma 1 we have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \sum_{r=1}^m \alpha_r c_r =: z \quad ,$$

where  $m$  is the multiplicity of the eigenvalue  $0$  and  $c_1, \dots, c_m$  are linear independent eigenvectors to  $0$ .

Another way of representing  $y(t)$  is (see e.g. [6])

$$y(t) = \left( \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^v t^v \right) y^{(0)} .$$

Hence a solution of (1) with initial condition

$$y(0) = z \quad \text{is}$$

$$y_z(t) = \left( \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^v t^v \right) z$$

whence

$$\frac{d}{dt} y_z(t) = \left( \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^{v+1} t^v \right) z .$$

Since  $z$  is a linear combination of eigenvectors of  $A$  to  $0$  we have

$$\left( \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^{v+1} t^v \right) z = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} A^{v+1} z t^v = 0 .$$

Thus

$$\frac{d}{dt} y_z(t) = 0 ,$$

therefore

$$y_z(t) = z \quad \forall t .$$

□

## 5. Unique final states

Th. 2 says that for any initial state the cycle tends to an equilibrium state as time increases. The next question is how this equilibrium state depends on the initial state. We will show that in case that 0 is a simple eigenvalue of  $A$  the equilibrium state does not depend on the special form of the initial state, that is if  $y^{0(i)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $i = 1, 2$  are initial states with

$$\sum_{j=1}^n y_j^{0(1)} = \sum_{j=1}^n y_j^{0(2)}$$

and  $y^{(i)}(t)$ ,  $i = 1, 2$  are the solutions of (1) under

$$y^{(i)}(0) = y^{0(i)}, \quad i = 1, 2,$$

we have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y^{(1)}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} y^{(2)}(t) .$$

To prove the above statement we shall use properties of the fundamental system of the system of differential equations (1) <sup>+)</sup> . To obtain an adequate representation of this fundamental system some matrix calculus is required.

---

<sup>+)</sup>  There are shorter proofs but for some reasons we take our way ;  
see the comment on p. 5-12 .

Let  $A$  be given acc. (2) and (3). Let  $\Lambda$  be the set of eigenvalues of  $A$  which are different from 0. Let  $I$  denote the real interval

$$I := [0, (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|)^{-1}] \quad . \quad (8)$$

Let for  $\mu \in R$

$$B_\mu := (\mu A + E)^T \quad . \quad (9)$$

Clearly  $B_\mu$  is a stochastic matrix according to (5), (6) if and only if  $\mu \in I$ .

Now let  $\Lambda$  be divided into subsets  $\Lambda_1, \Lambda_2$  by

$$\Lambda_1 := \{\lambda \in \Lambda, \exists 0 < \mu \in I : |\mu \lambda + 1| = 1\} \quad (10)$$

$$\Lambda_2 := \Lambda \setminus \Lambda_1 \quad . \quad (11)$$

In the following we denote the multiplicity of an eigenvalue  $\lambda$  of a matrix by  $\kappa(\lambda)$ . The  $\lambda \in \Lambda_1$  have a remarkable property:

Lemma 3. To every  $\lambda \in \Lambda_1$  there exist  $\kappa(\lambda)$  linear independent eigenvectors of  $A$ .

Proof. There exists a  $0 < \mu \in I$ , defined in (8), such that

$$\rho := \mu \lambda + 1$$

is an eigenvalue of the stochastic matrix  $B_\mu$  and

$$|\rho| = 1 .$$

By [5], p. 76, Folgerung 1, there exist  $\kappa(\rho)$  linear independent vectors  $c^{(1)}, \dots, c^{(\kappa(\rho))} \in \mathbb{R}^n$  with

$$B_\mu^\tau c^{(l)} = \rho c^{(l)} \quad , \quad l = 1, \dots, \kappa(\rho) \quad ,$$

that is

$$(\mu A + E) c^{(l)} = (\mu \lambda + 1) c^{(l)} \quad ,$$

whence

$$A c^{(l)} = \lambda c^{(l)} \quad \forall \quad l = 1, \dots, \kappa(\rho)$$

because of  $\mu > 0$  .

By regarding the determinants  $\det(\mu A + E - \psi E)$  and  $\det(A - \rho E)$  one immediately understands that  $\kappa(\rho) = \kappa(\lambda)$  , and the lemma is proved.

□

Now let  $\lambda \in \Lambda_2$ , defined in (11). Then there exist  $\kappa(\lambda)$  linear independent vectors

$$c^{(\lambda)(1)(1)}, \dots, c^{(\lambda)(1)(\alpha_{\lambda 1})}, c^{(\lambda)(2)(1)}, \dots, c^{(\lambda)(2)(\alpha_{\lambda 2})},$$

$$\dots, c^{(\lambda)(p_\lambda)(1)}, \dots, c^{(\lambda)(p_\lambda)(\alpha_{\lambda p_\lambda})},$$

(where  $p_\lambda$  and the  $\alpha_{\lambda j}$  are natural numbers with

$$\sum_{j=1}^{p_\lambda} \alpha_{\lambda j} = \kappa(\lambda) \text{ with}$$

$$(A - \lambda E)^v c^{(\lambda)(j)(v)} = 0 \tag{12-a}$$

$$(A - \lambda E)^{v-1} c^{(\lambda)(j)(v)} \neq 0 \tag{12-b}$$

for  $1 \leq v \leq \alpha_{\lambda j}$ ,  $j = 1, \dots, p_\lambda$

and

$$(A - \lambda E)^m c^{(\lambda)(j)(v)} = c^{(\lambda)(j)(v-m)} \tag{12-c}$$

for  $m < v \leq \alpha_{\lambda j}$ ,  $j = 1, \dots, p_\lambda$

(see e.g. [7] § 21.3) .

The  $c^{(\lambda)(u)(w)}$  are called main vectors or generalized eigenvectors to the eigenvalue  $\lambda$  .

Now let for  $\mu \in \mathbb{R}$

$$\rho := \mu \lambda + 1$$

$$B_{\mu}^{\tau} := \mu A + E \quad .$$

Applying equ. (12-a), (12-c) one obtains for  $1 \leq u \leq p_{\lambda}$ ,  $w \leq \alpha_{\lambda u}$  and  $\alpha_{\lambda u} \leq \delta \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} B_{\mu}^{\tau \delta} C(\lambda)(u)(w) &= [\rho E + (B_{\mu}^{\tau} - \rho E)]^{\delta} C(\lambda)(u)(w) = \\ &= [\rho E + \mu (A - \lambda E)]^{\delta} C(\lambda)(u)(w) = \\ &= \sum_{k=0}^{\delta} \binom{\delta}{k} \rho^{\delta-k} \mu^k (A - \lambda E)^k C(\lambda)(u)(w) = \\ &= \sum_{k=0}^{w-1} \binom{\delta}{k} \rho^{\delta-k} \mu^k C(\lambda)(u)(w-k) = \\ &= \rho^{\delta-w+1} \sum_{k=0}^{w-1} \binom{\delta}{k} \rho^{w-1-k} \mu^k C(\lambda)(u)(w-k) \end{aligned} \quad (13)$$

Now for every  $\lambda \in \Lambda_1$  we choose a fixed set of  $\kappa(\lambda)$  linear independent eigenvectors of  $\lambda$  according to Lemma 3 and denote it with  $C(\lambda)$ . For every  $\lambda \in \Lambda_2$  we choose a fixed set of  $\kappa(\lambda)$  linear independent main vectors accord. to equ. (12-a), (12-b), (12-c) and denote it with  $C(\lambda)$ .

The elements of  $C(\lambda)$ ,  $\lambda \neq 0$  have a remarkable property.

Theorem 4. Let  $\lambda \neq 0$  be an eigenvalue of

$A$  and  $c := (c_1, \dots, c_n)^T \in C(\lambda)$ . Then

$$\sum_{i=1}^n c_i = 0 .$$

Proof Let  $\lambda \in \Lambda_1$ . By definition of  $\Lambda_1$  there exists a  $0 < \mu \in I$  such that  $B_\mu$  is a stochastic matrix (def. of  $I$  and  $B_\mu$  see (8), (9)) and  $|\mu \lambda + 1| = 1$ .

Because of

$$\lambda \neq 0$$

we have

$$\rho := \mu \lambda + 1 \neq 1 .$$

Since  $B_\mu := (b_{ij}^{(\mu)})_{i, j = 1, \dots, n}$  is stochastic, it is for every  $x \in \mathbb{R}^n$

$$\sum_{i=1}^n (B_\mu^T x)_i = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n b_{ji}^{(\mu)} x_j \right) = \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n b_{ji}^{(\mu)} x_j \right) = \sum_{j=1}^n x_j . \quad (*)$$

Hence

$$\sum_{i=1}^n c_i = \sum_{i=1}^n (B_\mu^T c)_i ,$$

but

$$\sum_{i=1}^n (B_{\mu}^{\tau} c)_i = \rho \sum_{i=1}^n c_i ,$$

whence

$$\sum_{i=1}^n c_i = \rho \sum_{i=1}^n c_i ,$$

which, since  $\rho \neq 1$ , can only hold for

$$\sum_{i=1}^n c_i = 0 .$$

Let  $\lambda \in \Lambda_2$ . For an arbitrary  $0 < \mu \in I$   $B_{\mu}$  is stochastic and from equ (\*) follows

$$\sum_{i=1}^n (B_{\mu}^{\tau \delta} c)_i = \sum_{i=1}^n c_i . \quad \forall \delta \in N \quad (**)$$

By definition of  $\Lambda_2$  it is for the eigenvalue

$$\rho := \mu \lambda + 1$$

of  $B_{\mu}$

$$|\rho| \neq 1 .$$

The properties of stochastic matrices ([5]) yield

$$|\rho| < 1 .$$

Let  $c$  be  $c^{(\lambda)}(u)(w)$ . By equ. (13) we have

$$B_{\mu}^{\tau \delta} c = B_{\mu}^{\tau \delta} c^{(\lambda)}(u)(w) =$$

$$= \rho^{\delta-w+1} \sum_{k=0}^{w-1} \binom{\delta}{k} \rho^{w-1-k} \mu^k c^{(\lambda)}(u)(w-k) .$$

Since

$$\lim_{\delta \rightarrow \infty} \rho^{\delta-w+1} \binom{\delta}{k} = 0$$

because of

$$|\rho| < 1 ,$$

we have

$$\lim_{\delta \rightarrow \infty} B_{\mu}^{\tau \delta} c = 0 .$$

From equ (\*\*) follows

$$\sum_{i=1}^n c_i = 0 .$$

□

As said above, to the eigenvalue 0 of A there exist  $\kappa(0)$  linear independent eigenvectors  $c^{(0)}(1), \dots, c^{(0)}(\kappa(0))$ . Let

$$C(0) := \{c^{(0)}(1), \dots, c^{(0)}(\kappa(0))\} .$$

A fundamental system of the system of differential equations (1) consists of the  $n$  vector-valued functions

$$c^{(0)}(i) \in C(0), \quad i = 1, \dots, \kappa(0),$$

$$c^{(\lambda)}(i) e^{\lambda t} \text{ with } c^{(\lambda)}(i) \in C(\lambda), \quad i = 1, \dots, \kappa(\lambda), \quad \lambda \in \Lambda_1$$

and

$$f^{(\lambda)}(i)(t) e^{\lambda t}, \quad i = 1, \dots, \kappa(\lambda), \quad \lambda \in \Lambda_2,$$

where

$$f^{(\lambda)}(i)(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} q_j^{(\lambda)}(i)(t) c^{(\lambda)}(j)$$

where  $c^{(\lambda)}(j) \in C(\lambda)$ ,  $j = 1, \dots, \kappa(\lambda)$ , and the  $q_j^{(\lambda)}(i)(t)$  are real polynomials in  $t$  of degree  $\leq \kappa(\lambda) - 1$ , (see e.g. [6]). A real solution of (1) under the initial condition

$$y(0) = y^{(0)}$$

has the form

$$y(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda_1} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j^{(\lambda)} \cdot \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t}) +$$

$$+ \gamma_j^{(\lambda)} \cdot \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t})] +$$

$$+ \sum_{\lambda \in \Lambda_2} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j^{(\lambda)} \cdot \operatorname{Re}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t}) +$$

$$+ \gamma_j^{(\lambda)} \cdot \text{Im}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t})] . \quad (14)$$

Let  $e := (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$ . From Th. 4 we have  $\forall t$

$$e \cdot \text{Re}(c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t}) = e \cdot \text{Im}(c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t}) = 0 \quad (15)$$

for  $\lambda \in \Lambda_1$ ,  $c^{(\lambda)}(j) \in \mathbb{C}(\lambda)$ ,  $1 \leq j \leq \kappa(\lambda)$ .

Since for fixed  $t$  the vector  $f^{(\lambda)}(j)(t)$ ,  $\lambda \in \Lambda_2$ ,  $1 \leq j \leq \kappa(\lambda)$ , is a linear combination of  $c^{(\lambda)}(j)$ , we have by Th. 4  $\forall t$

$$e \cdot \text{Re}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t}) = e \cdot \text{Im}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t}) = 0 . \quad (16)$$

Now let  $y(t)$  be a solution of (1) with the initial condition

$$y(0) = y^{(0)}$$

Since by Lemma 1

$$\text{Re}(\lambda) < 0 \quad \forall \lambda \neq 0$$

we have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) .$$

If

$$\kappa(0) = 1 ,$$

we have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \beta_1^{(0)} c^{(0)}(1) .$$

By (15), (16) follows

$$e \cdot y(t) = \beta_1^{(0)} \cdot e \cdot c^{(0)}(1) ,$$

whence

$$\beta_1^{(0)} = \left( \sum_{i=1}^n y_i^{(0)} \right) \left( \sum_{i=1}^n c_i^{(0)}(1) \right)^{-1} .$$

That is, the equilibrium state  $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$  depends only on  $\sum_{i=1}^n y_i^{(0)}$ .

Let  $\kappa(0) \geq 2$  and

$$y^{0(1)} := \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)}(1) c^{(0)}(j) , \quad y^{0(2)} := \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)}(2) c^{(0)}(j)$$

with  $\beta_j^{(0)}(1) \neq \beta_j^{(0)}(2)$  for at least one  $j$  and  $\sum_{i=1}^n y_i^{0(1)} = \sum_{i=1}^n y_i^{0(2)}$  .

For the solutions  $y^{(1)}(t)$ ,  $y^{(2)}(t)$  of (1) under

$$y^{(i)}(0) = y^{0(i)} , \quad i = 1, 2 .$$

we have

$$y^{(1)}(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)}(1) c^{(0)}(j) \neq \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)}(2) c^{(0)}(j) = y^{(2)}(t)$$

by the linear independency of the  $c^{(0)}(1), \dots, c^{(0)}(\kappa(0))$ .

Hence it is shown

Theorem 5. Let  $y^0(1), y^0(2) \in R^n$  with

$$\sum_{i=1}^n y_i^0(1) = \sum_{i=1}^n y_i^0(2) \quad (a)$$

Let  $y^{(i)}(t)$ ,  $i = 1, 2$  be solutions of (1) under the initial conditions

$$y^{(i)}(0) = y^0(i) \quad i = 1, 2.$$

If 0 is a simple eigenvalue of A we have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y^{(1)}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} y^{(2)}(t) \quad (b)$$

If 0 is a multiple eigenvalue of A there are  $y^0(1), y^0(2)$  fulfilling equ. (a) such that equ. (b) does not hold.

Theorem 5 settles question c) of p.4-1 in the sense that the equilibrium state of the cycle depends only on the total amount of material contained in the cycle and not on the special form of the initial state if 0 is a simple eigenvalue of A.

As said above (cf. footnote on p.5-1) our way of proving Th. 5 is by no means the shortest one. In fact one can prove Th. 5 in a very brief manner, using only equ. (7) and Th. 2, ignoring totally Th. 4 and the concept of main vectors. A justification for our proceeding is on one hand the fact

that some results given above will be needed later on (e.g. equ. (13)) and on the other hand that Th. 4 turns out to be useful when considering the disturbed cycle (which will be done in a forthcoming report). We demonstrate the latter - without proof - by a simple example.

Consider the inhomogeneous system of differential equations

$$\frac{d}{dt} z = A z + a \quad ,$$

where  $a := (a_1, \dots, a_n)^T \in \mathbb{R}^n$  and  $A$  is a  $n \times n$  matrix according to (2), (3) .

Assume that the eigenvalue 0 of  $A$  is simple. The general form of a real solution  $z(t)$  of the inhomogeneous system of differential equations is

$$z(t) = y(t) + \sum_{\lambda \in \Lambda_1 \cup \Lambda_2} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\rho_j^{(\lambda)} \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \psi_j^{(\lambda)} \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))] + \rho_1^{(0)} c^{(0)}(1) \cdot t$$

where  $y$  is the solution of the homogeneous system and has the form (14) and  $\rho_j^{(\lambda)}, \psi_j^{(\lambda)} \in \mathbb{R}$  . Of special interest is the coefficient  $\rho_1^{(0)}$  . By application of Th. 4 one obtains

$$\rho_1^{(0)} = \left( \sum_{i=1}^n a_i \right) \cdot \left( \sum_{i=1}^n c_i^{(0)}(1) \right)^{-1}$$

$\left( \sum_{i=1}^n c_i^{(0)}(1) \right) \neq 0$ , see e.g. [5] p 58, Th. 3) ,

i.e.  $\rho_1^{(0)}$  does not depend on the special form of the vector  $a$  but only on the sum of its components .

6. Conditions for the uniqueness of the final state and for the non-oscillating behaviour of the cycle

The above Theorem 5 leads at once to the question which kind of cycles induce a matrix  $A$  with the simple eigenvalue  $0$ . Another question concerns the asymptotic behaviour of the solution  $y(t)$  of (1). How do the components of  $y(t)$  approach the inventories of the final state: do they oscillate or not? As can be seen from equ. (7) they obviously don't oscillate if all eigenvalues of  $A$  are real.

We will formulate criteria which guarantee the simplicity of the eigenvalue  $0$  and reality of the other eigenvalues of  $A$ . For instance it will turn out that our example on page 2-1 belongs to the most comfortable type of cycles: no oscillation and the final state depends only on the total amount of  $CO_2$  contained in the system.

We begin with a definition:

Two different boxes  $E$  and  $F$  of a cycle are called adjacent if for the transition coefficients  $k_{EF}$ ,  $k_{FE}$  it is

$$k_{EF} > 0$$

or

$$k_{FE} > 0 .$$

This means the boxes  $E$  and  $F$  are adjacent if material can flow from  $E$  to  $F$  or vice versa.

For the rest of the paper we will consider only those cycles which cannot be divided into two or more disjoint subcycles; that is we assume from now: if  $C$  and  $D$  are different boxes of a cycle there is a series  $B_0, \dots, B_k$  of different boxes of the cycle such that  $C_i, C_{i+1}$  are adjacent  $\forall i$  and  $C = B_0, D = B_k$ . Those cycles we call connected cycles. To treat only connected cycles is no loss of generality since the behaviour of a cycle which consists of two or more disjoint subcycles is completely known, when the behaviour of each subcycle is known.

The matrices  $A$  which are induced by connected cycles can obviously be characterized as follows: let  $\pi: \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$  be a permutation of the first  $n$  numbers. Assign to  $\pi$  the matrix  $P_\pi$ ,

$$P_\pi := (\delta_{\pi(i) j}) \quad i, j = 1, \dots, n,$$

where  $\delta_{m1}$  is the Kronecker-symbol, i.e.

$$\delta_{m1} := \begin{cases} 0 & m \neq 1 \\ 1 & m = 1 \end{cases}$$

Then if  $A$  arises from a connected cycle there is no permutation  $\pi$  such that  $P_\pi A P_\pi^T$  has the form

$$\begin{pmatrix} A^{(1)} & 0 \\ 0 & A^{(2)} \end{pmatrix}$$

with  $A^{(1)}, A^{(2)}$  square.

We now define a special type of connected cycles, which - in analogy to graph theory - are called trees. We say a connected cycle is a tree if two different boxes are connected in exactly one way. More precisely:

A connected cycle is called a tree if for two arbitrary, different boxes  $E, F$  of the cycle there is exactly one series  $B_0, \dots, B_k$  of different boxes such that  $B_j, B_{j+1}$  are adjacent for all  $j$  and  $B_0 = E, B_k = F$ .

A matrix  $A$  which is induced by a tree is obviously characterized by the following property:

let  $a_{p,q} > 0, a_{s,t} > 0$  for  $\{p,q\} \neq \{s,t\}$ . If there are two series of sets

$$\{i_v^{(1)}, j_v^{(1)}\}, \quad i_v^{(1)} \neq j_v^{(1)}, \quad l = 1, 2, \quad v = 0, \dots, k_l \text{ with}$$

$$\{p,q\} \cap \{i_0^{(1)}, j_0^{(1)}\} \neq \emptyset, \quad \{s,t\} \cap \{i_{k_1}^{(1)}, j_{k_1}^{(1)}\} \neq \emptyset, \quad l = 1, 2$$

$$\{i_v^{(1)}, j_v^{(1)}\} \neq \{i_{v+1}^{(1)}, j_{v+1}^{(1)}\}, \quad \{i_v^{(1)}, j_v^{(1)}\} \cap \{i_{v+1}^{(1)}, j_{v+1}^{(1)}\} \neq \emptyset$$

for  $l = 1, 2, v = 0, \dots, k_l - 1$  and

$$\max(a_{i_v^{(1)} j_v^{(1)}}, a_{j_v^{(1)} i_v^{(1)}}) > 0 \text{ for all } 1 \leq v \leq k_l \text{ and } l = 1, 2$$

then  $k_1 = k_2$  and  $\{i_v^{(1)}, j_v^{(1)}\} = \{i_v^{(2)}, j_v^{(2)}\}$  for all  $v$ .

For instance our example on page 2-1 is a tree.

We shall see that all matrices  $A$  which arise from trees have only real eigenvalues. For this we need the following lemma.

Lemma 6. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a tree, have the following property:

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall 1 \leq i, j \leq n, i \neq j .$$

Let  $K$  be an  $n \times n$  matrix with

$$\text{sgn}(k_{m1}) = \text{sgn}(a_{m1}) \quad \forall m \neq 1 .$$

Then there is  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x_i > 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$  with

$$k_{ij} x_j = k_{ji} x_i \quad \forall 1 \leq i, j \leq n, i \neq j \quad (x)$$

Proof (by induction) .

Let  $A$  arise from a cycle with only two boxes.

From the tree-property follows

$$a_{12} > 0, \quad a_{21} > 0 .$$

Hence for every  $x_1 > 0$

$$(x_1, x_1 \cdot k_{21} k_{12}^{-1})$$

is a positive solution of syst. (x) .

Assume the lemma is true for all matrices induced by trees with at most  $(n - 1)$  boxes.

Let  $A$  arise from a tree with  $n$  boxes.

By the tree-property and since the number of boxes is finite, there is a box  $B_{m_0}$  which is adjacent to exactly one box  $B_{m_1}$ . By omitting the box  $B_{m_0}$  we obtain a tree with  $(n - 1)$  boxes.

By assumption there is  $x' \in R^{n-1}$ ,  $x'_i > 0 \quad \forall 1 \leq i \leq n - 1$  with

$$k_{ij} x_j = k_{ji} x_i \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad i, j \neq m_0, \quad i \neq j .$$

Let

$$x'_{m_0} := x'_{m_1} k_{m_0 m_1} \cdot k_{m_1 m_0}^{-1} .$$

The system

$$k_{i m_0} x_{m_0} = k_{m_0 i} x'_i \quad i = 1, \dots, n$$

is solved by  $x'_{m_0}$ , since

$$k_{i m_0} = k_{m_0 i} = 0 \quad \forall i \neq m_1 .$$

Hence the vector

$$\hat{x} := (x'_1, \dots, x'_{\min(m_0, m_1)}, \dots, x'_{\max(m_0, m_1)}, \dots, x'_n) \in R^n$$

solves

$$k_{ij} x_j = k_{ji} x_i \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad i \neq j$$

and

$$\hat{x}_i > 0 \quad \forall i = 1, \dots, n .$$

□

Next we want to show that a matrix  $A$ , induced by a tree, with the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j$$

is similar to a symmetric matrix .

Lemma 7 . Let the  $n \times n$  matrix  $A$  be induced by a tree and

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j .$$

Then there is a non-singular  $n \times n$  matrix  $T$  such that  $T^{-1} A T$  is symmetric.

Proof. By Lemma 6 there exists  $x \in R^n$ ,

$$x_i > 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$$

such that

$$a_{ij} x_j = a_{ji} x_i \quad \forall i \neq j .$$

Let

$$T := \begin{pmatrix} \sqrt{x_1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & 0 \\ 0 & & & \sqrt{x_n} \end{pmatrix}$$

and

$$U := A T^2 .$$

It is

$$u_{ij} = a_{ij} x_j ,$$

hence

$$u_{ij} = u_{ji} , \quad \forall i, j$$

that is  $U$  is symmetric .

Since  $T$  is non-singular it is

$$S := T^{-1} U T^{-1} = T^{-1} A T$$

and

$$S^T = T^{-1T} U^T T^{-1T} = T^{-1} U T^{-1} = S .$$

□

From Lemma 7 one easily obtains

Theorem 8. Let the  $n \times n$  matrix  $A$  arise from a tree. Then all eigenvalues of  $A$  are real .

If furthermore  $A$  has the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 ,$$

then each eigenvalue  $\lambda$  of  $A$  has  $\kappa(\lambda)$  linear independent eigenvectors;  
 any  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x_i > 0 \forall i$ , which solves

$$a_{ij} x_j = a_{ji} x_i \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad i \neq j$$

is an eigenvector to the eigenvalue  $0$ .

Proof. We first prove the second part of the theorem.

Let  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x_i > 0 \forall i$  solve the system

$$a_{ij} x_j = a_{ji} x_i, \quad i \neq j.$$

With  $T := \begin{pmatrix} \sqrt{x_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sqrt{x_n} \end{pmatrix}$ , the matrix

$$U := A T^2$$

is symmetric. For the  $i$ -th component of  $A x$  we have

$$\begin{aligned} (A x)_i &= \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = \sum_{j=1}^n u_{ij} = \sum_{j=1}^n u_{ji} = \sum_{j=1}^n a_{ji} x_j = \\ &= \left( \sum_{j=1}^n a_{ji} \right) x_i = 0 \cdot x_i. \end{aligned}$$

Hence  $x$  is an eigenvector to the eigenvalue  $0$  of  $A$ .

Let

$$S := T^{-1} A T.$$

Since

$$S = T^{-1} U T^{-1} ,$$

the matrix  $S$  is symmetric. By a well known theorem of matrix theory (see e.g. [7]) there is an orthogonal real  $n \times n$  matrix  $D$  with

$$D S D^T = \Lambda$$

where  $\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$  ,  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  being the eigenvalues of  $S$

(and also of  $A$  since  $S$  and  $A$  are similar) .

It is

$$D^T \Lambda = S D^T = T^{-1} A T D^T ,$$

therefore

$$A T D^T = T D^T \Lambda .$$

Let  $c_1, \dots, c_n$  denote the columns of  $T D^T$  . We have

$$A T D^T = (\lambda_1 c_1, \dots, \lambda_n c_n) ,$$

whence

$$A c_i = \lambda_i c_i .$$

Since  $T D^T$  is non-singular, the  $c_1, \dots, c_n$  are linear independent.

Thus the second part of the theorem is proved.

Now let  $A$  be an arbitrary matrix induced by a tree.

Define the matrix  $\tilde{A} := (\tilde{a}_{ij})_{i, j = 1, \dots, n}$  by

$$\tilde{a}_{ij} = \tilde{a}_{ji} = \max(a_{ij}, a_{ji}) \quad \text{for } i \neq j$$

$$\tilde{a}_{ii} := - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \tilde{a}_{ji} .$$

Let  $A(u) := u \tilde{A} + (1-u) A$  for  $u \geq 0$ .

Obviously  $A(u)$  has the properties (2), (3).

$A(u)$  is induced by a connected cycle. For if there were a permutation  $\pi$  such that

$$P_{\pi} A(u) P_{\pi}^T = \begin{pmatrix} \tilde{A}^{(1)} & \\ & 0 \\ 0 & \tilde{A}^{(2)} \end{pmatrix}$$

with  $\tilde{A}^{(1)}, \tilde{A}^{(2)}$  square, then by

$$P_{\pi} A(u) P_{\pi}^T = u P_{\pi} \tilde{A} P_{\pi}^T + (1-u) P_{\pi} A P_{\pi}^T$$

and the fact that

$$\text{sgn}(P_{\pi} A(u) P_{\pi}^T)_{ij} \geq \text{sgn}(P_{\pi} A P_{\pi}^T)_{ij} \quad \forall i \neq j$$

(remember that  $P_{\pi} A P_{\pi}^T$  is obtained by applying the permutation  $\pi$  simultaneously to the rows and columns of  $A$ ) we would have the contradiction

$$P_{\pi} A P_{\pi}^{\tau} = \begin{pmatrix} A^{(1)} & & \\ & 0 & \\ 0 & & A^{(2)} \end{pmatrix}, \quad A^{(1)}, A^{(2)} \text{ square.}$$

The matrix  $A(u) := (a_{ij}^{(u)})_{i, j = 1, \dots, n}$  rises from a tree :

Since for  $u > 0$

$$a_{ij}^{(u)} > 0 \iff \max(a_{ij}, a_{ji}) > 0,$$

and since  $A$  is induced by a tree, one immediately sees that  $A(u)$  has the property described on page 6-3, which characterizes matrices stemming from trees .

Trivially for  $A(u)$  ,  $u > 0$

$$a_{ij}^{(u)} > 0 \iff a_{ji}^{(u)} > 0 \quad \forall i \neq j .$$

By Lemma 7  $A(u)$  is similar to a symmetric matrix for all  $u > 0$  . Hence  $A(u)$  only has real eigenvalues for all  $u > 0$  . Since the eigenvalues of  $A(u)$  depend continuously on  $u$  the theorem is proved.  $\square$

From Th. 8 follows that the components  $y_i(t)$  of a solution  $y(t)$  of (1) do not oscillate but are monotonous for  $t \geq t_0$  , with  $t_0$  sufficiently large, when the cycle is a tree. This is an immediate consequence of the fact that the sin-and cos-terms in equ. (7) vanish because the eigenvalues are all real. If in addition, the matrix  $A$  has the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j$$

then, by Th. 8, there exist  $n$  linear independent eigenvectors and the general solution of (1) has form (c. f. [6], § 3 )

$$y(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda_1 \cup \Lambda_2} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} \beta_j^{(\lambda)} c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t},$$

where  $\beta_j^{(\lambda)} \in \mathbb{R}$  and  $c^{(\lambda)}(j)$ ,  $j = 1, \dots, \kappa(\lambda)$ , are linear independent eigenvectors of  $A$  to the eigenvalue  $\lambda$ .

In fact,  $y(t)$  has the even simpler form

$$y(t) = \beta_1^{(0)} c^{(0)}(1) + \sum_{\lambda \in \Lambda_1 \cup \Lambda_2} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} \beta_j^{(\lambda)} c^{(\lambda)}(j) e^{\lambda t}$$

because of  $\kappa(0) = 1$ . The latter is a consequence of the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j, \quad (*)$$

and is independent of the fact that  $A$  arises from a tree.

This means that for all matrices, induced by a connected cycle which may be a tree or not, we have

$$\kappa(0) = 1,$$

if  $A$  has the above property (\*).

This will be shown by use of the following lemmas.

Lemma 9. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a connected cycle, have the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j .$$

Then for each  $1 \leq j \leq n$  there exists a  $i_j \neq j$  with

$$a_{i_j j} > 0, \quad a_{j i_j} > 0 .$$

Proof. Assume that there is a  $j_0$  with

$$a_{i j_0} = 0 \quad \forall i \neq j_0 .$$

$$\text{Hence } a_{j_0 i} = 0 \quad \forall i \neq j_0 .$$

Define a permutation  $\pi_{j_0}$  by

$$\pi_{j_0}(k) := k \quad \forall k \neq j_0, n$$

$$\pi_{j_0}(j_0) := n, \quad \pi_{j_0}(n) = j_0 .$$

The matrix  $A_{j_0} := (a_{\pi_{j_0}(s) \pi_{j_0}(t)})_{s, t = 1, \dots, n}$  has the form

$$\begin{pmatrix} A^{(1)} & 0 \\ 0 & a_{j_0 j_0} \end{pmatrix} .$$

This is not possible for connected cycles since  $A_{j_0} = P_{\pi_{j_0}} A P_{\pi_{j_0}}^T$ ,

$$P_{\pi_{j_0}} := (\delta_{\pi_{j_0}(i)j})_{i, j = 1, \dots, n} .$$

□

Lemma 10. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a connected cycle, have the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j .$$

Let  $D$  be a  $n \times n$  matrix with

$$\text{sgn } d_{ij} = \text{sgn } a_{ij} \quad \forall i \neq j ,$$

$$d_{ii} > 0 \quad \forall i .$$

Then for each  $1 \leq j \leq n$  there is a permutation  $\pi_j$ , such that with

$$P_{\pi_j} := (\delta_{\pi_j(u)v})_{u, v = 1, \dots, n} \quad \text{the matrix}$$

$$K_{\pi_j} := P_{\pi_j} D P_{\pi_j}^T$$

has the property

$$k_{i i}^{(\pi_j)} > 0 \quad \forall i \neq j ,$$

and for each  $j' \leq j$  there is a  $i_{j'} < j'$  with

$$k_{i_{j'} j'}^{(\pi_j)} > 0 , \quad k_{j' i_{j'}}^{(\pi_j)} > 0$$

Proof. (by induction over  $j$ )

For  $j = 1$  there is nothing to prove. Assume that for  $1 \leq j < n$  there is a permutation  $\tilde{\pi}$  such that

$$k_{j' j'}^{(\tilde{\pi})} > 0 \quad \forall j' \leq j$$

and for every  $j' \leq j$  there is a  $i_{j'} < j'$  such that

$$k_{i_{j'} j'}^{(\hat{\nu})} > 0, \quad k_{j' i_{j'}}^{(\hat{\nu})} > 0.$$

Since  $K_{\hat{\nu}} = P_{\hat{\nu}} D P_{\hat{\nu}}^T$  it is  $k_{u v}^{(\hat{\nu})} = d_{\hat{\nu}(u)} \hat{\nu}(v)$  for all  $u, v = 1, \dots, n$ ; especially

$$k_{i_{j+1} j+1}^{(\hat{\nu})} = d_{\hat{\nu}(i)} \hat{\nu}(j+1), \quad k_{j+1 i}^{(\hat{\nu})} = d_{\hat{\nu}(j+1)} \hat{\nu}(i).$$

By Lemma 9 there is a  $i_{\hat{\nu}(j+1)} \neq \hat{\nu}(j+1)$  such that

$$d_{i_{\hat{\nu}(j+1)} \hat{\nu}(j+1)} > 0, \quad d_{\hat{\nu}(j+1) i_{\hat{\nu}(j+1)}} > 0.$$

Hence with  $r := \hat{\nu}^{-1}(i_{\hat{\nu}(j+1)})$  it is

$$k_{r j+1}^{(\hat{\nu})} > 0, \quad k_{j+1 r}^{(\hat{\nu})} > 0.$$

If  $r < j+1$  nothing is to show. Assume therefore  $r > j+1$ .

Then there are  $m, l$  with  $m > j+1 > l$  and

$$k_{m l}^{(\hat{\nu})} > 0, \quad k_{l m}^{(\hat{\nu})} > 0,$$

for, if such  $m, l$  would not exist, it would be

$$K_{\hat{\nu}} = \begin{pmatrix} K^{(1)} & 0 \\ 0 & K^{(2)} \end{pmatrix}$$

with  $K^{(1)} = (k_{uv}^{(\hat{\nu})})_{u, v = 1, \dots, j}$ ,  $K^{(2)} = (k_{uv}^{(\hat{\nu})})_{u, v = j+1, \dots, n}$   
 which is a contradiction, since with the special matrix

$D := A + [1 + \max_i |a_{ii}|] E$  we would have

$$P_{\hat{\nu}} A P_{\hat{\nu}}^{\tau} = P_{\hat{\nu}} (D - [1 + \max_i |a_{ii}|] E) P_{\hat{\nu}}^{\tau} = \begin{pmatrix} A^{(1)} & 0 \\ 0 & A^{(2)} \end{pmatrix}, \quad A^{(1)}, \quad A^{(2)}$$

square .

Now define a permutation  $\hat{\pi}$  by

$$\hat{\pi}(i) := i \quad \forall i \neq j+1, m, \quad \hat{\pi}(j+1) := m, \quad \hat{\pi}(m) := j+1 .$$

With

$$K_{\hat{\pi}}^{\hat{\nu}} := P_{\hat{\pi}} K^{(\hat{\nu})} P_{\hat{\pi}}^{\tau}$$

we have

$$k_{st}^{(\hat{\pi})} = k_{\hat{\pi}(s)\hat{\pi}(t)}^{(\hat{\nu})} \quad \forall s, t$$

hence

$$k_{st}^{(\hat{\pi})} = k_{st}^{(\hat{\nu})} \quad \forall s, t \neq j+1, m$$

and

$$k_{j+1, j+1}^{(\hat{\pi})} = k_{m, m}^{(\hat{\nu})} = d_{\hat{\nu}-1}(m) \nu_{\hat{\pi}-1}(m) > 0$$

$$k_{j+1}^{(\hat{\pi})} = k_{j+1}^{(\tilde{\pi})} > 0, \quad k_{j+1}^{(\hat{\pi})} = k_{j+1}^{(\tilde{\pi})} > 0.$$

With

$$\pi_{j+1} := \hat{\pi} \circ \tilde{\pi}$$

defined by

$$(\hat{\pi} \circ \tilde{\pi})(i) = \hat{\pi}(\tilde{\pi}(i))$$

we have

$$K_{\pi_{j+1}} = P_{\pi_{j+1}} D P_{\pi_{j+1}}^T$$

and our statement is true for  $j+1$ . □

Lemma 11. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a connected cycle, have the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j.$$

Let  $D$  be a  $n \times n$  matrix with

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} d_{ij} &= \operatorname{sgn} a_{ij} & \forall i \neq j \\ d_{ii} &> 0 & \forall i. \end{aligned}$$

Let

$$(d_{ij}^{(v)})_{i, j = 1, \dots, n} := D^v, \quad v \in \mathbb{N}.$$

Then

$$d_{ij}^{(n-1)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n$$

Proof. By Lemma 10 there is a permutation  $\pi$  such that with

$$P_\pi := (\delta_{\pi(i)j}) \quad i, j = 1, \dots, n \quad \text{the matrix}$$

$$K := P_\pi D P_\pi^\tau$$

has the property

$$k_{ii} > 0 \quad \forall i$$

and for every  $1 \leq j \leq n$  there is a  $i_j < j$  such that

$$k_{i_j j} > 0, \quad k_{j i_j} > 0.$$

It suffices to show

$$k_{ij}^{(n-1)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n$$

since, because of

$$P_\pi^\tau P_\pi = E,$$

it is

$$K^{n-1} = P_\pi D^{n-1} P_\pi^\tau$$

and

$$d_{ij}^{(n-1)} = k_{\pi^{-1}(i) \pi^{-1}(j)}^{(n-1)}.$$

The proof is by induction over  $n$  .

For  $n = 1$  there is nothing to prove.

Assume the lemma is true for  $n_0 < n$  ,  $n_0 \geq 1$  . Let

$$K := (k_{ij}) \quad i, j = 1, \dots, n_0+1$$

$$K' := (k'_{ij}) \quad i, j = 1, \dots, n_0+1, \quad k'_{ij} := \begin{cases} k_{ij} , & i \leq n_0 \text{ and } j \leq n_0 \\ 0 , & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$K'' := (k''_{ij}) \quad i, j = 1, \dots, n_0+1, \quad k''_{ij} := \begin{cases} k_{ij} , & i = n_0+1 \text{ or } j = n_0+1 \\ 0 , & \text{otherwise} \end{cases}$$

Obviously

$$K = K' + K'' \quad .$$

It is

$$\begin{aligned} K^{n_0} &= \frac{1}{2}(K' + K'')^{n_0} + \frac{1}{2}(K'' + K')^{n_0} = \\ &= K'^{n_0} + K''^{n_0} + \frac{1}{2} n_0 K'^{n_0-1} K'' + \frac{1}{2} n_0 K'' K'^{n_0-1} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{r=2}^{n_0-2} \binom{n_0}{r} [K'^{n-r} K''^r + K''^{n-r} K'^r] \quad . \end{aligned} \quad (*)$$

Obviously

$$k''_{n_0+1 \ n_0+1} \binom{n_0}{n_0+1} \geq k_{n_0+1 \ n_0+1} > 0 \quad . \quad (a)$$

Since

$$K'_{n_0} := (k'_{ij})_{i, j = 1, \dots, n_0} = (k_{ij})_{i, j = 1, \dots, n_0}$$

has the property :

$$k'_{ii} > 0 \quad \forall i = 1, \dots, n_0$$

and to each  $1 \leq j \leq n_0$  there exists  $i_j < j$  such that

$$k'_{i_j j} > 0, \quad k'_{j i_j} > 0$$

we have by assumption

$$k'_{ij}^{(n_0-1)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n_0 \quad (b)$$

hence

$$k'_{ij}^{(n_0)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n_0 .$$

We have from equ. (\*) for  $i \leq n_0$

$$k'_{i n_0+1}^{(n_0)} \geq \frac{1}{2} n_0 \sum_{j=1}^{n_0+1} k'_{ij}^{(n_0-1)} k''_{j n_0+1} > 0 \quad (c)$$

since there is a  $i_{n_0+1} < n_0+1$  with

$$k''_{i_{n_0+1} n_0+1} > 0$$

and

$$k_{n_0+1, i}^{(n_0)} \geq \frac{1}{2} n_0 \sum_{j=1}^{n_0+1} k''_{n_0+1, j} k'_{j, i}^{(n_0-1)} > 0 \quad (d)$$

since

$$k''_{n_0+1, i_{n_0+1}} > 0 .$$

By (a), (b), (c), (d) we have

$$k_{i, j}^{(n_0)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n$$

and our statement is proved for  $n_0+1$  . □

From Lemma 11 one easily obtains

Theorem 12. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a connected cycle, have the property

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j .$$

Then 0 is a simple eigenvalue of  $A$  .

Proof. Let  $0 < \mu < (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|)^{-1}$

and

$$D := E + \mu A .$$

It is

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} d_{ij} &= \operatorname{sgn} a_{ij} && \forall i \neq j \\ d_{ii} &> 0 && \forall i \end{aligned}$$

By Lemma 11 we have with  $(d_{ij}^{(n-1)})_{i, j = 1, \dots, n} := D^{n-1}$

$$d_{ij}^{(n-1)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n.$$

Since  $D^T$  is a stochastic matrix it follows (see e.g. [5], p. 70, Th. 8) that 1 is a simple eigenvalue of  $D^T$ . Therefore 0 is a simple eigenvalue of  $(D^T - E) = \mu A^T$ , hence of  $A$ .

□

The above Theorem 12 can slightly be weakened

Theorem 12'. Let the  $n \times n$  matrix  $A$ , induced by a connected cycle, have the property:

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad i \neq j$$

for at least  $(n-1)$  numbers  $j \in \{1, \dots, n\}$ .

Then 0 is a simple eigenvalue of  $A$ .

Proof. If  $a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall 1 \leq j \leq n$  then by Th. 12 nothing is to be proved. Assume therefore that for a  $1 \leq j' \leq n$

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall i \neq j, j \neq j'$$

and

$$a_{ij'} \cdot a_{j'i} = 0 .$$

Define a permutation  $\pi$  by

$$\pi(i) := i \quad \forall i \neq j', n, \quad \pi(j') := n, \quad \pi(n) := j'$$

$$\text{and } P_\pi := (\delta_{\pi(i)j}) \quad i, j = 1, \dots, n .$$

Let

$$M := P_\pi A P_\pi^T .$$

There is a  $i' \neq n$  with

$$m_{i'n} > 0 \quad \text{or} \quad m_{ni'} > 0 ,$$

otherwise  $M = \begin{pmatrix} A^{(1)} & 0 \\ 0 & A^{(2)} \end{pmatrix}$ , which contradicts the fact that  $A$  is induced by a connected cycle.

$$\text{Let } 0 < \mu < (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|)^{-1} \quad \text{and}$$

$$D := E + \mu A .$$

Let

$$K := P_\pi D P_\pi^T = E + \mu M$$

and

$$K' := (k'_{ij})_{i, j = 1, \dots, n}, \quad k'_{ij} := \begin{cases} k_{ij}, & i < n \text{ and } j < n \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$K'' := (k''_{ij})_{i, j = 1, \dots, n}, \quad k''_{ij} := \begin{cases} k_{ij}, & i = n \text{ or } j = n \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$K'_{n-1} := (k'_{ij})_{i, j = 1, \dots, n-1}$$

Since because

$$k'_{ij} = \delta_{ij} + \mu a_{\pi(i)\pi(j)}$$

the matrix  $K'_{n-1}$  has the property

$$k'_{ij} > 0 \iff k'_{ji} > 0,$$

it follows by Lemma 11 that with  $K_{n-1}^{n-2} := (k_{ij}^{(n-2)})_{i, j = 1, \dots, n-1}$

$$k_{ij}^{(n-2)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n-1.$$

It is

$$\begin{aligned} K^{n-1} &= \frac{1}{2} (K' + K'')^{n-1} + \frac{1}{2} (K'' + K')^{n-1} = K'^{n-1} + K''^{n-1} + \frac{1}{2} (n-1) K'^{n-2} K'' \\ &+ \frac{1}{2} (n-1) K'' K'^{n-2} + \frac{1}{2} \sum_{r=2}^{n-3} \binom{n}{r} [K'^{n-r} K''^r + K''^{n-r} K'^r]. \end{aligned}$$

Now assume that

$$m_{i', n} > 0 \quad \text{for } i' \neq n,$$

hence

$$k''_{i', n} > 0.$$

Since

$$k'_{ij}^{(n-2)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n-1$$

we have

$$k_{i'n}^{(n-1)} \geq \frac{1}{2}(n-1) \sum_{j=1}^n k'_{ij}^{(n-2)} k''_{j'n} > 0 \quad \forall 1 \leq i < n. \quad (\text{a})$$

Since

$$k'_{ij}^{(n-2)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n-1$$

we have

$$k_{ij}^{(n-1)} > 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n-1. \quad (\text{b})$$

From (a) and (b) we see that  $K^{n-1}$  has a row with only non-zero elements.

Assume that for  $i' \neq n$

$$m_{ni'} > 0; \text{ hence } k''_{ni'} > 0.$$

It is

$$k_{nn}^{(n-1)} \geq k_{nn}^{n-1} > 0 \quad (a')$$

and

$$k_{ni}^{(n-1)} \geq \frac{1}{2}(n-1) \sum_{j=1}^n k_{nj}'' \quad k_{ji}^{(n-2)} > 0 \quad \forall 1 \leq i < n \quad (b')$$

From (a') and (b') we see that the  $n$ -th row of  $K^{n-1}$  has only non-zero elements.

Thus we have shown that the matrix  $(K^\tau)^{n-1}$  has a column consisting solely of non-zero elements. Since  $K^\tau$  is a stochastic matrix it follows (see e.g. [8]) that 1 is a simple eigenvalue of  $K^\tau$ . Therefore 0 is a simple eigenvalue of  $\frac{1}{\mu} P_\pi^\tau (K - E) P_\pi = A$ . □

In Th. 12 we admitted that only  $n-1$  of the relations

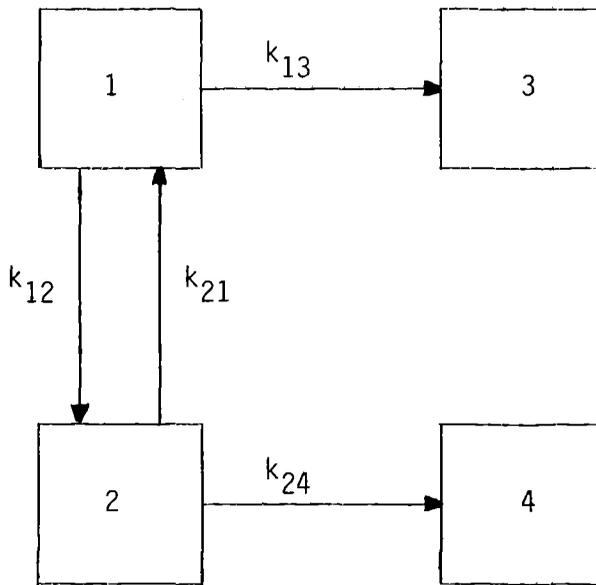
$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0$$

must hold.

Generally this can't be weakened in the sense that two or more of the above relations may be omitted.

We demonstrate this by a simple example

Regard the following 4-Box connected cycle



The  $k_{12}$ ,  $k_{21}$ ,  $k_{13}$ ,  $k_{24}$  are positive transition coefficients from box  $i$  to box  $j$ . There is no transition from box 3 to 1 and from box 4 to 1 and between box 3 and 4, thus

$$k_{31} = k_{42} = k_{34} = k_{43} = 0 .$$

Denote  $M$  the total amount of material contained in the cycle. Intuitively one would expect that

$$y^{(1)} := (0, 0, M, 0)^{\tau} , \quad y^{(2)} := (0, 0, 0, M)^{\tau}$$

are equilibrium states which would imply that the final state of the cycle depends not only on the value  $M$  but also on the initial distribution of  $M$  to the four boxes. This turns out to be true, since  $y^{(1)}$ ,  $y^{(2)}$  are eigenvectors to the eigenvalue 0 of the induced matrix



As can easily be seen  $A$  is induced by a connected cycle which is not a tree. The eigenvalues of  $A$  are  $0, a_{11}, \dots, a_{n-1, n-1}$ ,

hence all real. The matrix

$$D := (E + A)^T$$

is stochastic and its  $n$ -th column contains only non-zero elements. Therefore (see e.g. [8])  $1$  is a simple eigenvalue of  $D$ , hence  $0$  is a simple eigenvalue of  $A$ .

## 7. Computation of the final state

When the solution  $y(t)$  of (1) under the initial condition

$$y(0) = y^0$$

is known the final state of the cycle can easily be calculated by  $t \rightarrow \infty$ . However obtaining  $y(t)$  generally involves computation of the eigenvalues of  $A$  and their main vectors, which may be tedious. The method given here for determining the final state does not use eigenvalues and main vectors but consists only of simple matrix multiplications. The following lemma will be needed

Lemma 13. Let  $B$  be a stochastic  $n \times n$  matrix with

$$b_{ii} > 0 \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

For every eigenvalue  $\lambda$  of  $B$  it is

$$|\lambda| = 1 \iff \lambda = 1.$$

Proof. Let  $\hat{\lambda}$  be an eigenvalue of  $B$  with

$$|\hat{\lambda}| = 1.$$

Let  $\hat{x} \in R$  be an eigenvector to  $\hat{\lambda}$  and

$$|\hat{x}_s| = \max_{1 \leq i \leq n} |\hat{x}_i|.$$

By

$$B \hat{x} = \hat{\lambda} \hat{x}$$

it is

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq s}}^n b_{si} \hat{x}_i = (\hat{\lambda} - b_{ss}) \hat{x}_s ,$$

$$\Rightarrow \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq s}}^n b_{si} \geq \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq s}}^n b_{si} \frac{|\hat{x}_i|}{|\hat{x}_s|} \geq |\hat{\lambda} - b_{ss}| \geq |\hat{\lambda}| - b_{ss} = 1 - b_{ss} .$$

Since the row sums of stochastic matrices are 1, equality must hold, hence

$$|\hat{\lambda} - b_{ss}| = 1 - b_{ss} .$$

Because of  $b_{ss} > 0$  this is obviously possible only for

$$\hat{\lambda} = 1 .$$

□

Let in the following denote  $\Lambda$  the set of the non-zero eigenvalues of the  $n \times n$  matrix  $A$ . For each eigenvalue  $\lambda$  of  $A$ , including 0, let  $C(\lambda)$  be a set of  $\kappa(\lambda)$  linear independent mainvectors to  $\lambda$ ,  $\kappa(\lambda)$  being the multiplicity of  $\lambda$ . For the representation of an arbitrary  $z \in \mathbb{R}^n$  as a linear combination of the real and imaginary parts of the mainvectors the following lemma holds.

Lemma 14. Let  $z \in \mathbb{R}^n$ . There are real numbers

$$\beta_1^{(0)}, \dots, \beta_{\kappa(0)}^{(0)}, \beta_1^{(\lambda)}, \dots, \beta_{\kappa(\lambda)}^{(\lambda)}, \gamma_1^{(\lambda)}, \dots, \gamma_{\kappa(\lambda)}^{(\lambda)}, \quad \lambda \in \Lambda$$

such that

$$z = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j^{(\lambda)} \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \gamma_j^{(\lambda)} \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))]$$

where  $c^{(\lambda)}(j) \in \mathbb{C}(\lambda)$ ,  $1 \leq j \leq \kappa(\lambda)$ ,  $\lambda \in \Lambda \cup \{0\}$ .

The  $\beta_1^{(0)}, \dots, \beta_{\kappa(0)}^{(0)}$  are uniquely determined by  $z$ .

Proof. Since the  $c^{(\lambda)}(j)$ ,  $1 \leq j \leq \kappa(\lambda)$ ,  $\lambda \in \Lambda \cup \{0\}$  are linear independent there are (not necessarily real) numbers  $\delta_j^{(\lambda)}$ ,  $1 \leq j \leq \kappa(\lambda)$ ,  $\lambda \in \Lambda \cup \{0\}$  such that for  $z \in \mathbb{R}^n$

$$z = \sum_{\lambda \in \Lambda \cup \{0\}} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} \delta_j^{(\lambda)} c^{(\lambda)}(j)$$

which proves our first statement.

Let with  $0 < \mu < (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|)^{-1}$

$$B_\mu^\tau := E + \mu A$$

The matrix  $B_\mu$  is stochastic with non-zero main diagonal elements. Thus  $B_\mu$  has the eigenvalues 1 and

$$\rho := 1 + \mu \lambda, \quad \lambda \in \Lambda$$

and it is by Lemma 13

$$|\rho| < 1 \quad \forall \rho = 1 + \mu \lambda, \quad \lambda \in \Lambda$$

since  $|\rho| > 1$  is impossible for stochastic matrices ([5], p. 73, Th. 1).

From equ. (13) one immediately sees that

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} B_{\mu}^{\tau \nu} c^{(\lambda)}(j) = 0 \quad \forall 1 \leq j \leq \kappa(\lambda), \quad \lambda \in \Lambda. \quad (*)$$

Now let for an arbitrary  $z \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j'(0) c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j'(\lambda) \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \gamma_j'(\lambda) \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))] = \\ & = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j''(0) c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j''(\lambda) \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \gamma_j''(\lambda) \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))] = \\ & = z. \end{aligned}$$

Since

$$B_{\mu}^{\tau} c^{(0)}(j) = c^{(0)}(j) \quad \forall 1 \leq j \leq \kappa(0),$$

we have from equ. (\*)

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} B_{\mu}^{\tau \nu} z = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j'(0) c^{(0)}(j) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j''(0) c^{(0)}(j)$$

which by the linear independence of the  $c^{(0)}(1), \dots, c^{(0)}(\kappa(0))$  yields

$$\beta_j^{(0)} = \beta_j^{(0)} \quad \forall j = 1, \dots, \kappa(0) .$$

□

With the help of Lemma 14 we are now able to give a simple method of computing the final state by the following theorem.

Theorem 15. Let  $y(t)$  be a solution of (1) under the initial condition

$$y(0) = y^{(0)} .$$

The final state  $y(\infty)$  is given by

$$y(\infty) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} (E + \mu A)^\nu y^{(0)}$$

for arbitrary  $0 < \mu < (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|)^{-1}$  .

Proof. The solution  $y(t)$  has the form

$$y(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\beta_j^{(\lambda)} \operatorname{Re}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t}) + \gamma_j^{(\lambda)} \operatorname{Im}(f^{(\lambda)}(j)(t) e^{\lambda t})] ,$$

where  $c^{(\lambda)}(j) \in C(\lambda)$ ,  $j = 1, \dots, \kappa(\lambda)$ ,  $\lambda \in \Lambda \cup \{0\}$ ,

$$f^{(\lambda)}(j)(t) := \sum_{r=1}^{\kappa(\lambda)} q_r^{(\lambda)}(j)(t) c^{(\lambda)}(r),$$

and the  $q_r^{(\lambda)}(j)(t)$  are real polynomials of degree  $\leq \kappa(\lambda) - 1$ .

Hence for

$$t = 0$$

we have

$$y(0) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\delta_j^{(\lambda)} \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \varepsilon_j^{(\lambda)} \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))]$$

with

$$\delta_j^{(\lambda)}, \varepsilon_j^{(\lambda)} \in \mathbb{R}, \quad 1 \leq j \leq \kappa(\lambda), \quad \lambda \in \Lambda.$$

Let

$$y(0) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \alpha_j^{(0)} c^{(0)}(j) + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{\kappa(\lambda)} [\phi_j^{(\lambda)} \operatorname{Re}(c^{(\lambda)}(j)) + \psi_j^{(\lambda)} \operatorname{Im}(c^{(\lambda)}(j))]$$

By Lemma 13 we have

$$\beta_j^{(0)} = \alpha_j^{(0)} \quad \forall j = 1, \dots, \kappa(0). \quad (*)$$

For any  $0 < \mu < (\max_{1 \leq i \leq n} |a_{ij}|)^{-1}$

$$B_{\mu} := (E + \mu A)^{\tau}$$

is a stochastic matrix with non-zero main diagonal elements. Hence  $B_{\mu}$  possesses the eigenvalues 1 and

$$\rho := 1 + \mu \lambda, \quad \lambda \in \Lambda,$$

and, by Lemma 13 and since  $|\rho| > 1$  is impossible for stochastic matrices,  $|\rho| < 1$ .

By equ. (13) it is

$$\begin{aligned} \lim_{v \rightarrow \infty} B_{\mu}^{\tau v} y^{(0)} &= \lim_{v \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \alpha_j^{(0)} B_{\mu}^{\tau v} c^{(0)}(j) + 0 \\ &= \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \alpha_j^{(0)} c^{(0)}(j) \end{aligned} \quad (**)$$

because of

$$B_{\mu}^{\tau} c^{(0)}(j) = c^{(0)}(j) + \mu \cdot 0 \cdot c^{(0)}(j) = c^{(0)}(j) \quad \forall 1 \leq j \leq \kappa(0).$$

Since by Lemma 1

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 1 \quad \forall \lambda \in \Lambda$$

we obviously have

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \sum_{j=1}^{\kappa(0)} \beta_j^{(0)} c^{(0)}(j)$$

which with equs. (\*), (\*\*) proves the theorem. □

## References

- [1] Sawyer, I.S.: Man-Made Carbon Dioxide and the Greenhouse Effect. Nature, 239, 23-26 (1972)
  
- [2] Machta, L.: The role of the Oceans and Biosphere in the Carbon Dioxide Cycle. Proceedings of the 20th Nobel Symposium, Algwist & Wiksell, Stockholm (1971)
  
- [3] Zimen, K.E. and F.K. Altenheim: The Future Burden of Industrial CO<sub>2</sub> on the Atmosphere and the Oceans. Die Naturwissenschaften, 28a, 1747-1752 (1973)
  
- [4] Avenhaus, R. and G. Hartmann: The Carbon Cycle of the Earth - A Material Balance Approach, IIASA Research Report RR-75-45 (Dec. 1975)
  
- [5] Gantmacher, F.R.: Matrizenrechnung, Bd. II, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1971
  
- [6] Grauert, H., W. Fischer: Differential- und Integralrechnung, Bd. II, Springer, Berlin 1968
  
- [7] Zurmühl, R.: Matrizen, Springer, Berlin 1950
  
- [8] Pykh, J.A.: On the eigenvalues of stochastic matrices. Dokl. Akad. Nauk SSSR, Vol. 211, No. 6, 1299-1301, 1973

T e i l   I I

S. Fenyi

## Inhaltsverzeichnis (Teil II)

8. Irreversible - thermodynamische Aspekte
9. Elektrische Modelle
10. Numerische Experimente

## 8. Irreversible - thermodynamische Aspekte

Die phänomenologische irreversible Thermodynamik der 'first order kinetics' Systeme ist gut ausgearbeitet.

Die Linearität des Differentialgleichungssystems (3.1) spielt dabei die wesentliche Rolle /1/,/2/,/3/.

Die Linearität von (3.1) erlaubt eine Transformation mit einem in 4 erwähnten Faktor  $\mu$ , der physikalisch eine Zeitdilatation oder Zeitkontraktion bedeutet

$$\frac{d}{dt} y = A y \quad (1)$$

$$t = \mu t'$$

$$\frac{d}{dt'} y = \mu A y \quad \mu > 0 \quad (2)$$

Diese Gleichung bedeutet, daß alle 'rate constants'  $a_{ij}$  von  $A$  mit  $\mu$  so zu  $\mu \cdot a_{ij} \quad \forall i \neq j$  transformiert werden können, daß die grundlegenden Eigenschaften von  $A$  auch für die zeittransformierte Matrix  $\mu \cdot A$  gültig bleiben.

Diese lauten wiederholt:

$$\mu a_{ij} \in \mathbb{R}$$

$$\mu a_{ij} \geq 0 \quad \forall i \neq j \quad (3.2)$$

$$\mu a_{ii} = -\mu \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \quad \forall i \quad (3.3)$$

Es kann der folgende Satz formuliert werden:

Satz 1: Zu jedem  $A$  mit Eigenschaften 3.2, 3.3 kann ein Zeittransformationsfaktor  $\mu > 0$  so gewählt werden, daß die Matrix  $B$

$$B := (\mu A + E)^T \quad (4)$$

eine stochastische Matrix wird.

(Die Eigenschaften einer stochastischen Matrix wurden in 4.5, 4.6 festgelegt)

Die Behauptung des Satzes 1 ist trivial und beruht auf Lemma 1. Das Ziel dieses Abschnittes war eigentlich die physikalische Deutung des Faktors  $\mu$ , der besonders bei numerischen Experimenten zum Tragen kommt. (Siehe später!)

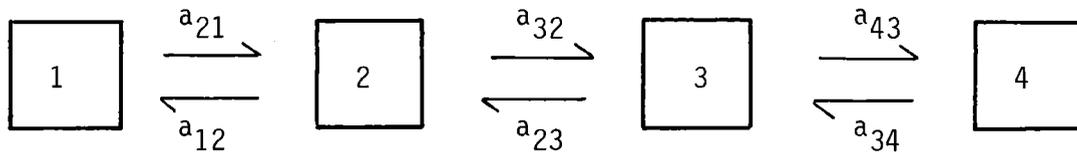
Für die irreversible Thermodynamik sind die Boxenmodelle sehr interessant, deren Graph ein Baum ist und bei denen die in Kapitel 6 beschriebene Eigenschaft

$$a_{ij} > 0 \iff a_{ji} > 0 \quad \forall 1 \leq i, j \leq n \quad i \neq j \quad (5)$$

gewährleistet ist. Diese Eigenschaft nennen wir weiterhin in diesem Kapitel die Eigenschaft  $A$ . (Diese Eigenschaft bedeutet nichts anderes - nach der

Terminologie der irreversiblen Thermodynamik und der gleichgewichtsnahen Reaktionskinetik - , daß die Reaktionswege reversibel sind.)

Nach diesen erwähnten Kriterien werden einige Boxen-Modelle durchgemustert. Das Vierboxenmodell von Craig /4/ hat folgende Form :



wobei die Boxen folgenderweise numeriert sind:

- 1 Vegetation and humus
- 2 Atmosphere
- 3 Upper mixed layer of the sea
- 4 Deep sea .

Der Graph dieses Modells ist ein unverzweigter (linearer) Baum.

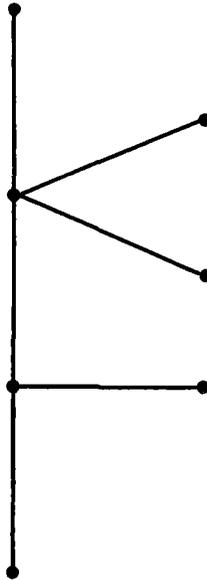


Die Differentialgleichung (1) lautet mit dieser Boxennumerierung folgenderweise

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(t) \\ \dot{y}_2(t) \\ \dot{y}_3(t) \\ \dot{y}_4(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{21} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & (-a_{12} - a_{32}) & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & (-a_{23} - a_{43}) & k_{34} \\ 0 & 0 & k_{43} & -k_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \\ y_4(t) \end{pmatrix} \quad (6)$$



Das Modell von Machta /6/ gehört auch zu dieser Gruppe der Boxenmodelle, die die Eigenschaft  $A$  besitzen. Der Graph des Modells ist ein verzweigter Baum



(Über die Gestalt der Systemmatrix wird auf Ref. /21/ verwiesen).

Diese Boxen-Modelle haben alle die Eigenschaft  $A$ . Dies beinhaltet nach Theorem 12, daß  $0$  ein einfacher Eigenwert ist. Zu diesem Eigenwert gehört der Eigenvektor  $x$ .

Nach Theorem 8 sind alle Eigenwerte reell. Nach einem Theorem der Matrixtheorie (zitiert auf Seite 6-9) hat die Systemmatrix  $A$  ein vollständiges Eigenvektorsystem. Dies bedeutet mathematisch, daß die analytische explizite Lösung von (1) mit Exponentialmatrizen (siehe Seite 4-5), oder nach /7/ kein Problem ist.

Diese Einfachheit der mathematischen Lösung beinhaltet eine ganze Reihe interessanter irreversible thermodynamische Aspekte:

Wenn das Boxenmodell Eigenschaft  $A$  besitzt, gilt nach Theorem 8:

$$U := A T^2 \quad (8)$$

wobei  $U$  eine symmetrische Matrix ist, und  $T^2$  aus den Komponenten des zu einfachen Eigenwert 0 gehörenden Eigenvektors gebildet wird (siehe Seite 6-8 ).

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad T^2 = \begin{pmatrix} x_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & x_n \end{pmatrix} \quad (9)$$

Die Symmetrie von  $U$  als mathematische Eigenschaft:

$$U^T = U \Rightarrow u_{ij} = u_{ji} \quad \forall i, j \quad (10)$$

ist nichts anderes, als das grundlegende Prinzip der irreversiblen Thermodynamik, das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts / 8 / .

Daher kann folgender physikalischer Satz ausgesprochen werden.

Phys. Satz 1

Wenn das 'first order kinetics' System die Eigenschaft  $A$  besitzt, wird dadurch das Prinzip des detaillierten Gleichgewichtes erfüllt.

□

Da die Eigenschaft  $A$  physikalisch gedeutet nur die Reversibilität der Reaktionsschritte und die Kreislosigkeit des Graphen erfordert, kann der physikalische Satz 1 noch folgenderweise formuliert werden

Phys. Satz 1

Wenn das 'first order kinetics' System die Eigenschaft  $A$  besitzt, wird das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts für beliebige (willkürliche) Wahl der 'rate constants'

$$a_{ij} \in \mathbb{R} \quad \forall i, j$$

automatisch erfüllt.

□

Deshalb nennen wir die 'first order kinetics' Systeme mit Eigenschaft  $A$  'first order kinetics' Systeme, die das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts inherent erfüllen. Wenn der Graph nicht kreislos ist, aber die Reversibilität (5) noch aufrecht erhalten wird, müssen noch zusätzliche Bedingungen, die Wegscheider'schen Bedingungen gelten, damit das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts erhalten bleibt. Das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts ist physikalisch deshalb wichtig, weil es eine Erscheinungsform der in der Natur generell gültigen Onsager'schen Reziprozitätsrelationen ist /13/ .

Mathematisch gesehen ist die Symmetrie von  $U$  gleichbedeutend mit dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts. Diese Symmetrie von  $U$  garantiert die reellen Eigenwerte von  $A$ , das von ausschlaggebender Bedeutung ist. (Die Symmetrie von  $U$  ist eine Folge der Eigenschaft  $A$ ). Nach Lemma 7

gibt es eine Ähnlichkeitstransformation von  $A$  mit der Matrix  $T$ , so daß die Ähnlichkeitstransformierte

$$S := T^{-1} A T \quad (11)$$

symmetrisch ist.

$$S^T = S$$

Daraus folgt, daß  $A$  reelle Eigenwerte hat.

Nach dieser kurzen inhaltlichen Wiederholung des Lemma 7, können wir die Aussage noch verschärfen.

Satz 1

Sei für ein 'first order kinetics' System Eigenschaft  $A$  erfüllt, dann hat  $A$  negative Eigenwerte (und den einfachen Eigenwert 0).

Nach Lemma 7

$$S := T^{-1} A T \quad (12)$$

ist  $S$  symmetrisch.

$A$  und  $S$  haben die gleichen Eigenwerte, weil (12) eine Ähnlichkeitstransformation ist.

Wir zeigen, daß die zur symmetrischen Matrix  $S$  zugeordnete quadratische Form negativ semidefinit ist, d.h. daß für einen beliebigen Vektor  $x$  gilt

$$x^T S x \leq 0 \quad (13)$$

Wenn wir (12) ausmultiplizieren, erhalten wir die Matrix  $S$  in folgender expliziter Form

$$S = \begin{pmatrix} -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n a_{j1} & a_{12} \sqrt{\frac{x_2}{x_1}} & \dots & a_{1n} \sqrt{\frac{x_n}{x_1}} \\ a_{21} \sqrt{\frac{x_1}{x_2}} & -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n a_{j2} & \dots & a_{2n} \sqrt{\frac{x_n}{x_2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} \sqrt{\frac{x_1}{x_n}} & a_{n2} \sqrt{\frac{x_2}{x_n}} & \dots & -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n a_{jn} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Die Matrix  $S$  ist symmetrisch, deshalb gilt

$$a_{ij} \sqrt{\frac{x_j}{x_i}} = a_{ji} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}} \quad \forall i \neq j \quad (15)$$

außerdem folgt aus Lemma 7

$$a_{ij} x_j = a_{ji} x_i \quad \forall i \neq j \quad (16)$$

Aus diesen beiden Gleichungen folgt für die Außendiagonalelemente von  $S$  die Form

$$(S)_{ij} = a_{ij} \sqrt{\frac{x_j}{x_i}} = a_{ji} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}} = \sqrt{a_{ji} a_{ij}} \quad \forall i \neq j. \quad (17)$$

Schreiben wir (13) explizite aus

$$x^T S x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i (S)_{ij} x_j,$$

dann ergibt sich mit (17)

$$\begin{aligned} x^T S x &= - \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (a_{ij} x_i^2 - \sqrt{a_{ij} a_{ji}} x_i x_j) \\ &= - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (\sqrt{a_{ji}} x_i - \sqrt{a_{ij}} x_j)^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Da der Summand für beliebige Vektoren nur positiv (oder Null) sein kann, gilt:

$$x^T S x \leq 0. \quad (19)$$

Deshalb kann der folgende Satz 1 ausgesprochen werden

Satz 1

Die zu  $S$  zugeordnete quadratische Form ist negativ semidefinit.  $S$  hat deshalb nur negative Eigenwerte (und einen Eigenwert 0). Da  $S$  und  $A$

ähnlich sind, gilt die gleiche Aussage für  $A$ .

Dieser Satz wurde in / 8 / bewiesen. Die Formel enthielt aber so gravierenden Druckfehler, daß eine fehlerfreie Durchrechnung notwendig erschien.

Der Satz 1 ist wichtig für die qualitative Klassifizierung der Lösungen (1). Nach / 7 / ist die Lösung von (1) eine Linearkombination des Fundamentalsystems, die die Anfangsbedingungen befriedigt (siehe auch Seite 4-4).

Wenn die Eigenschaft  $A$  gewährleistet ist, lautet das Fundamentalsystem für (1):

$$\begin{aligned}
 y_1^{(1)} &= x_1^{(1)} e^{\lambda_1 t} & y_2^{(1)} &= x_2^{(1)} e^{\lambda_1 t}, \dots, y_n^{(1)} &= x_n^{(1)} e^{\lambda_1 t} \\
 y_1^{(2)} &= x_1^{(2)} e^{\lambda_2 t} & y_2^{(2)} &= x_2^{(2)} e^{\lambda_2 t}, \dots, y_n^{(2)} &= x_n^{(2)} e^{\lambda_2 t} \\
 &\vdots & & & \\
 y_1^{(j)} &= x_1^{(j)} e^{\lambda_j t} & y_2^{(j)} &= x_2^{(j)} e^{\lambda_j t}, \dots, y_n^{(j)} &= x_n^{(j)} e^{\lambda_j t} \\
 &\vdots & & & \\
 y_1^{(n)} &= x_1^{(n)} e^{\lambda_n t} & y_2^{(n)} &= x_2^{(n)} e^{\lambda_n t}, \dots, y_n^{(n)} &= x_n^{(n)} e^{\lambda_n t}
 \end{aligned} \tag{20}$$

Wo  $(x_1^{(j)}, x_2^{(j)}, \dots, x_n^{(j)})$  der zu  $\lambda = \lambda_j$  Eigenwert gehörender Eigenvektor ist.

Die Lösung lautet:

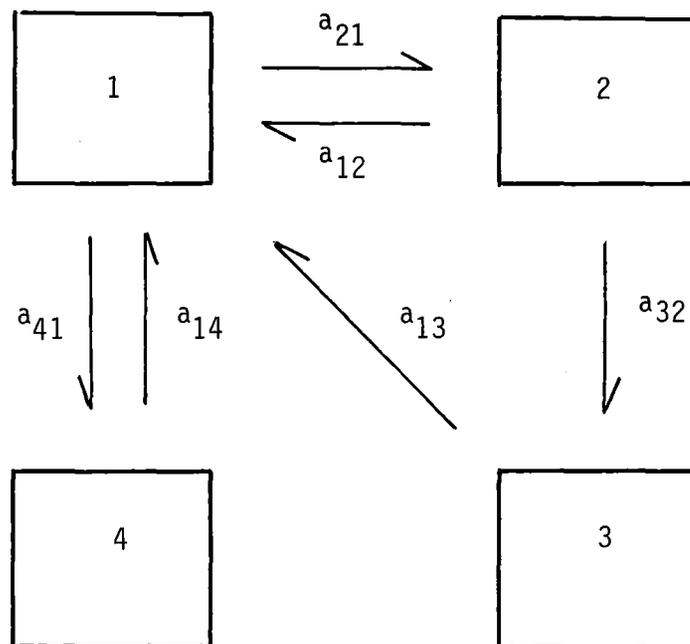
$$\begin{aligned}
y_1 &= \sum_{i=1}^n c_i y_1^{(i)} \\
\vdots & \\
y_n &= \sum_{i=1}^n c_i y_n^{(i)}
\end{aligned}
\tag{21}$$

(Die  $c_i$ 's werden von den Anfangsbedingungen bestimmt).

Ein Eigenwert ist Null, die anderen  $n-1$  sind alle negativ und verschieden. (Es liegt keine 'zufällige Entartung' vor. Dies ist eine Restriktion der 'rate constants') .

Die Lösung (21) ist dann ein Aggregat von  $n-1$  Exponentialfunktionen mit negativem Exponent. Daher können die Lösungen  $y_1, \dots, y_n$  nach einem Satz von Polya und Szegö / 9/ höchstens  $n-2$  mal Extremalwerte annehmen, und höchstens  $n-2$  mal den Gleichgewichtswert durchlaufen. Dies bedeutet, daß 'first order kinetics' Systeme mit Eigenschaft A oszillationsunfähig sind, und daß das Gleichgewicht aperiodisch gedämpft erreicht wird. Es gibt eine andere Möglichkeit der Klassifizierung der Lösungen mit den Klein'schen W-Kurven / 10/. Generell kann man sagen, daß Eigenschaft A, (oder die inherente Erfüllung des Prinzips detaillierten Gleichgewichts) eine ganze Fülle von interessanten mathematischen Eigenschaften mit sich bringt.

Es gibt Boxen-Modelle für den  $CO_2$ -Kreislauf auf der Basis der 'first order kinetics', die die Eigenschaft A nicht besitzen /11/ .



Dieses Modell verstehen wir in linearisierter Form im Sinne der 'first order kinetics'.

Aus dieser Abbildung sind wichtige Tatbestände der irreversiblen Thermodynamik zu erkennen. Eigenschaft A gilt nicht mehr. Gewisse Reaktionswege sind irreversibel. Darüber hinaus kann man geschlossene Schleifen mit einer Umlaufrichtung auswählen. Dies sind die Onsager'schen Kreisläufe. Dies bedeutet, daß das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts nicht mehr gilt. Die Matrix A kann komplexe Eigenwerte haben.

Diese Art von Boxen-Modellen wurden im mathematischen Teil ausgiebig behandelt.

## 9. Elektrische Modelle

Boxenmodelle können generell mit elektrischen Netzwerken simuliert werden. Diese Simulation hat gewisse grundlegende Vorteile: Man gewinnt mehr Einsicht in die Dynamik des Systems.

Um eine Netzwerkanalogie aufzustellen, führen wir eine spezielle Ähnlichkeitstransformation durch. Zuerst nehmen wir wegen der Einfachheit an, daß der Null-Eigenwert von  $A$  einfach ist. Die Matrix  $T^2$  ist dann eindeutig bestimmt und regulär. Transformieren wir (1) mit  $T^2 := C$

$$\frac{d(C^{-1}y)}{dt} = (C^{-1} A C) C^{-1} y \quad . \quad (22)$$

Die Ähnlichkeitstransformierte Matrix ist

$$C^{-1} A C \quad (23)$$

Theorem 9.1

$$C^{-1} A C = A^T \quad (24)$$

Beweis:

Wegen (8) ist  $U$  symmetrisch

$$U := A C \quad \Rightarrow \quad U^T = U = C^T A^T \quad (25)$$

setzen wir in (23) (25) ein

$$C^{-1} A C = C^{-1} U = C^{-1} U^T = C^{-1} C^T A^T \quad (26)$$

weil  $C^T = C$  ist ( $C$  ist eine reguläre Diagonalmatrix) und

$$C^{-1} C^T = C^{-1} C = E$$

folgt aus (26)

$$C^{-1} A C = E \quad A^T = A^T \quad .$$

Damit ist die Behauptung bewiesen.

□

In (22) haben wir eine Transformation definiert, die ein Endomorphismus ist

$$\varphi := \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad . \quad (27)$$

Sie ist ein bijektiver Endomorphismus, weil  $C$ , die Matrix des Endomorphismus, eine reguläre Matrix ist. Der Endomorphismus in Koordinatentransformationsform lautet:

$$z := C^{-1} y \quad (28)$$

wobei  $z$  der neue (transformierte) Koordinatenvektor ist.

Mit dieser Notation lautet (1) in der transformierten Basis

$$\frac{d z}{d t} = A^T z \quad . \quad (29)$$

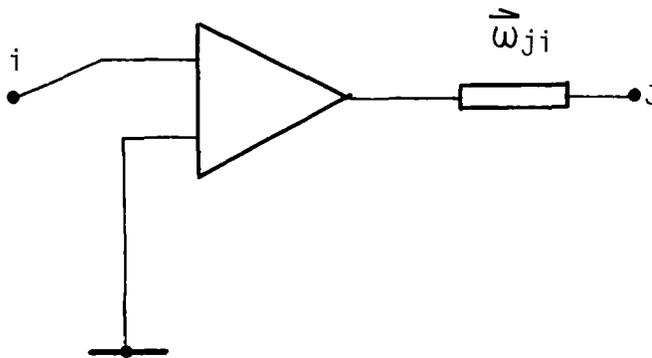
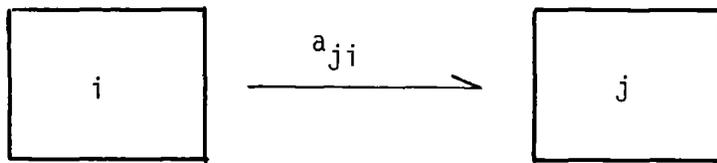
Wenn wir (29) (in der transformierten Basis) lösen, lautet die Rücktransformation nach (28)

$$y = C z \quad . \quad (30)$$

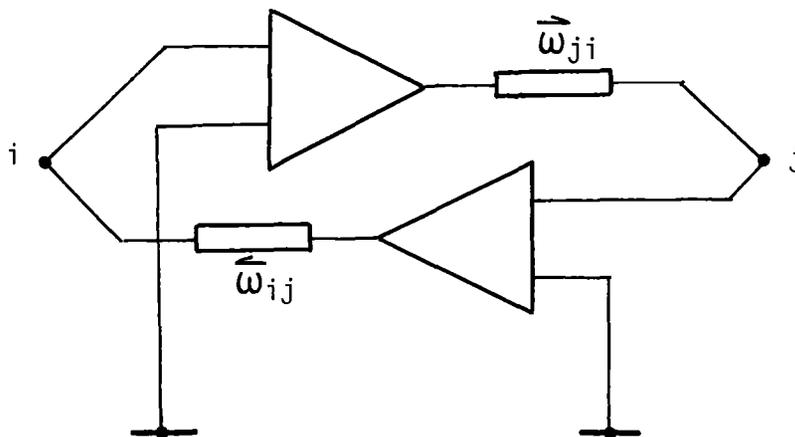
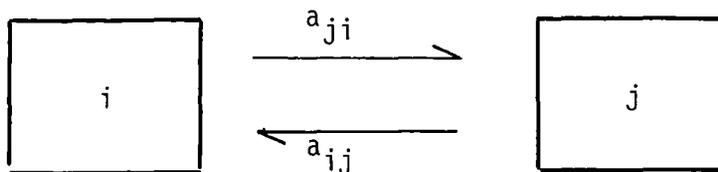
Die Gleichung (29) kann man instrumentell lösen /12/, /13/.

Wir brauchen soviel Knotenpunkte wie Boxen. Wenn eine Box  $i$  nur mit einem

Pfeil mit einer anderen  $j$  verbunden ist, bauen wir zwischen den Knoten  $i$  und  $j$  von der Pfeilrichtung abhängig folgendes Schaltelement ein:



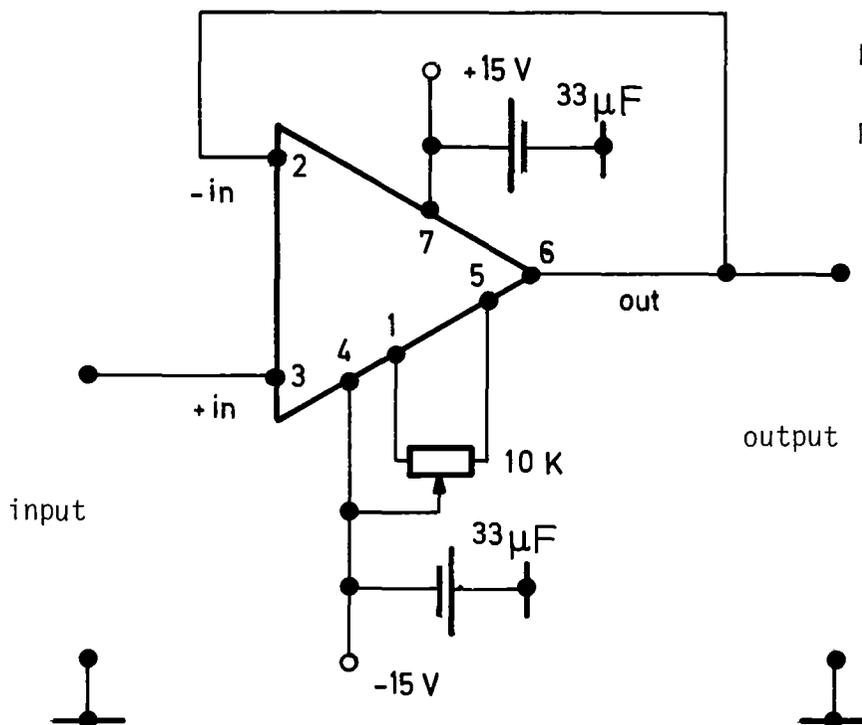
Wenn die Boxen  $i, j$  'reversibel' miteinander verbunden sind, ergibt sich folgendes Schaltbild:



Die Dreiecke bedeuten zunächst einen idealen Trennverstärker  
(Eingangswiderstand  $\infty$ , Ausgangswiderstand 0).

Eine Verwirklichung dieses Verstärkers wird unten angegeben.  $\overleftarrow{\omega}_{ij}$  ist  
der Kehrwert der 'rate constant' und hat die Dimension einer Admittanz.

Op. Verst. :National Semiconductor LH 74o ACH



$$R_{input} = 10^{12} \Omega$$

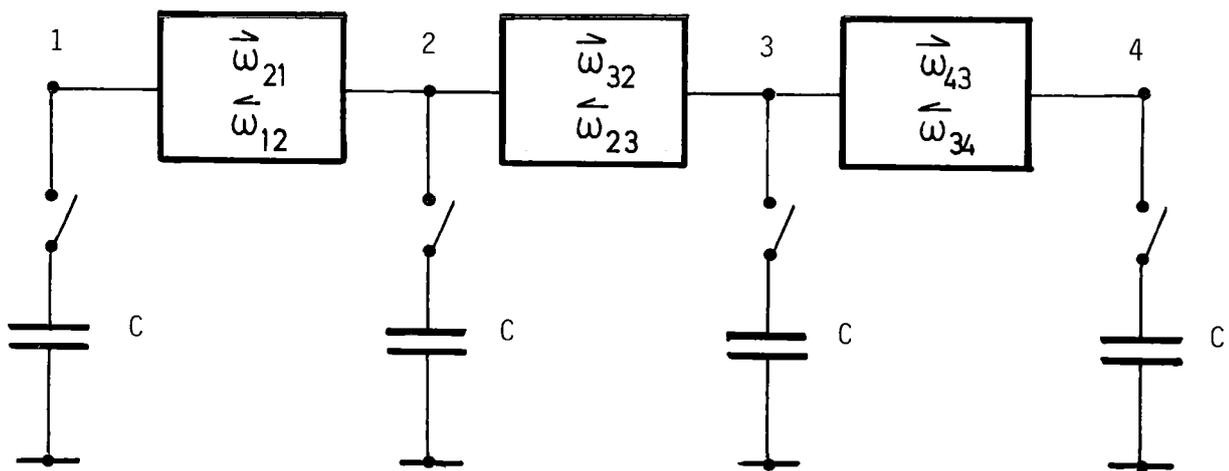
$$R_{outpt} = 10^{-4}, 10^{-5} \Omega$$

$$R_{Last} = \text{ab } 1K \Omega$$

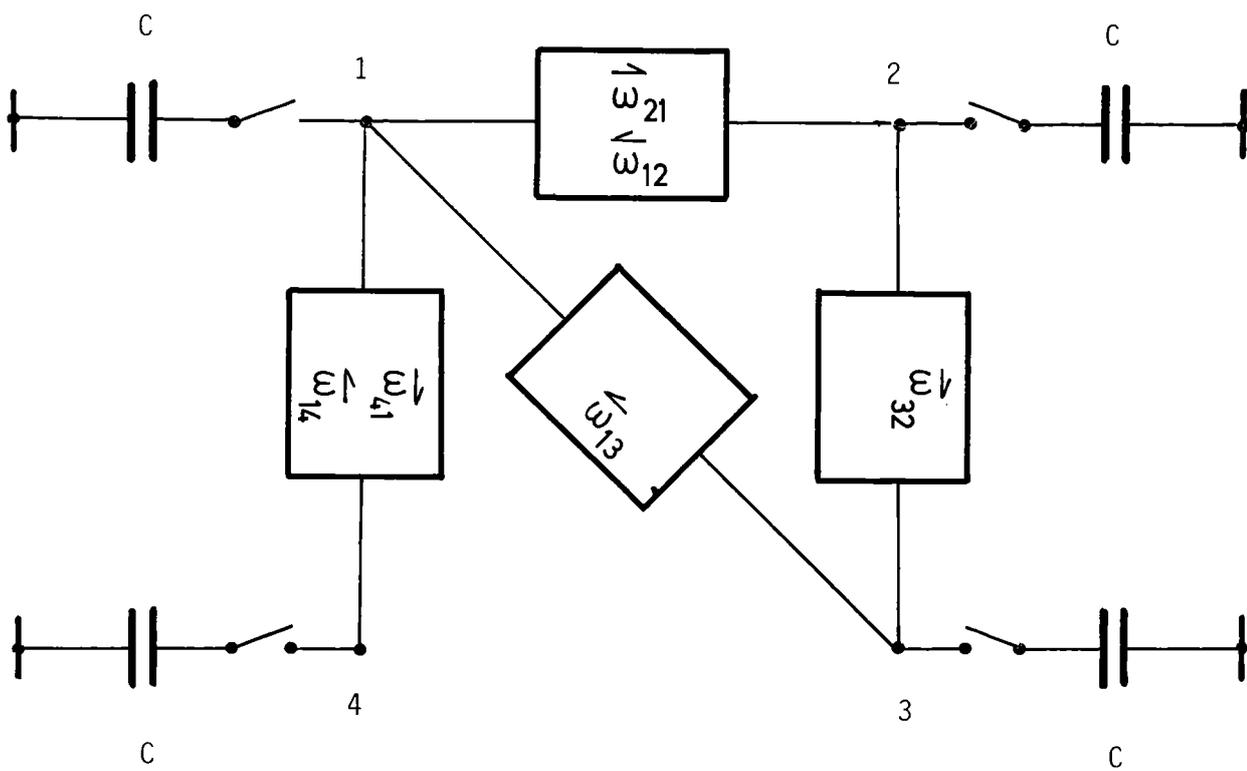
Die Knotenpunkte werden mit der Erde durch Kondensatoren verbunden, die  
mit einem Schalter versehen sind.

Die Kondensatoren werden den Anfangsbedingungen entsprechend aufgeladen,  
und bei  $t = t_{+0}$  auf das Netz geschaltet.

Die Kapazität der Kondensatoren sind untereinander gleich und das R C  
Verhältnis ist frei einzustellen. Die elektrische Ersatzschaltung für das  
Craig-Modell sieht folgendermaßen aus:



Für das linearisierte Modell /11/:



Jeder Kasten symbolisiert ein einfaches oder reversibles 'rate constant' Paar, wie die vorangehenden Abbildungen es zeigen. Die  $\overleftarrow{\omega}_{ij}$  sind weiterhin die skalaren Admittanzen. Der Pfeil deutet nur die 'Richtung' des betreffenden 'rate constant's .

Man kann für diese elektrischen Modelle mit  $n$  Knotenpunkten die Kirchhoff'schen Knotenpunktgleichungen aufschreiben. Die unbekanntenen Größen sind die  $n$  Knotenpunktspannungen. Streng genommen gibt es nach den Gesetzen der Netzwerktheorie in einem System von  $n+1$  Knoten  $n$  unabhängige Knotenpunktspannungen. Bei unserem Modell ist der überzählige Knoten die Erdung. Die Kirchhoff'schen Knotenpunktgleichungen lauten für  $n$  Knoten

$$\frac{dv}{dt} = \Omega v \quad , \quad (31)$$

wobei  $v$  der Spannungsvektor der  $n$  Knoten (dies ist die gesuchte Größe, die Modellierungsgröße) ist, und  $\Omega$  die Admittanzmatrix. Sie hat die folgende konkrete Form:

$$\Omega := \begin{pmatrix} -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n \omega_{ij} & \omega_{12} & \dots & \omega_{1n} \\ \omega_{21} & -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n \omega_{2j} & \dots & \omega_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{n1} & \omega_{n2} & \dots & -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n \omega_{nj} \end{pmatrix} \quad . \quad (32)$$

Die Matrix  $\Omega$  hat folgende Eigenschaften

$$\omega_{ij} \geq 0 \quad \forall i \neq j \quad (33)$$

$$\omega_{ii} = - \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n \omega_{ij} \quad \forall i \quad (34)$$

Die Eigenschaft (33) bedeutet, daß die Admittanzmatrix nicht symmetrisch, d.h. daß das Netzwerk nichtreziprok ist. Die Eigenschaft (34) bedeutet, daß die Zeilensumme Null ist. Diese Eigenschaft ist darauf zurückzuführen, daß die algebraische Summe der in einen Knotenpunkt zu- und abfließenden Ströme Null ist. Die Zuleitungen der Kondensatoren sind dabei wegzudenken. Die kapazitiven Ströme, die durch diese Leitungen fließen, sind als Generatorenströme zu deuten; sie erscheinen auf der rechten Seite von (30) und ergeben letztlich den  $dv/dt$  Ausdruck ( $C$  ist wegnormiert).

Die Eigenschaften (33), (34) sind mit den Eigenschaften von  $A^T$  identisch. Man kann die Matrixelemente  $\omega_{ij}$  von  $\Omega$  folgenderweise wählen:

$$a_{ij} = \omega_{ij} \quad \forall i \neq j \quad (35)$$

Aus (35) folgt, daß

$$A^T = \Omega \quad (36)$$

ist. Mit anderen Worten, die Lösung des Systems (31) mit der Rücktransformation (30), die bequem nur mathematisch aber nicht instrumentell durchzuführen ist, ist die Lösung von (1). (31) wird mit den abgebildeten Netzwer-

ken instrumentell gelöst. Die instrumentelle Lösung ist der Spannungsvektor  $v$ .

Die elektrische Modellierung wird wesentlich vereinfacht, wenn das Boxen-Modell die Eigenschaft  $A$  hat. Dann gilt die Symmetrisierung der Systemmatrix  $A$  mit der Matrix  $T^2$ , die wir schon wie folgt umbenannt haben:

$$C := T^2 \quad (37)$$

$$C := \begin{pmatrix} c_1 & & 0 \\ & c_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & c_n \end{pmatrix} \quad (38)$$

$$c_i := x_i \quad \forall i \quad (39)$$

Die Symmetrisierung lautet nach (8)

$$U := A C \quad (40)$$

$U$  ist wie erwähnt symmetrisch. Wir weisen eine leicht einsehbare Eigenschaft von  $U$  nach.  $U$  explizite ausgeschrieben lautet:

$$U = \begin{pmatrix} -a_1 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n a_{j1} & c_2 a_{12} & \dots & c_n a_{1n} \\ c_1 a_{21} & -c_2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n a_{j2} & \dots & c_n a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1 a_{n1} & c_2 a_{n2} & \dots & -c_n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n a_{jn} \end{pmatrix} \quad (41)$$

Da  $U$  symmetrisch ist, gilt

$$c_i \cdot a_{ji} = c_j \cdot a_{ij} = (S)_{ij} = (S)_{ji} \quad (42)$$

Aus (41) ist direkt abzulesen, daß die Spaltensumme Null ist. Aus den Symmetrirelationen (42) folgt, daß auch die Zeilensummen Null sind.

Um eine elektrische Ersatzschaltung für (1) mit Eigenschaft  $A$  aufzustellen, nehmen wir  $n$  Knotenpunkte. Die Knotenpunkte verbinden wir mit Widerständen so, wie die Boxen miteinander mit 'rate constant's' verbunden sind. Zu diesem Netzwerk gehört eine symmetrische Admittanzmatrix, da dieses Netz reziprok ist. Die  $\omega_{ij}$  Admittanzen können immer so gewählt werden, daß diese Admittanzmatrix mit  $U$  (41) identisch wird. Die Admittanzmatrix hat so viele Außendiagonalelemente wie die Boxen Verbindungen. Zu jedem Knoten schließen wir einen Kondensator durch einen Schalter an. Der Wert der Kondensatoren (gleich in Matrixform notiert) sei wie in (38). Weiterhin sei:

$$C^{-1} := \begin{pmatrix} \frac{1}{c_1} & & & 0 \\ & \frac{1}{c_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \frac{1}{c_n} \end{pmatrix} . \quad (43)$$

Die Kirchhoff'schen Knotenpunktgleichungen dieses Netzes in Ladungsdarstellung (siehe Näheres in /13/) lauten

$$\frac{dg}{dt} = U C^{-1} g \quad , \quad (44)$$

wobei  $g$  der Ladungsvektor der Kondensatoren und die instrumentell gesuchte Lösung von (44) ist.

Wenn man (40) von links mit  $C^{-1}$  multipliziert, entsteht die Identität

$$U C^{-1} = A \quad . \quad (45)$$

Daraus ergibt sich, daß die Differentialgleichung der elektrischen Ersatzschaltung (44) mit (1) identisch ist. Das wesentliche daran ist, daß die Matrix  $A$  in ein Produkt einer symmetrischen Matrix  $U$  und einer Diagonalmatrix aufgespalten werden kann.

Für das elektrische Modell gilt, wie leicht einzusehen ist, der Ladungserhaltungssatz. Normiert lautet dieser:

$$\sum_{i=1}^n g_i = 1 \quad .$$

Dies ist ein Analogon zur Inventarerhaltung von (1) . Physikalisch gesehen ist dies trivial, da das Widerstandsnetz galvanisch durch die Kondensatoren isoliert ist. Anhand des elektrischen Modells kann man die Gibbs'sche Funktion aufschreiben. Aus dieser kann man die minimale Entropieproduktion und andere gutmütige physikalische Eigenschaften herleiten /13/. Diese sind alle in Eigenschaft A verankert, die nichts anderes als das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts darstellt. Dies bedeutet aber, daß die Beschreibung des CO<sub>2</sub>-Kreislaufes durch Boxen-Modelle fragwürdig ist. Anders ausgedrückt: Die Natur des CO<sub>2</sub>-Kreislaufs ist sehr komplex. Die Boxen-Modelle sind jedoch durch zahlreiche sehr einfache physikalische Eigenschaften ausgezeichnet. Daher ist es unverständlich, daß diese Modelle den CO<sub>2</sub>-Kreislauf quantitativ beschreiben können. Die von uns behandelten Boxen-Modelle wurden übrigens auch in anderer Hinsicht kritisiert /14/ .

Wir möchten noch einen sehr bemerkenswerten Punkt erwähnen, der erst durch das elektrische Modell transparent wurde. Für das Modell von Craig mit den 'rate constants' von /15/ sieht die Systemmatrix A folgenderweise aus:

	a	b	m	d
a	./	.2500000	.16666667	.00000000
b	.03030303	./	.00000000	.00000000
m	.20000000	.00000000	./	.00333333
d	.00000000	.00000000	.16129032	./

wobei die Hauptdiagonale nicht angegeben wird.

(Die Systemmatrix A wird von den Außendiagonalelementen vollkommen bestimmt).

Die Symmetrisierungsmatrix  $C$ , deren Diagonalelemente aus dem zum Eigenwert Null angehörenden Eigenvektor gebildet wird, lautet:

$$C = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$$

	a	b	m	d
a	1.0000000			
b	1.2121212			
m	1.2000000			
d	58.0645161			

Wir bilden nach (40) die symmetrische Matrix  $U$ :

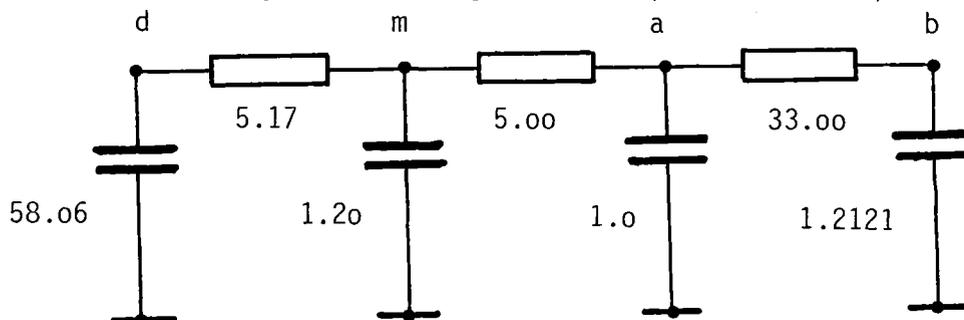
$$U = A C =$$

	a	b	m	d
a	./	.03030303	.20000000	.00000000
b	.03030303	./	.00000000	.00000000
m	.20000000	.00000000	./	.19354839
d	.00000000	.00000000	.19354839	./

Dies ist die Admittanzmatrix  $U$ . Die Kehrwerte sind die Widerstandswerte, z.B.  $R_{ab} = R_{ba} = 33$ . usw.

Die Werte der Kondensatoren lesen wir von der Matrix  $C$  ab.

Die Ersatzschaltung hat die folgende Form (ohne Schalter):



Es ist möglich, immer nur ein Boxen-Paar für sich zu betrachten und die langsamste Zeitkonstante zu bestimmen. Dies bedeutet in reaktionskinetischer Terminologie, daß wir den langsamsten, d.h. den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt suchen. Es ist an sich klar, daß wir die Boxen-Paare auch direkt mathematisch auswerten können. Das elektrische Modell hat aber grundsätzliche Vorteile. Man kann die Zeitkonstanten deuten. Die Zeitkonstante - eine Abschätzung für einen lokalisierten Eigenwert - ergibt sich aus der folgenden Formel:

$$\lambda = -\frac{1}{R} \left( \frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2} \right) .$$

Man kann dann nach den Ursachen fragen, warum die Zeitkonstante groß oder klein ist. Die Kondensatoren sind proportional zu den Gleichgewichtsinventaren, die Widerstände (leider) gekoppelt mit den Gleichgewichtsinventaren werden von den 'rate constants' bestimmt. Trotz dieser Kopplung erlaubt das elektrische Modell eine Einsicht in die Physik des Modells, und liefert die lokalisierten Eigenwerte.

$$\begin{array}{ll} \lambda_{ab} = - 0.055 & \lambda_1 = - 0.018 \\ \lambda_{am} = - 0.36 & \lambda_2 = - 0.469 \\ \lambda_{dm} = - 0.16 & \lambda_3 = - 0.098 \end{array} .$$

Rechts stehen die 'exakten' Eigenwerte, die mit numerischen Methoden bestimmt wurden.

Das merkwürdigste ist, daß der geschwindigkeitsbestimmende Schritt die Einstellung des Gleichgewichts zwischen Atmosphäre und Biomasse ist. Dies ist auf den großen Widerstand zwischen diesen beiden Boxen zurückzuführen. Der Sachverhalt, daß der langsamste Schritt der Biomasse zuzuordnen ist, scheint paradox zu sein.

## 10. Numerische Experimente

Wie Lemma 1 zeigt, ist  $B$  eine stochastische Matrix. Unter den speziellen Bedingungen, die wir bei Modellen mit Eigenschaft  $A$  behandelten, gilt, daß  $B$  mit  $\mu=1$  stochastisch ist (siehe das vorangehende Beispiel). Sei

$$B := (A + E)^T \quad (46)$$

mit den Eigenschaften

$$b_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \quad (47)$$

$$\sum_{j=1}^n b_{ij} = 1 \quad . \quad (48)$$

Man sieht sofort, daß  $\lambda=1$  Eigenwert von  $B$  ist. Im weiteren nehmen wir an, daß dieser Eigenwert einfach ist. Um den Eigenvektor zum Eigenwert 1,  $B u = u$ ,

zu bestimmen, brauchen die folgenden Sätze

Satz : Für eine stoch. Matrix  $P$  konvergiert die Folge  $P^k$   $k = 1, 2, \dots$  genau dann, wenn jeder von 1 verschiedenen Eigenwert von  $P$  betragsmäßig kleiner als 1 ist (/16/ Th. 5 mit /17 /, p. 74, Satz 10).

Wir zeigen nun, daß  $P^k$  bereits dann konvergiert, wenn alle Hauptdiagonalelemente von  $P$  echt positiv sind.

Satz : Sei  $P$  stoch. Matrix und

$$p_{ij} > 0 \quad \forall j = 1, \dots, n,$$

konvergiert die Folge  $P^k$ .

Bew.: Sei  $\lambda$  Eigenwert von  $P$  und  $x$  ein zugehöriger Eigenvektor mit

$$|x_s| = \max_i |x_i|.$$

Aus

$$P x = \lambda x$$

folgt

$$\sum_{i \neq s} p_{si} x_i = (\lambda - p_{ss}) x_s,$$

daher

$$\sum_{i \neq s} p_{si} \geq \sum_{i \neq s} p_{si} \frac{|x_i|}{|x_s|} \geq |\lambda - p_{ss}|.$$

Also

$$\sum_{i \neq s} p_{si} \geq |\lambda - p_{ss}| \geq |\lambda| - p_{ss}. \quad (*)$$

Wir zeigen nun, daß aus  $|\lambda| = 1$  folgt  $\lambda = 1$ , womit der Satz bewiesen ist.

Sei also  $|\lambda| = 1$ . Dann gilt in Ungl. (\*) überall das Gleichheitszeichen. Nun ist mit

$$\lambda = \lambda_1 + i \lambda_2, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned} |\lambda - p_{ss}|^2 &= (\lambda_1 - p_{ss})^2 + \lambda_2^2 = \\ &= \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + p_{ss}^2 - 2 p_{ss} \lambda_1, \end{aligned} \quad (a)$$

$$(|\lambda| - p_{ss})^2 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + p_{ss}^2 - 2 p_{ss} \sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2} \quad (b)$$

Aus der Gleichheit von Ausdruck (a) und (b) folgt wegen  $p_{ss} > 0$  sofort

$$\lambda_2 = 0, \quad \lambda_1 = 1.$$

Unsere Modelle erfüllen die Anforderungen des Satzes . Nach /16 / konvergiert die Folge

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P^k = G. \quad (49)$$

Die Zeilen der Matrix  $G$  sind alle gleich und bestehen aus den Eigenvektoren zum Eigenwert 1 .

Dies ist auch dann wahr, wenn die Matrix  $B$  folgenderweise definiert ist:

$$B := A + E \quad (50)$$

$$b_{ij} \geq 0 \quad \forall i \neq j \quad (51)$$

$$b_{jj} = 1 - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n a_{ij} \quad (52)$$

Die Folge

$$\lim_{K \rightarrow \infty} B^K = K \quad (53)$$

ist ebenso konvergent, die Spalten von  $K$  bestehen aus den Eigenvektoren zum Eigenwert  $1$ .

Es ist leicht einzusehen, daß die Matrizen  $B$  und  $A$  ein gemeinsames Eigenvektorsystem besitzen, da zwischen den Eigenwerten von  $A$  und  $B$  folgender Zusammenhang besteht.

Das Eigenvektorproblem für  $A$  lautet

$$\det |A - \lambda E| = 0 \quad (54)$$

Aus der Identität (50) folgt

$$\det |B - E - \lambda E| = \det |B - (1-\lambda) E| = \det |A - \lambda E| = 0 \quad (55)$$

Wenn die Matrix  $A$  das Eigenwertspektrum  $\lambda_i$   $i = 1, \dots, n$  besitzt, besitzt  $B$  das Eigenwertspektrum  $1 - \lambda_i$   $i = 1, \dots, n$ . Die Eigenvektoren von  $A$  und  $B$  sind gleich, dies folgt aus (55). Speziell zum Null-Eigenwert von  $A$  gehört der  $1$  Eigenwert von  $B$ , bei gleichen Eigenvektoren. Dies bedeutet, daß der Grenzwert  $K$  aus Eigenvektoren zum Eigenwert  $0$  von  $A$  besteht. Ein konkretes Beispiel: Das Modell von Craig hat die folgende Matrix  $B$  :

.7696970	.0250000	.1666667	.0000000
.0303030	.9750000	.0000000	.0000000
.2000000	.0000000	.6720430	.0033333
.0000000	.0000000	.1612903	.9666667

$B^{512} =$

.0162699	.0162803	.0162680	.0162658
.0197337	.0197821	.0197248	.0197147
.0195216	.0195275	.0195205	.0195193
.9444692	.9443986	.9444832	.9445003

$B^{1024} =$

.0162661	.0162660	.0162661	.0162662
.0197164	.0197163	.0197164	.0197165
.0195194	.0195193	.0195194	.0195195
.9444922	.9444867	.9444941	.9444975

Der exakte Eigenvektor nach 2-2

0.0162663

0.0197168

0.0195196

0.9444973

Die Konvergenzgeschwindigkeit ist gut.

Leider treten bei  $7 \times 7$ -Matrizen (Modell Machta) / 6 / schon numerische Instabilitäten auf. Der Grund dieser Instabilität ist noch zu klären.

Diese Potenzierungsmethode wäre ein Methode, um den Eigenvektor zum Null-Eigenwert von  $A$  zu bestimmen. Dieser Eigenvektor spielt eine tragende Rolle bei der Ähnlichkeitstransformation von  $A$ . Diese Ähnlichkeitstransformation symmetrisiert  $A$ , so daß die anderen Eigenwerte und Eigenvektoren mit Standardsubroutinen bestimmt werden können.

Beim Modell von Craig und Rakovski, bei dem  $A$  tridiagonal ist, kann der Eigenvektor zum Eigenwert 0 explizite mit der Methode der sukzessiven Elimination ermittelt werden:

$$x = c \left( 1, \frac{a_{21}}{a_{12}}, \dots, \frac{a_{i, i-1} \cdot a_{i-1, i-2} \cdot \dots \cdot a_{21}}{a_{i-1, i} \cdot a_{i-2, i-1} \cdot \dots \cdot a_{12}}, \dots \right. \\ \left. \dots, \frac{a_{n, n-1} \cdot a_{n-1, n-2} \cdot \dots \cdot a_{21}}{a_{n-1, n} \cdot a_{n-2, n-1} \cdot \dots \cdot a_{12}} \right) \quad (56)$$

mit  $c > 0$  .

Für das Modell von Craig ( $n=4$ ) geht (56) konkret wie folgt aus:

$$x = c \left( 1, \frac{a_{21}}{a_{12}}, \frac{a_{32} \cdot a_{21}}{a_{23} \cdot a_{12}}, \frac{a_{43} \cdot a_{32} \cdot a_{21}}{a_{34} \cdot a_{23} \cdot a_{12}} \right) . \quad (57)$$

Es gibt noch eine Methode, diesen Eigenvektor zu ermitteln. Man läßt einfach das lineare Gleichungssystem

$$(A - \lambda E) = 0, \quad \lambda = 0 \quad (58)$$

für  $x$  auf. Der Defekt ist 1, daher der Lösungsvektor ein eindimensionaler Unterraum.

Vermutung: Wenn (58) mit dem Gauß'schen Eliminationsverfahren auf obere Dreiecksform gebracht wird, erscheint die einzige Null (defekt) in der letzten Position.

Begründung der Vermutung: Wenn wir entsprechend den Gauß'schen Verfahren die Matrix von oben nach unten auf Dreiecksform bringen, stoßen wir in der letzten Zeile auf die linear abhängige Zeile.

Es gibt noch eine Methode den Eigenvektor zum Eigenwert 0 zu bestimmen /19/, /20/ .

Die Methode funktioniert dann, wenn 0 einfacher Eigenwert ist. Dann sind die Komponenten des Eigenvektors die Determinanten der Hauptminoren. Dies ist eine Folge der speziellen Eigenschaften der zu A assoziierten Matrix. Rechentechnisch bedeutet dies die Ausrechnung von n Determinanten, am zweckmäßigsten mit einer Gauß'schen Elimination. Ist die vorhin erwähnte Vermutung beweisbar, kommt man mit einer einzigen (frühzeitig abgebrochenen) Elimination aus. Dieser Weg wäre dann zu bevorzugen.

Behauptung: Die Lösung von (1) nach /18/ hat folgende Form:

$$y(t) = \exp(A t) y(t_0) \quad , \quad (60)$$

wobei  $y(t_0)$  der Vektor der Anfangsbedingungen ist.

Wenn eine Zeiteinheit von  $t_0$  beginnend verstreicht, sieht (60) folgenderweise aus:

$$y(1) = \exp(A) y(t_0) := D y(t_0) \quad . \quad (61)$$

Wenn zwei Zeiteinheiten verstrichen sind,

$$y(2) = \exp(2 A) y(t_0) = D^2 y(t_0) \quad . \quad (62)$$

Es wird behauptet, daß  $D$  eine stochastische Matrix ist, und nach  $n$  Zeiteinheiten die Lösung folgende Form hat:

$$y(n) = D^n y(t_0) \quad . \quad (63)$$

Nach (50) gilt

$$A = B - E \quad (64)$$

wobei  $B$  eine stochastische Matrix ist.

Hilfssatz: Wenn  $A$  folgende Eigenschaft hat (die Spaltensumme ist Null)

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} = 0 \quad \forall j \quad (65)$$

hat  $A^v$   $v \in \mathbb{N}$  auch dieselbe Eigenschaft.

Wählen wir einen willkürlichen Vektor  $x$  .

Rechnen wir den Vektor  $y$  aus

$$A x = y \quad (66)$$

und dessen Komponentensumme

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 1}}^n a_{ji} x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n + \\ &+ a_{21} x_1 - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n a_{j2} x_2 + \dots + a_{2n} x_n + \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &+ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + \dots - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq n}}^n a_{jn} x_n \end{aligned}$$

Wenn wir die zeilenweise geordnete Summe nach den Spalten umformen, erhalten wir wegen (65)

$$\sum_{i=1}^n y_i = 0 \quad (67)$$

Wenn wir (66) mit  $A$  multiplizieren

$$A^2 x = A y = z \quad (68)$$

ist wegen (67)

$$\sum_{i=1}^n z_i = 0 \quad (69)$$

Aus (68) und (69) folgt, daß  $A$  und  $A^2$  dieselbe Eigenschaft (65) haben, d.h. wenn  $A$  die Spaltensummen Null hat, hat  $A^2$  auch die Eigenschaft, daß die Spaltensumme Null ist.

Es ist leicht durch Induktion einzusehen, daß  $A^n$  auch diese Eigenschaft hat. Damit ist der Hilfssatz a bewiesen. Wir schreiben jetzt die in (61) eingeführte Matrix  $D$  in Form einer Exponentialentwicklung:

$$D = \exp A = E + \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v!} \cdot A^v . \quad (70)$$

Der zweite Summand dieser Form hat die Eigenschaft, daß die Spaltensumme Null ist, da die unendliche Summe aus Matrizen besteht, die diese Eigenschaft haben.

Wenn wir die Einheitsmatrix dazunehmen, erhalten wir also die folgende Eigenschaft von  $D$  :

$$\sum_{i=1}^n d_{ij} = 1 \quad \forall j . \quad (71)$$

Nun gilt aber für zwei Matrizen  $N'$ ,  $N''$  mit der Eigenschaft

$$N' N'' = N'' N'$$

die Relation

$$\exp (N' + N'') = \exp N' \exp N'' ,$$

somit folgt

$$D = \exp A = \exp (B - E) = (\exp B) (\exp (-E)) . \quad (72)$$

Trivialerweise gilt

$$(\exp B)_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \quad (73)$$

außerdem

$$\exp(-E) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-1)^v}{v!} E^v, \quad \text{d.h. } (\exp(-E))_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \quad (74)$$

somit folgt, wenn wir (73) und (74) in (72) einsetzen

$$(D)_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j \quad . \quad (75)$$

Die Eigenschaften (71) und (75) von  $D$  bedeuten, daß  $D$  die Eigenschaften einer transportierten stochastischen Matrix hat.

Behauptung: Die Folge

$$\lim_{K \rightarrow \infty} D^K =: M \quad (76)$$

konvergiert, und daß die Spalten von  $M$  die Gleichgewichtsinventare sind.

Ist  $\lambda \neq 1$  nämlich ein Eigenwert von  $B$ , dann ist

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 1 \Rightarrow |e^{\lambda-1}| < 1 \quad .$$

Seien  $\lambda_i, 1 \leq i \leq n$  die Eigenwerte von  $B$ , dann sind  $e^{\lambda_i-1}$   
 $1 \leq i \leq n$  die Eigenwerte von  $D$  .

Also gilt  $\forall i$

$$e^{\lambda_i-1} = 1$$

oder

$$|e^{\lambda_i - 1}| < 1 .$$

Also konvergiert  $D^k$  zwar nicht gegen 0 aber wegen  $e^{\lambda_i - 1} = 1$  für mindestens ein  $i$  .

Da  $B$  und  $D$  das gleiche Rechts- und Linkseigenvektorsystem haben, ist (vgl. /16/)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} D^k = \lim_{k \rightarrow \infty} B^k$$

falls  $\lim_{k \rightarrow \infty} B^k$  existiert .

Damit ist die Behauptung bewiesen.

Ein numerisches Beispiel für ein willkürliches Boxen-Modell haben wir mit der Lösungsformel (63) durchgerechnet und mit der Lösung eines Analogrechners verglichen. Da die Zeitachsen nicht geeicht sind, sind die beiden nacheinander aufgeführten Lösungen nur mit einer affinen Transformation der Zeitachse in Deckung zu bringen. Die Ordinatenwerte sind unverzerrt, deshalb können charakteristische Punkte (Schnittpunkte, Extrema) miteinander gut verglichen werden. Der Vergleich ergibt eine gute Übereinstimmung. Die Lösung mit der stochastischen Matrix  $D$  hat gegenüber klassischen Methoden /7/ grundlegende Vorteile. Da Eigenschaft A im allgemeinen nicht gewährleistet ist, können (aber müssen nicht) komplexe Eigenwerte auftreten. Die

numerische Bestimmung von komplexen Eigenwerten ist im allgemeinen schwierig. Deshalb ist (63) zu bevorzugen.

Wir wollen noch eine Eigenschaft der Matrix  $D$  (61) erwähnen. Dazu schreiben wir  $D$  entsprechend (64) in der Form

$$D = \exp A = \exp(B - E) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} (B - E)^v \quad (78)$$

Wie bewiesen wurde, ist  $D$  stochastisch und die Potenzen von  $D$  multipliziert mit  $y(t_0)$  ergeben eine Treppenkurve, deren Sprungpunkte exakt auf der Lösungskurve liegen. Man kann leicht beweisen, daß die bei der Potenz  $n$  abgebrochene Reihe (78) auch eine stochastische Matrix ergibt.

$$D_{(n)} := \sum_{v=0}^n \frac{1}{v!} (B - E)^v \quad (79)$$

Wenn wir die  $(B - E)^v$  Ausdrücke von  $v = 0$  bis  $v = n$  nach dem Binomialsatz entwickeln, nach (79) aufaddieren und nach den Potenzen von  $B$  ordnen (dies ist eine Umordnung des Pascal'schen Dreiecks), erhalten wir für die Koeffizienten mit progressiv steigenden Potenzen von  $B$  folgende Ausdrücke:

Für  $E (= B^0)$

$$\frac{1}{0!} \binom{0}{0} - \frac{1}{1!} \binom{1}{1} + \frac{1}{2!} \binom{2}{2} - \frac{1}{3!} \binom{3}{3} + \dots + (-1)^i \frac{1}{i!} \binom{i}{i} + \dots$$

$$\dots + (-1)^n \frac{1}{n!} \binom{n}{n},$$

für  $B$

$$\frac{1}{1!} \binom{1}{0} - \frac{1}{2!} \binom{2}{1} + \frac{1}{3!} \binom{3}{2} - \frac{1}{4!} \binom{4}{3} + \dots + (-1)^i \frac{1}{(i+1)!} \binom{i+1}{i} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{n-1} \frac{1}{n!} \binom{n}{n-1},$$

für  $B^2$

$$\frac{1}{2!} \binom{2}{0} - \frac{1}{3!} \binom{3}{1} + \frac{1}{4!} \binom{4}{2} - \frac{1}{5!} \binom{5}{3} + \dots + (-1)^i \frac{1}{(i+2)!} \binom{i+2}{i} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{n-2} \frac{1}{n!} \binom{n}{n-2},$$

für  $B^3$

$$\frac{1}{3!} \binom{3}{0} - \frac{1}{4!} \binom{4}{1} + \frac{1}{5!} \binom{5}{2} - \frac{1}{6!} \binom{6}{3} + \dots + (-1)^i \frac{1}{(i+3)!} \binom{i+3}{i} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{n-3} \frac{1}{n!} \binom{n}{n-3},$$

für  $B^4$

$$\frac{1}{4!} \binom{4}{0} - \frac{1}{5!} \binom{5}{1} + \frac{1}{6!} \binom{6}{2} - \frac{1}{7!} \binom{7}{3} + \dots + (-1)^i \frac{1}{(i+4)!} \binom{i+4}{i} + \dots$$
$$\dots + (-1)^{n-4} \frac{1}{n!} \binom{n}{n-4} ,$$

für  $B^j$

$$\frac{1}{j!} \binom{j}{0} - \frac{1}{(j+1)!} \binom{j+1}{1} + \frac{1}{(j+2)!} \binom{j+2}{2} - \frac{1}{(j+3)!} \binom{j+3}{3} + \dots$$
$$\dots + (-1)^{n-j} \frac{1}{n!} \binom{n}{n-j} ,$$

usw. bis

$B^n$  dessen Koeffizient

$$\frac{1}{n!} \binom{n}{0}$$

ist .

Wenn wir die Binomialkoeffizienten nach dem Binomialsatz entwickeln erhalten wir

für  $E$

$$\frac{1}{0!} \cdot \frac{0!}{(0-0)!0!} - \frac{1}{1!} \cdot \frac{1}{(1-1)!1!} + \frac{1}{2!} \cdot \frac{2!}{(2-2)!2!} - \frac{1}{3!} \cdot \frac{3!}{(3-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^i \frac{1}{i!} \cdot \frac{i!}{(i-i)!i!} + \dots + (-1)^n \frac{1}{n!} \cdot \frac{n!}{(n-n)!n!} =$$

$$1 - 1 + \frac{1}{2!} - \frac{1}{3!} + \dots + (-1)^i \frac{1}{i!} + \dots + (-1)^n \frac{1}{n!} ,$$

für B

$$\frac{1}{1!} \cdot \frac{1!}{(1-0)!0!} - \frac{1}{2!} \cdot \frac{2!}{(2-1)!1!} + \frac{1}{3!} \cdot \frac{3!}{(3-2)!2!} - \frac{1}{4!} \cdot \frac{4!}{(4-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^i \frac{1}{(i+1)!} \cdot \frac{(i+1)!}{(i+1-i)!i!} + \dots + (-1)^{n-1} \frac{1}{n!} \cdot \frac{n!}{(n-n+1)!(n-1)!} =$$

$$1 - 1 + \frac{1}{2!} - \frac{1}{3!} + \dots + (-1)^i \frac{1}{i!} + \dots + (-1)^{n-1} \frac{1}{(n-1)!} ,$$

für B<sup>2</sup>

$$\frac{1}{2!} \cdot \frac{2!}{(2-0)!0!} - \frac{1}{3!} \cdot \frac{3!}{(3-1)!1!} + \frac{1}{4!} \cdot \frac{4!}{(4-2)!2!} - \frac{1}{5!} \cdot \frac{5!}{(5-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^i \frac{1}{(i+2)!} \cdot \frac{(i+2)!}{(i+2-i)!i!} + \dots + (-1)^{n-2} \frac{1}{n!} \cdot \frac{n!}{(n-n+2)!(n-2)!} =$$

$$\frac{1}{2!} - \frac{1}{2!} + \frac{1}{2!2!} - \frac{1}{2!3!} + \dots + (-1)^i \frac{1}{2!i!} + \dots + (-1)^{n-2} \frac{1}{2!(n-2)!} ,$$

für  $B^3$

$$\frac{1}{3!} \cdot \frac{3!}{(3-0)!0!} - \frac{1}{4!} \cdot \frac{4!}{(4-1)!1!} + \frac{1}{5!} \cdot \frac{5!}{(5-2)!2!} - \frac{1}{6!} \cdot \frac{6!}{(6-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^i \frac{1}{(i+3)!} \cdot \frac{(i+3)!}{(i+3-i)!i!} + \dots + (-1)^{n-3} \frac{1}{n!} \frac{n!}{(n-n+3)(n-3)!} =$$

$$\frac{1}{3!} - \frac{1}{3!} + \frac{1}{3!2!} - \frac{1}{3!3!} + \dots + (-1)^i \frac{1}{3!i!} + \dots + (-1)^{n-3} \frac{1}{3!(n-3)!} ,$$

für  $B^4$

$$\frac{1}{4!} \cdot \frac{4!}{(4-0)!0!} - \frac{1}{5!} \frac{5!}{(5-1)!1!} + \frac{1}{6!} \frac{6!}{(6-2)!2!} - \frac{1}{7!} \frac{7!}{(7-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^i \frac{1}{(i+4)!} \frac{(i+4)!}{(i+4-i)!i!} + \dots + (-1)^{n-4} \frac{1}{n!} \frac{n!}{(n-4-n)!(n-4)!} =$$

$$\frac{1}{4!} - \frac{1}{4!} + \frac{1}{4!2!} - \frac{1}{4!3!} + \dots + (-1)^i \frac{1}{4!i!} + \dots + (-1)^{n-4} \frac{1}{4!(n-4)!} ,$$

für  $B^j$

$$\frac{1}{j!} \frac{j!}{(j-0)!0!} - \frac{1}{(j+1)!} \frac{(j+1)!}{(j+1-1)!1!} + \frac{1}{(j+2)!} \frac{(j+2)!}{(j+2-2)!2!} - \frac{1}{(j+3)!} \frac{(j+3)!}{(j+3-3)!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{n-j} \frac{1}{n!} \frac{n!}{(n-n+j)!(n-j)!} = \frac{1}{j!} - \frac{1}{j!} + \frac{1}{j!2!} - \frac{1}{j!3!} + \dots$$

$$\dots + (-1)^{n-j} \frac{1}{j!(n-j)!} ,$$

usw. bis  $B^n$

Behauptung: Alle Potenzen von  $B^j$   $j = 0, 1, \dots, n$  haben einen positiven Koeffizient. Bei den Koeffizienten heben die ersten beiden Glieder einander auf, und das erste signifikante Glied immer positiv und die Zahlensequenz alternierend ist. Außerdem gilt, wie es leicht einzusehen ist

$$|u_1| > |u_2| > , \dots , > |u_s| > |u_{s+1}| \quad ; \quad (80)$$

indem  $u_1$  das erste signifikante Glied ist. Dann existiert immer eine Klammersetzung, so daß in jeder Klammer eine positive Zahl steht

$$(u_1 - u_2) + (u_3 - u_4) + \dots + (u_{s-2} - u_{s-1}) + \begin{cases} \delta_{sk} u_s \\ \delta_{s+1,k} (u_s - u_{s+1}) \end{cases} \quad (81)$$

$k$  ist entweder  $s$  oder  $s+1$ , je nachdem sich die Zahlensequenz endet.

Damit ist die Behauptung bewiesen. □

Ansonsten ist (81) ein Schnitt von einer Leibniz'schen Reihe, wenn man die Bedingung (80) berücksichtigt.

Mit der eben bewiesenen Behauptung sieht man aus (79), daß  $D_{(n)}$  eine stochastische Matrix ist. Es wird von der Einheitsmatrix  $E$  (die trivialerweise stochastisch ist) und von  $B$  und deren Potenzen (die auch stochastisch sind) eine Summe mit nur positiven Koeffizienten gebildet. Außerdem ist (79) ein Schnitt von der unendlichen Summe (78). Deshalb bleiben die Eigenschaften (51), (52) erhalten. Das heißt,  $D_{(n)}$  ist stochastisch, und ist eine Approximation von (78) im Taylor'schen Sinne. Diese Tatsache ist bei numerischen Rechnungen von ausschlaggebender Bedeutung. In der Rechenmaschine kann man  $D_{(n)}$  als Schnitt von (78) mit genügender Genauigkeit darstellen.

Der Ausdruck für (70)

$$\frac{1}{v!} A^v \quad (82)$$

wird in den Fakultäten kumulativ gebildet, und bei der IBM 370 Rechenanlage bei doppelter Genauigkeit bis zu einer Größenordnung von etwa  $10^{-15}$  addiert und mit einer Abfrage automatisch abgebrochen. So wurden die Ergebnisse auf Abb. 1 gewonnen.

(79) hat dasselbe Grenzverhalten wie (78)

$$\lim_{K \rightarrow \infty} D^K = \lim_{K \rightarrow \infty} D_{(n)}^K := M \quad (83)$$

Dies teilen wir ohne Beweis mit.

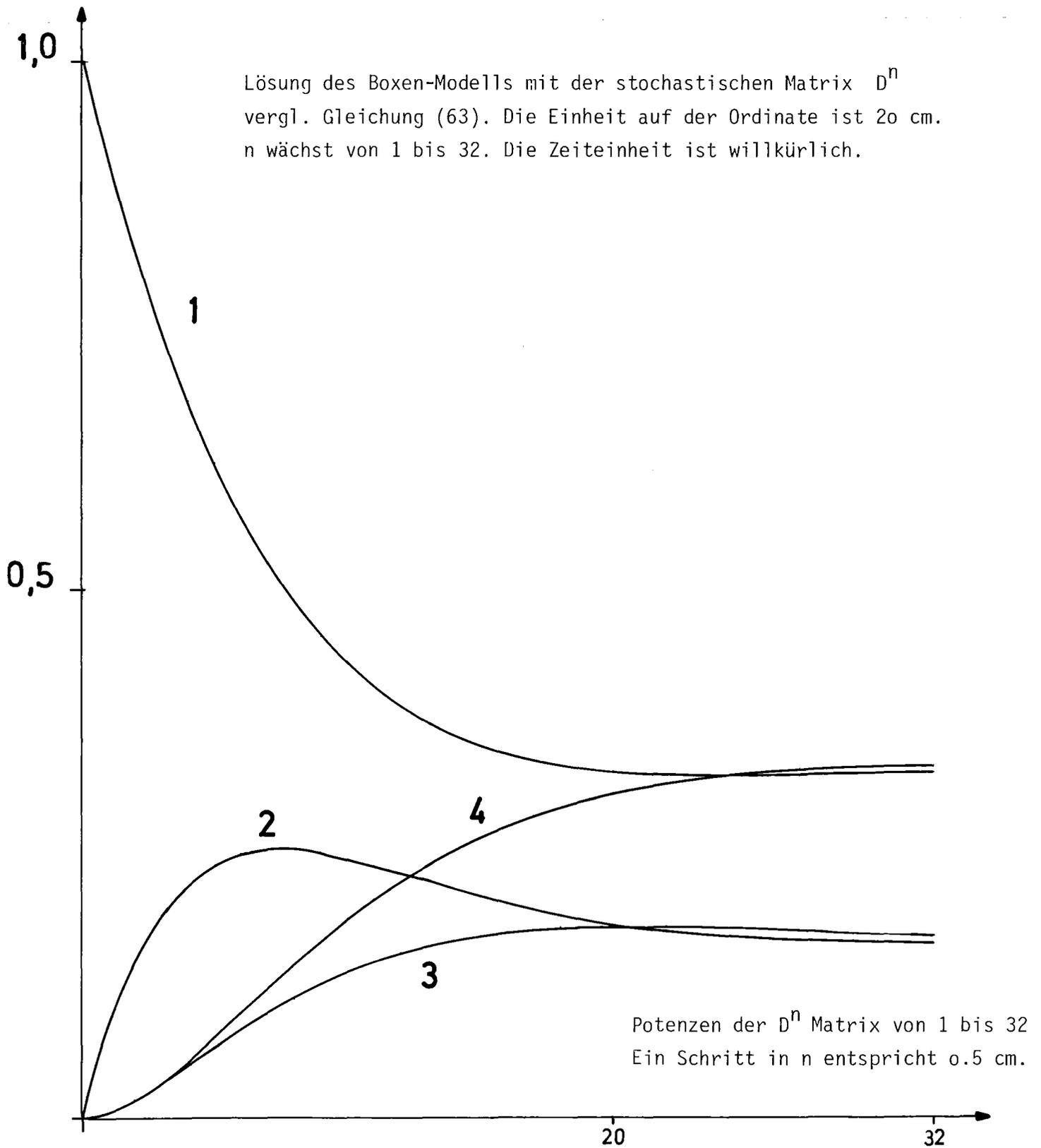
Noch eine letzte Bemerkung:

Wenn wir das Zeitverhalten des Systems ganz grob abschätzen wollen, können wir die Reihe (79) bei der ersten sinnvollen Näherung, bei  $v = 1$  abbrechen.

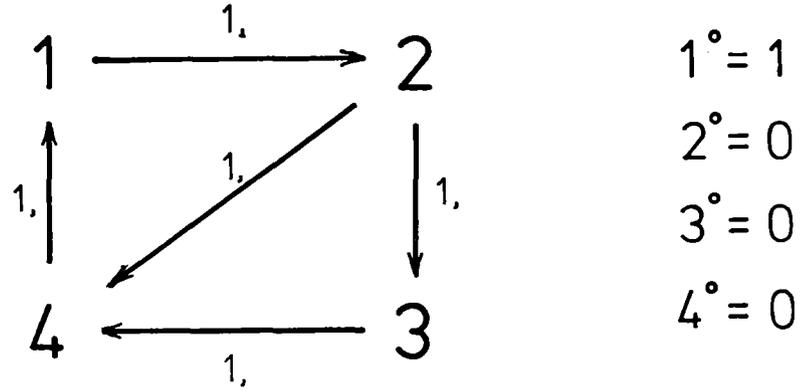
$$D_{(1)} = E + B - E = B \quad .$$

Mit dieser Näherung wurde schon in Ref. /15/ gearbeitet.

# ABB. 1

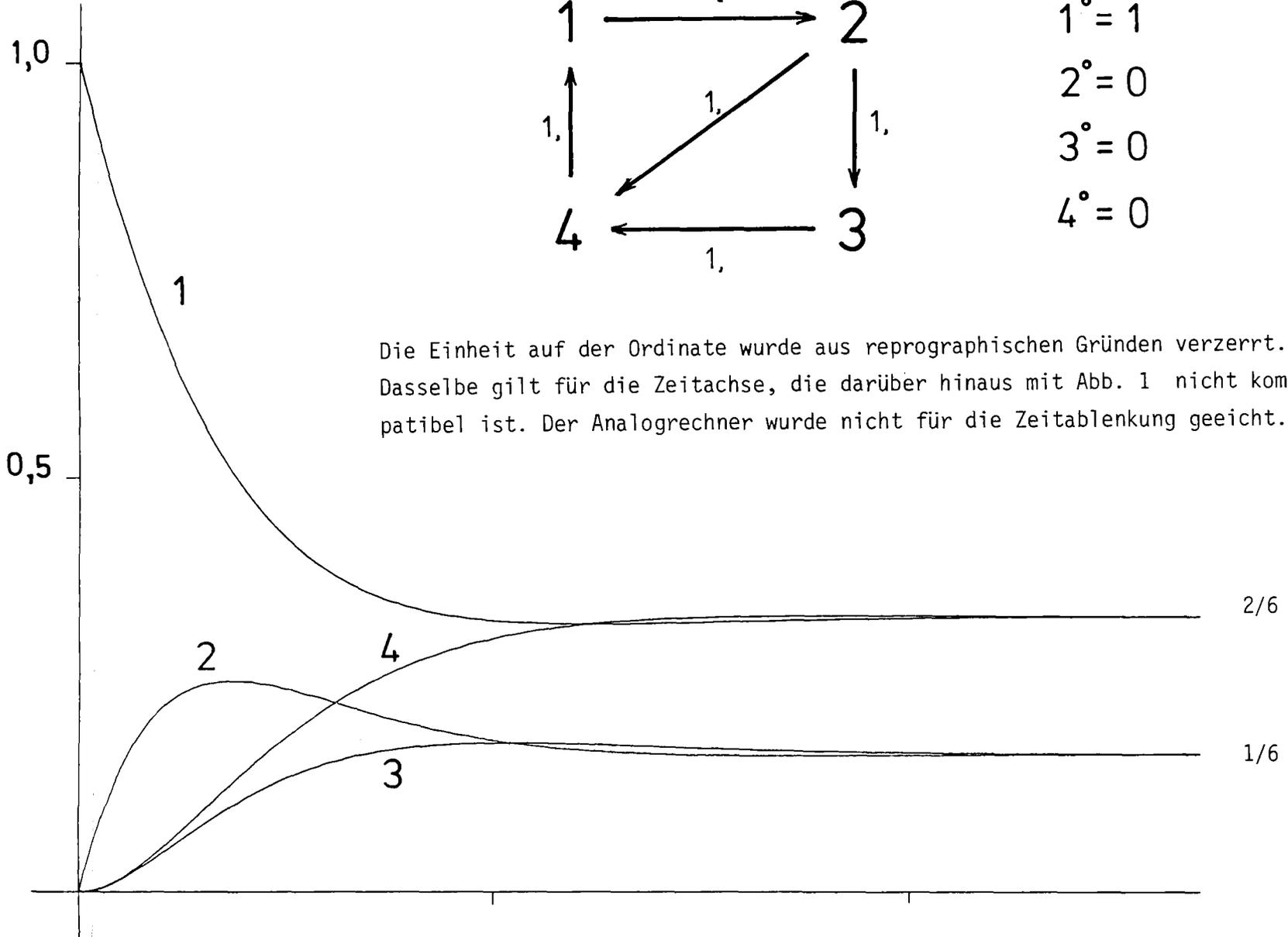


Lösung des Boxen-Modells auf dem Analogrechner



Die Einheit auf der Ordinate wurde aus reprographischen Gründen verzerrt. Dasselbe gilt für die Zeitachse, die darüber hinaus mit Abb. 1 nicht kompatibel ist. Der Analogrechner wurde nicht für die Zeitablenkung geeicht.

ABB. 2



## Literatur

- /1/ Haase, R. : Thermodynamik der irreversiblen Prozesse  
Steinkopff, Darmstadt 1963.
- /2/ Meixner, J. : Beziehungen zwischen Netzwerktheorie und  
Thermodynamik, Arbeitsgem. f. Forschung des Landes Nord-  
rhein-Westfalen, Heft 181, 1968.
- /3/ Meixner, J. : Neuere Entwicklungen der Thermodynamik.  
Arbeitsgem. f. Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen,  
Heft 72, 1959.
- /4/ Craig, H. : The Natural Distribution of Radiocarbon and the  
Exchange Time of CO<sub>2</sub> Between Atmosphere and Sea.  
Tellus, 9, (1957), 1-17.
- /5/ Rakowski, A. : Kinetik der Folgereaktionen erster Ordnung,  
Zeitschrift f. physik. Chemie, 57,(1906), 321-340.
- /6/ Machta, L. : The Role of the Oceans and Biosphere in the Carbon  
Dioxide Cycle, Proceedings of the 20th Nobel Symposium,  
Almqvist & Wiksell, Stockholm, 1971.
- /7/ Stepanow, W., W. : Lehrbuch der Differentialgleichungen,  
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1963.
- /8/ Wei, J., Prater, C.D. : Advances in Catalysis, Vol. XIII,  
Academic Press, New York - London, 1962.
- /9/ Polya, G., Szegö, G. : Aufgaben und Lehrsätze aus der  
Analysis, Springer Verlag, 1964.
- /10/ Jost, W. : Über den Ablauf zusammengesetzter chemischer Reaktionen -  
Systeme von Reaktionen I. Ordnung, Z. Naturforschung, 2a, (1947),  
159 - 163.
- /11/ Eriksson, E., Welander, P. : On a Mathematical Model of the Carbon  
Cycle in Nature, Tellus, 8, (1956), 155-175 .

- /12/ Tetelbaum, I. M. : Elektrische Analogierechenverfahren,  
VEB Deutscher Verlag Technik, Berlin 1963.
- /13/ Fenyi, S., Frick, H. : Chemische Reaktionen und elektrische  
Netzwerke, KFK Bericht 2484 Karlsruhe 1978.
- /14/ Zimen, K. E. : Persönliche Mitteilung an W. Häfele, 07.12.1975.
- /15/ Avenhaus, R., Hartmann G. : The Carbon Cycle of the Earth -  
A Material Balance Approach, IIASA Research Report RR-75-45,  
Dec. 1975.
- /16/ Debreu, G., Herstein, I. : Nonnegative Square Matrices,  
Econometrica, 21, (1953), 597-607.
- /17/ Gantmacher, F.R. : Matrizenrechnung, Bd. I -II, VEB Deutscher  
Verlag der Wissenschaften, Berlin 1971.
- /18/ Grauert, H., Fischer, W. : Differential und Integralrechnung, I -II,  
Springer, Berlin 1968.
- /19/ Kohlmaier, G.H., Fischbach, U., Kratz, G., Sire, E.-O.:  
A Non-Linear Interaction Model Between Land Biota and the Atmosphere.  
Presented at the IIASA-Workshop on Carbon Dioxide, Climate and Society,  
held at Laxenburg 1978, to be published.
- /20/ Aschinger, G.A.: Stabilitätsaussagen über Klassen von Matrizen mit  
verschiedenen Zeilensummen,  
Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems Nr. 113, Springer  
1975
- /21/ Nordhaus, W.D.: Can we Control Carbon Dioxide?,  
IIASA, Schloß Laxenburg, 1975