

На правах рукописи

ЛАНГЕ Андрей Михайлович

МЕТОДЫ РАСЧЕТА И МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИСКРЕТНЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ
С ПАРНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2007

Работа выполнена в Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Калинкин А.В.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Морозов А.Н.
кандидат физико-математических наук
Чаплыгин В.В.

Ведущая организация: Математический институт
имени В.А. Стеклова РАН

Защита диссертации состоится «___» _____ 2007 года
в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при
Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Ба-
умана по адресу: 105005 Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Ба-
умана.

Автореферат разослан «___» _____ 2007 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
д. ф.-м. н., профессор

И.К. Волков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одним из направлений математического моделирования является исследование дискретных систем со стохастическим характером эволюции, определяемым случайными взаимодействиями элементов системы между собой и с окружающей средой. Такие стохастические системы, различные по природе, происхождению и масштабам составляющих элементов, характеризуются общностью математических моделей, основанных на аппарате теории вероятностей и теории случайных процессов. Вероятностные модели используются для изучения таких физических явлений, как процессы с превращениями и взаимодействиями молекул в физической и химической кинетике, флуктуации числа частиц в космических лучах, процессы развития популяций в биологии и распространения эпидемий в медицине, потоки поступления и обслуживания заявок в теории массового обслуживания, отказы элементов в теории надежности технических систем и др.

Первоначально системы с взаимодействием исследовались при детерминистском подходе, предполагающем предопределенность поведения макроскопических характеристик системы (давление, объем, концентрация реагентов и т. д.) начальными данными. Вероятностные модели систем с взаимодействием развивались при микроскопическом подходе, вызванным необходимостью адекватного описания случайных флуктуаций числа частиц в системе. В литературе по математическому моделированию таких систем понятие «частица» понимается в широком смысле и может означать молекулу химического реагента, особь или индивидуум биологической популяции, элемент системы массового обслуживания и т. п.

В диссертационной работе рассматриваются стохастические модели систем с взаимодействиями в виде марковских процессов с дискретным множеством состояний N^n , $N = \{0, 1, 2, \dots\}$, и непрерывным временем t , $t \in [0, \infty)$. Такие марковские процессы задаются плотностями переходных вероятностей и начальным распределением. Состояние марковского процесса $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in N^n$ означает наличие в системе совокупности частиц $S_\alpha = \alpha_1 T_1 + \dots + \alpha_n T_n$, состоящей из α_1 частиц типа T_1 , \dots , α_n частиц типа T_n . Переход случайного процесса в другое состояние — результат взаимодействия одного из комплексов частиц S_{ε^i} , $i = 1, \dots, l$. Продукт взаимодействия комплекса частиц не зависит от других частиц в системе; $\varepsilon^1, \dots, \varepsilon^l \in N^n$ задают схему взаимодействий (кинетическую схему). Такие дискретные марковские модели вводились при описании и исследовании кинетики ядерных и биохимических реакций, динамики взаимодействующих популяций в системах с ограниченными ресурсами, процессов борьбы за существование и в других прило-

жениях. основополагающий вклад в разработку и анализ стохастических моделей систем взаимодействующих частиц внесли отечественные ученые М.А. Леонтович ¹⁾, Н.Н. Боголюбов, А.Н. Колмогоров, Б.А. Севастьянов ²⁾, Р.Л. Добрушин, а также зарубежные ученые Т.Е. Харрис, И. Пригожин ³⁾, Н.Г. Ван Кампен ⁴⁾, Ф. Поллет, Г. Волян и др.

Точные аналитические методы исследования марковских моделей с взаимодействием на N^n основаны на рассмотрении первого и второго уравнений Колмогорова — уравнений в частных производных для производящих функций переходных вероятностей. Однако число стохастических моделей, поддающихся точному анализу, невелико. К исследуемым в диссертации моделям с парными взаимодействиями частиц, при определенных условиях, накладываемых на параметры модели, применимы аналитические методы. Получение явных выражений для производящих функций дает возможность вывода тех или иных асимптотических свойств и предельных теорем для вероятностных распределений.

Альтернативой являются численные методы Монте-Карло, позволяющие моделировать дискретные системы с произвольными кинетическими схемами, но часто требующие больших вычислительных затрат для обеспечения приемлемой точности расчетов. Применение методов статистического моделирования позволяет выявить закономерности для марковских систем более общего вида, исследование которых аналитическими методами затруднительно ⁵⁾.

Цель работы — получение асимптотических оценок и исследование характера предельных распределений в дискретных моделях с парными взаимодействиями: исследование стационарного распределения в открытой системе с внешним источником частиц; исследование финального распределения в системе с выходом конечного продукта.

¹⁾Леонтович М.А. Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1935. — Т. 5, № 3. — С. 211–230.

²⁾Севастьянов Б.А. Ветвящиеся процессы. — М.: Наука, 1971. — 436 с.

³⁾Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979. — 512 с.

⁴⁾Ван Кампен Н.Г. Стохастические процессы в физике и химии. — М.: Высшая школа, 1990. — 376 с.

⁵⁾Пичугин Б.Ю., Перцев Н.В. Статистическое моделирование популяций взаимодействующих частиц с произвольным распределением времени жизни // Матем. структуры и моделирование. — 2001. — Вып. 7. — С. 67–78.

Основные результаты, выносимые на защиту:

1. Точные решения стационарного второго уравнения в модели открытой системы с внешним источником и парными взаимодействиями частиц одного типа; асимптотические оценки для математического ожидания, дисперсии и предельные теоремы об асимптотической нормальности стационарного распределения при большой интенсивности поступления новых частиц.

2. Интегральные представления решения стационарного первого уравнения в модели с парными взаимодействиями и образованием финального продукта; асимптотические оценки для математического ожидания, дисперсии и предельная теорема об асимптотической нормальности финального распределения при большом начальном числе частиц нефинального типа.

3. Описание алгоритма численного моделирования дискретных марковских систем с взаимодействием, представляемых кинетическими схемами общего вида, и результаты вычислительных экспериментов для моделей открытых систем и моделей систем с частицами финального типа.

Научная новизна. Исследуемые вероятностные модели являются более общими, чем часто рассматриваемые в приложениях марковские процессы рождения и гибели.

Установленный факт асимптотической нормальности стационарного распределения является новым для марковских моделей открытых систем с парными взаимодействиями.

Модель системы с парными взаимодействиями и образованием финального продукта рассмотрена при наличии превращений отдельных частиц нефинального типа.

Алгоритм статистического моделирования дискретных марковских систем с взаимодействием сформулирован в терминах общей кинетической схемы при произвольном распределении числа новых частиц для каждого комплекса взаимодействия.

Методы исследования. Использовались методы теории вероятностей, теории марковских процессов, теории обыкновенных дифференциальных уравнений, асимптотические методы анализа, специальные функции. Применялись численные методы моделирования марковских процессов, основанные на методе статистических испытаний Монте-Карло. Использовались средства программирования на ЭВМ (системы Matlab, C++).

Теоретическая и практическая ценность. Установленные асимптотические свойства стационарных и финальных распределений являются фундаментальной основой для методов расчета дискретных марковских

систем. Полученные предельные теоремы дают, в частности, теоретическое обоснование для используемых в прикладных работах предположений о нормальности отклонений экспериментальных данных от средних значений. Примеры реальных физических, химических, экологических и технических систем с конкретными кинетическими схемами даны в диссертации.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, разделенных на пункты, выводов и списка литературы из 65 наименований. Текст изложен на 126 страницах и включает 28 рисунков.

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 4 статьях и 6 тезисов докладов.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на научно-методической конференции, посвященной 40-летию НУК ФН МГТУ им. Н.Э. Баумана (Москва, 1–2 декабря 2004 г.), Третьей (Москва, 24–26 января 2005 г.), Четвертой (Москва, 29–31 января 2007 г.) Всероссийских конференциях «Необратимые процессы в природе и технике», Шестом Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (Санкт-Петербург, 3–7 мая 2005 г.), Двенадцатой Всероссийской школе-коллоквиуме по стохастическим методам (Сочи, 1–7 октября 2005 г.).

Результаты диссертации докладывались и обсуждались на научных семинарах в МГТУ им. Н.Э. Баумана, в Институте космических исследований РАН и в Математическом институте им. В.А. Стеклова РАН.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулирована ее цель, определены научная новизна и практическая ценность. Кратко изложено содержание работы.

В первой главе приведены необходимые сведения о математическом аппарате теории марковских процессов. Дано описание общей модели системы взаимодействующих частиц, включающее схему взаимодействий и основные уравнения модели — первое и второе уравнения Колмогорова для производящих функций переходных вероятностей.

В 1.1 дан обзор используемых далее результатов теории марковских процессов со счетным множеством состояний и непрерывным временем. Пусть $\xi(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_n(t))$, $t \in [0, \infty)$, — однородный во времени марковский процесс на множестве состояний $N^n = \{\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n), \alpha_i = 0, 1, 2, \dots, i = 1, \dots, n\}$. Обозначим переходные вероятности $P_{\alpha\beta}(t) = P\{\xi(t) = \beta | \xi(0) = \alpha\}$, $\alpha, \beta \in N^n$. Марковский процесс задается плотностями переходных вероятностей $a_{\alpha\beta} = dP_{\alpha\beta}(t)/dt|_{t=0+}$.

Выполнены обычные для таких процессов условия, при которых переходные вероятности удовлетворяют первой (обратной) системе дифференциальных уравнений Колмогорова

$$\frac{dP_{\alpha\beta}(t)}{dt} = \sum_{\gamma} a_{\alpha\gamma} P_{\gamma\beta}(t), \quad \alpha \in N^n \quad (1)$$

(здесь и далее суммирование $\sum_{\gamma \in N^n}$ обозначается \sum_{γ}), и второй (прямой) системе дифференциальных уравнений Колмогорова

$$\frac{dP_{\alpha\beta}(t)}{dt} = \sum_{\gamma} P_{\alpha\gamma}(t) a_{\gamma\beta}, \quad \beta \in N^n; \quad (2)$$

начальные условия $P_{\alpha\alpha}(0) = 1$, $P_{\alpha\beta}(0) = 0$ при $\alpha \neq \beta$.

В 1.2 даны сведения о многомерных производящих функциях для дискретных вероятностных распределений и их свойствах.

В 1.3 дано описание модели системы с взаимодействиями частиц типов T_1, \dots, T_n . Состояние системы характеризуется вектором $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ и означает наличие совокупности S_α из α_1 частиц типа T_1 , α_2 частиц типа T_2 , \dots , α_n частиц типа T_n : $S_\alpha = \alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2 + \dots + \alpha_n T_n$. Возможные переходы системы из одного состояния в другое представляются схемой взаимодействий (кинетической схемой ⁶⁾)

$$\begin{cases} \varepsilon_1^1 T_1 + \varepsilon_2^1 T_2 + \dots + \varepsilon_n^1 T_n \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2 + \dots + \gamma_n^1 T_n, \\ \dots \\ \varepsilon_1^k T_1 + \varepsilon_2^k T_2 + \dots + \varepsilon_n^k T_n \rightarrow \gamma_1^k T_1 + \gamma_2^k T_2 + \dots + \gamma_n^k T_n, \\ \dots \\ \varepsilon_1^l T_1 + \varepsilon_2^l T_2 + \dots + \varepsilon_n^l T_n \rightarrow \gamma_1^l T_1 + \gamma_2^l T_2 + \dots + \gamma_n^l T_n, \end{cases} \quad (3)$$

в которой комплексы частиц S_{ε^k} , $k = 1, \dots, l$, фиксированы, а векторам $\gamma^k = (\gamma_1^k, \gamma_2^k, \dots, \gamma_n^k)$ соответствуют распределения вероятностей $\{p_\gamma^k \geq 0, \sum_{\gamma} p_\gamma^k = 1; p_{\varepsilon^k}^k = 0\}$, $k = 1, \dots, l$. Стохастическая модель такой системы строится в виде марковского процесса $\xi(t)$, $t \in [0, \infty)$, на множестве состояний N^n . Событие $\{\xi(t) = \alpha\}$ означает наличие в системе в момент времени t совокупности частиц S_α . Через случайное случайное время τ_α^k может произойти взаимодействие комплекса частиц S_{ε^k} . В этот момент из α_1 частиц типа T_1 выбирается ε_1^k частиц, из α_2 частиц типа T_2 выбирается ε_2^k частиц, \dots , из α_n частиц типа T_n выбирается ε_n^k частиц, и этот комплекс частиц S_{ε^k} с распределением вероятностей $\{p_\gamma^k\}$ заменяется совокупностью S_γ новых частиц. Система из состояния

⁶⁾Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. — М.: Высшая школа, 1974. — 400 с.

S_α , соответствующего вектору α , переходит в состояние $S_{\alpha-\varepsilon^k+\gamma}$, соответствующее вектору $\alpha-\varepsilon^k+\gamma$, и далее аналогичная эволюция системы частиц.

Вероятность взаимодействия комплекса частиц S_{ε^k} за время Δt , $\Delta t \rightarrow 0$, пропорциональна числу $C_{\alpha_1}^{\varepsilon_1^k}$ сочетаний ε_1^k частиц типа T_1 из имеющихся α_1 частиц типа T_1 , ..., пропорциональна числу $C_{\alpha_n}^{\varepsilon_n^k}$ сочетаний ε_n^k частиц типа T_n из имеющихся α_n частиц типа T_n и равна $\varphi_\alpha^k \Delta t + o(\Delta t)$, где $\varphi_\alpha^k = \lambda_k \prod_{i=1}^n \alpha_i (\alpha_i - 1) \cdots (\alpha_i - \varepsilon_i^k + 1)$ ($\varphi_\alpha^k = 0$, если при некотором i имеет место неравенство $\alpha_i < \varepsilon_i^k$); λ_k — коэффициент интенсивности взаимодействия комплекса S_{ε^k} . Плотности переходных вероятностей марковского процесса $\xi(t)$ полагают равными $a_{\alpha\alpha} = -\sum_{k=1}^l \varphi_\alpha^k$, $a_{\alpha\beta} = \sum_{k=1}^l \varphi_\alpha^k p_{\beta-\alpha+\varepsilon^k}^k$, $\alpha \neq \beta$, $\alpha, \beta \in N^n$.

Время τ_α^k имеет экспоненциальное распределение $P\{\tau_\alpha^k < t\} = 1 - e^{-\varphi_\alpha^k t}$. В состоянии S_α система находится случайное время τ_α , до тех пор пока не произойдет какое-либо из l взаимодействий, т. е. $\tau_\alpha = \min(\tau_\alpha^1, \dots, \tau_\alpha^l)$. Поскольку предполагается, что случайные величины $\tau_\alpha^1, \dots, \tau_\alpha^l$ независимы, то $P\{\tau_\alpha < t\} = 1 - e^{-(\varphi_\alpha^1 + \dots + \varphi_\alpha^l)t}$, а вероятность, что произошло взаимодействие комплекса частиц S_{ε^k} , при условии, что взаимодействие имело место, равна $\varphi_\alpha^k / (\varphi_\alpha^1 + \dots + \varphi_\alpha^l)$.

Далее для вектора $s = (s_1, \dots, s_n)$ применяется сокращенная запись $s^\alpha = s_1^{\alpha_1} \dots s_n^{\alpha_n}$; $\alpha! = \alpha_1! \dots \alpha_n!$. Неравенство $|s| \leq 1$ означает, что $|s_i| \leq 1$, $i = 1, \dots, n$. Запись $\partial^\alpha / \partial s^\alpha$ обозначает частную производную $\partial^{\alpha_1 + \dots + \alpha_n} / (\partial s_1^{\alpha_1} \dots \partial s_n^{\alpha_n})$. Для вектора $z = (z_1, \dots, z_n)$ приняты аналогичные обозначения.

Для свертки первой системы уравнений (1) используется экспоненциальная производящая функция переходных вероятностей $G_\beta(t; z) = \sum_\alpha P_{\alpha\beta}(t) z^\alpha / \alpha!$, $\beta \in N^n$, и линейные дифференциальные операторы с постоянными коэффициентами $h_k(\partial / \partial z) = \sum_\gamma p_\gamma^k \partial^\gamma / \partial z^\gamma$, $k = 1, \dots, l$.

Т е о р е м а 1.1⁷⁾. Экспоненциальная производящая функция переходных вероятностей $G_\beta(t; z)$ при любом $\beta \in N^n$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению в частных производных

$$\frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = \sum_{k=1}^l \lambda_k z^{\varepsilon^k} \left(h_k \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) - \frac{\partial^{\varepsilon^k}}{\partial z^{\varepsilon^k}} \right) G_\beta(t; z), \quad G_\beta(0; z) = \frac{z^\beta}{\beta!}. \quad (4)$$

Для свертки второй системы (2) используются производящие функции $F_\alpha(t; s) = \sum_\beta P_{\alpha\beta}(t) s^\beta$, $\alpha \in N^n$; $h_k(s) = \sum_\gamma p_\gamma^k s^\gamma$, $k = 1, \dots, l$.

⁷⁾Калинкин А.В. Марковские ветвящиеся процессы с взаимодействием // Усп. матем. наук. — 2002. — Т. 57, № 2. — С. 23–84.

Т е о р е м а 1.2⁷⁾ Производящая функция переходных вероятностей $F_\alpha(t; s)$ при любом $\alpha \in N^n$ удовлетворяет при $|s| \leq 1$ линейному дифференциальному уравнению в частных производных

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \sum_{k=1}^l \lambda_k \left(h_k(s) - s^{\varepsilon^k} \right) \frac{\partial^{\varepsilon^k} F_\alpha(t; s)}{\partial s^{\varepsilon^k}}, \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha. \quad (5)$$

Во второй главе рассмотрена марковская модель системы с внешним источником и парными взаимодействиями частиц одного типа. Найдены явные решения стационарного второго уравнения. Исследованы асимптотические свойства стационарного распределения.

В 2.1 определена модель со схемой взаимодействий

$$0 \rightarrow k_0 T, \quad 2T \rightarrow k_2 T. \quad (6)$$

Состояниями марковского процесса $\xi(t)$, $t \in [0; \infty)$, являются $\{0, 1, 2, \dots\}$. Второе уравнение (5) для производящей функции переходных вероятностей $F_i(t; s) = \sum_{j=0}^\infty P_{ij}(t) s^j$, $i \in N$, принимает вид

$$\frac{\partial F_i(t; s)}{\partial t} = \lambda_2 (h_2(s) - s^2) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \lambda_0 (h_0(s) - 1) F_i(t; s), \quad F_i(0; s) = s^i. \quad (7)$$

Поведение процесса $\xi(t)$ при $t \rightarrow \infty$ характеризуется стационарными вероятностями $q_j = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{ij}(t)$ (не зависят от начального состояния i). Вводим производящую функцию $f(s) = \sum_{j=0}^\infty q_j s^j$, $|s| \leq 1$. Из уравнения (7) следует стационарное уравнение

$$\lambda_2 (h_2(s) - s^2) \frac{d^2 f(s)}{ds^2} + \lambda_0 (h_0(s) - 1) f(s) = 0, \quad f(1) = 1. \quad (8)$$

В 2.2 модель со схемой (6) исследована при $k_0 = 1, 2$, $k_2 = 0, 1$ (см. рис. 1). В этом случае $h_0(s) = p_1^0 s + p_2^0 s^2$, $h_2(s) = p_0^2 + p_1^2 s$.

Для модели со схемой $0 \rightarrow T$, $2T \rightarrow k_2 T$, $k_2 = 0, 1$ ($p_2^0 = 0$), уравнение (8) сводится к модифицированному уравнению Бесселя. Производящая функция стационарного распределения имеет вид

$$f(s) = \left(\frac{s + p_0^2}{1 + p_0^2} \right) \frac{I_1(2\nu \sqrt{s + p_0^2})}{I_1(2\nu \sqrt{1 + p_0^2})}, \quad \nu = \sqrt{\frac{\lambda_0}{\lambda_2}}, \quad (9)$$

где $I_1(z)$ — модифицированная функция Бесселя. Из (9) следует явное выражение для стационарных вероятностей ($p_0^2 > 0$)

$$q_j = \sqrt{\frac{p_0^2}{1 + p_0^2}} \frac{(\nu / \sqrt{p_0^2})^j}{j!} \frac{I_{j-1}(2\nu \sqrt{p_0^2})}{I_1(2\nu \sqrt{1 + p_0^2})}, \quad j = 0, 1, \dots$$

Случай $p_0^2 = 1$ соответствует химической реакции



при постоянстве концентраций веществ A и B ⁴⁾.

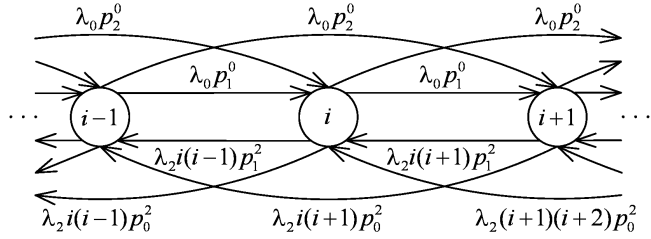


Рис. 1. Переходы между состояниями марковского процесса $\xi(t)$ и их интенсивности.

На основе (9) получены выражения для математического ожидания m_ν и дисперсии σ_ν^2 стационарного распределения $\{q_j, j = 0, 1, \dots\}$.

У т в е р ж д е н и е 2.1. Пусть $h_0(s) = s$, $h_2(s) = p_0^2 + p_1^2 s$. Обозначим $a = \sqrt{1 + p_0^2}$. При $\nu \rightarrow \infty$ справедливы асимптотики

$$m_\nu \sim \frac{\nu}{a}, \quad \sigma_\nu^2 \sim \frac{\nu}{a} \left(1 - \frac{1}{2a^2}\right).$$

Для модели со схемой $0 \rightarrow k_0 T, 2T \rightarrow k_2 T$, $k_0 = 1, 2$, $k_2 = 0, 1$, при $p_2^0 > 0$, $p_2^0 p_0^2 < 1$ уравнение (8) сводится к вырожденному гипергеометрическому уравнению. Обозначим $a = (1 - p_2^0 p_0^2)/(2p_0^2)$, $b = 1 + p_0^2$, $\nu = \sqrt{\lambda_0 p_2^0 / \lambda_2}$. Производящая функция стационарного распределения имеет вид

$$f(s) = e^{\nu(1-s)} \left(\frac{s + p_0^2}{1 + p_0^2} \right) \frac{\Phi(1 + a\nu, 2; 2\nu(s + p_0^2))}{\Phi(1 + a\nu, 2; 2\nu(1 + p_0^2))},$$

где $\Phi(a, b; z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

У т в е р ж д е н и е 2.2. Пусть $h_0(s) = p_1^0 s + p_2^0 s^2$, $h_2(s) = p_0^2 + p_1^2 s$ и $p_2^0 > 0$, $p_2^0 p_0^2 < 1$. При $\nu \rightarrow \infty$ справедливы асимптотики

$$m_\nu \sim \nu \sqrt{1 + \frac{2a}{b}}, \quad \sigma_\nu^2 \sim \nu \left(1 - \frac{a}{b(2a + b)}\right) \sqrt{1 + \frac{2a}{b}}.$$

Введем параметры критичности ²⁾ $a_k = \lambda_k(h'_k(1) - k)$, $k = 0, 2$. Марковскому процессу $\xi(t)$ со схемой (6) соответствует детерминированное приближение $x(t)$, определяемое дифференциальным уравнением $x' = a_2 x^2 + a_0$, с начальным условием $x(0) = x_0$. В случае $a_2 < 0$ система стремится к положению равновесия $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = x_a$, где $x_a = \sqrt{-a_0/a_2}$. При $h_0(s) = p_1^0 s + p_2^0 s^2$, $h_2(s) = p_0^2 + p_1^2 s$ установлено, что $m_\nu \sim x_a$, $\nu \rightarrow \infty$, и исследовано поведение разности $m_\nu - x_a$ при $\nu \rightarrow \infty$.

Т е о р е м а 2.1. Пусть $h_0(s) = p_1^0 s + p_2^0 s^2$, $h_2(s) = p_0^2 + p_1^2 s$. Обозначим η_ν , $\nu = \sqrt{\lambda_0/\lambda_2}$, случайную величину с распределением вероятностей $\{q_j, j = 0, 1, \dots\}$; $m_\nu = M\eta_\nu$, $\sigma_\nu^2 = D\eta_\nu$. При фиксированном

$x \in (-\infty, \infty)$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\eta_\nu - m_\nu}{\sigma_\nu} < x \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy.$$

Доказательство теоремы проводится методом характеристических функций. Для нахождения асимптотик специальных функций используется метод перевала.

В 2.3 найдены нестационарные математическое ожидание и дисперсия для дискретной модели со схемой взаимодействий $0 \rightarrow k_0 T$, $T \rightarrow k_1 T$, $2T \rightarrow k_2 T$ в критическом случае ($a_2 = 0$), и исследовано их поведение при $t \rightarrow \infty$. Установлены необходимые условия существования стационарного распределения в моделях указанного вида.

В третьей главе рассмотрена марковская модель системы с парными взаимодействиями и выходом финального продукта.

В 3.1 дано описание марковского процесса $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$, являющегося моделью дискретной системы со схемой взаимодействий

$$T_1 \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2, \quad 2T_1 \rightarrow \gamma_1^2 T_1 + \gamma_2^2 T_2. \quad (10)$$

Пусть начальное состояние $\xi(0) = (\alpha_1, 0)$, $\alpha_1 \in N$. Частицы типа T_2 называются финальными, их число не уменьшается со временем и не влияет на число частиц типа T_1 . Обозначим η_{α_1} случайное число частиц типа T_2 , оставшихся после исчезновения (вырождения) частиц типа T_1 . Исследуется финальное распределение $P\{\eta_{\alpha_1} = \beta_2\} = q_{(0, \beta_2)}^{(\alpha_1, 0)}$, $\beta_2 \in N$.

Для записи первого уравнения Колмогорова (ср. уравнение (4)), используется производящая функция $W_{\beta_1}(t; z, u) = \sum_{\alpha_1=0, \beta_2=0}^{\infty} P_{(\beta_1, \beta_2)}^{(\alpha_1, 0)}(t) z^{\alpha_1} u^{\beta_2} / \alpha_1!$, $\beta_1 \in N$, и дифференциальные операторы $h_k(\partial/\partial z_1, u) = \sum_{\gamma_1, \gamma_2=0}^{\infty} p_{\gamma_1 \gamma_2}^k u^{\gamma_2} \partial^{\gamma_1} / \partial z_1^{\gamma_1}$, $k = 1, 2$.

Т е о р е м а 3.1. Производящая функция переходных вероятностей $W_{\beta_1}(t; z, u)$ при любом $\beta_1 \in N$ удовлетворяет при $|u| \leq 1$ дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial W_{\beta_1}(t; z, u)}{\partial t} = \left[\lambda_2 z^2 \left(h_2 \left(\frac{\partial}{\partial z}, u \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \lambda_1 z \left(h_1 \left(\frac{\partial}{\partial z}, u \right) - \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] W_{\beta_1}(t; z, u), \quad W_{\beta_1}(0; z, u) = \frac{z^{\beta_1}}{\beta_1!}. \quad (11)$$

Введем производящие функции финальных вероятностей $f_{\alpha_1}(u) = \sum_{\beta_2=0}^{\infty} q_{(0, \beta_2)}^{(\alpha_1, 0)} u^{\beta_2}$, $w_0(z, u) = \sum_{\alpha_1=0}^{\infty} f_{\alpha_1}(u) z^{\alpha_1} / \alpha_1!$, $|u| \leq 1$. Для функции $w_0(z, u) = \sum_{\alpha_1=0, \beta_2=0}^{\infty} q_{(0, \beta_2)}^{(\alpha_1, 0)} z^{\alpha_1} u^{\beta_2} / \alpha_1!$ имеем стационарное первое урав-

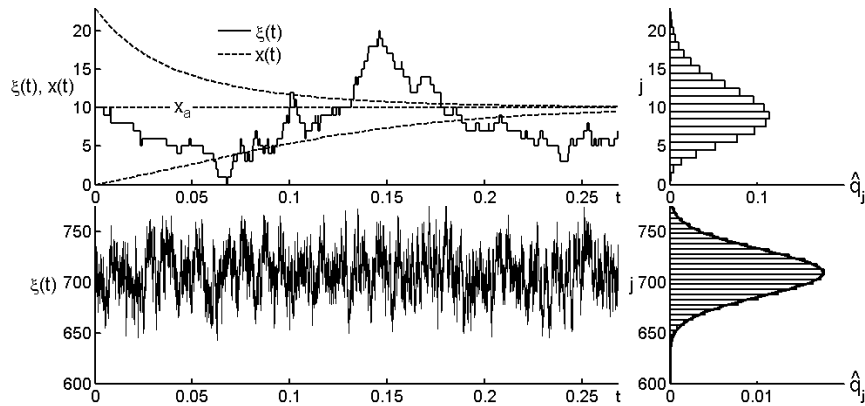


Рис. 3. Реализации марковского процесса $\xi(t)$, детерминированной модели $x(t)$ (вверху) и гистограммы стационарного распределения при $p_0^1 = 1/3$, $p_2^1 = 2/3$, $p_1^2 = 3/4$, $p_3^2 = 1/4$; $\lambda_0 = 50$, $\lambda_1 = 15$, $\lambda_2 = 2$, $\xi(0) = 10$ (вверху) и $\lambda_0 = 5 \cdot 10^5$, $\xi(0) = 709$ (внизу); число скачков процесса $\xi(t)$ равно 10^7 (для гистограмм).

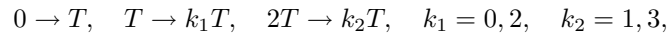
Для указанной модели второе уравнение (5) принимает вид

$$\frac{\partial F_i(t; s)}{\partial t} = \sum_{k=0}^l \lambda_k (h_k(s) - s^k) \frac{\partial^k F_i(t; s)}{\partial s^k}, \quad F_i(0; s) = s^i. \quad (15)$$

Обозначим параметры критичности $a_k = \lambda_k (h'_k(1) - k)$. Из уравнения (15) в предположении справедливости «предельного термодинамического перехода»¹⁾, 8), 9) следует кинетическое уравнение для числа частиц $x(t)$ в детерминированной модели: $x' = a_l x^l + a_{l-1} x^{l-1} + \dots + a_1 x + a_0$, с начальным условием $x(0) = x_0$.

Ввиду сложности построения решения уравнения (15) и соответствующего стационарного уравнения $\sum_{k=0}^l \lambda_k (h_k(s) - s^k) f^{(k)}(s) = 0$, $f(1) = 1$, для исследования свойств стационарного распределения применяется метод численного моделирования марковского процесса.

Для бимолекулярной реакции



имеем $h_0(s) = s$, $h_1(s) = p_0^1 + p_2^1 s^2$, $h_2(s) = p_1^2 s + p_3^2 s^3$. Стационарное второе уравнение $\lambda_2 s (p_2^2 s - p_1^2) f''(s) + \lambda_1 (p_2^1 s - p_0^1) f'(s) + \lambda_0 f(s) = 0$

⁸⁾McQuarrie D.A. Stochastic approach to chemical kinetic // J. Appl. Prob. — 1967. — V. 4. — P. 413–478.

⁹⁾Becker N.G. Interactions between species: some comparisons between deterministic and stochastic models // Rocky Mountain J. Math. — 1973. — V. 3, № 1. — P. 53–68.

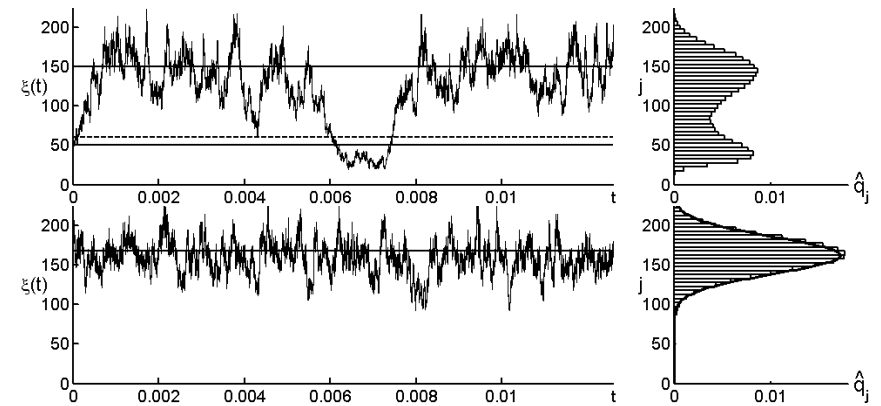


Рис. 4. Реализации марковского процесса $\xi(t)$ и гистограммы стационарного распределения при $\lambda_0 = 4,5 \cdot 10^5$, $\lambda_1 = 1,95 \cdot 10^4$, $\lambda_2 = 2,6 \cdot 10^2$, $\lambda_3 = 1$, $\xi(0) = 60$ (вверху) и $\lambda_0 = 6,75 \cdot 10^5$, $\xi(0) = 160$ (внизу); число скачков процесса $\xi(t)$ равно 10^7 (для гистограмм).

сводится к гипергеометрическому уравнению¹⁰⁾. Случай $\lambda_1 = 0$, $p_2^2 = 0$ исследован в главе 2. Отметим, что уравнение детерминированной модели $x' = \lambda_2 (2p_3^2 - 1)x^2 + \lambda_1 (2p_2^1 - 1)x + \lambda_0$, $x(0) = x_0$, в докритическом случае ($p_3^2 < 1/2$) известно как уравнение популяционной динамики с внутривидовой конкуренцией¹¹⁾.

Численным моделированием получены оценки стационарных вероятностей \hat{q}_j , $j \in N$. При увеличении интенсивности внешнего источника частиц ($\lambda_0 \rightarrow \infty$) гистограмма стационарного распределения приобретает вид кривой нормальной плотности (см. рис. 3, внизу).

Моделью, иллюстрирующей роль случайных флуктуаций, является химическая реакция



при постоянстве концентраций веществ A и B . Реакции (16) соответствует схема взаимодействий $0 \rightarrow T$, $T \rightarrow 0$, $2T \rightarrow 3T$, $3T \rightarrow 2T$. В уравнении третьего порядка (15) имеем $h_0(s) = s$, $h_1(s) = 1$, $h_2(s) = s^3$, $h_3(s) = s^2$; его решение неизвестно.

Уравнение детерминированной модели: $x' = -\lambda_3 x^3 + \lambda_2 x^2 - \lambda_1 x + \lambda_0$,

¹⁰⁾Roehner B., Valent G. Solving the birth and death processes with quadratic asymptotically symmetric transition rates // SIAM J. Appl. Math. — 1982. — V. 42, № 5. — P. 1020–1046.

¹¹⁾Базыкин А.Д. Математическая биофизика взаимодействующих популяций. — М.: Наука, 1985. — 182 с.

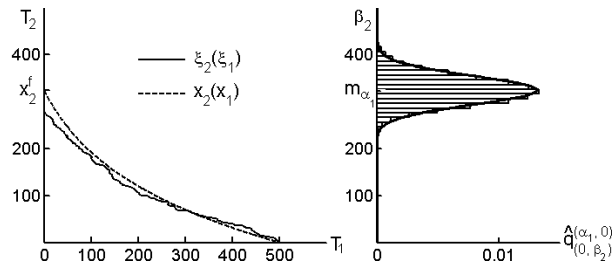


Рис. 5. Фазовые траектории в стохастической и детерминированной моделях, гистограмма финального распределения при $\lambda_1 = 249$, $\lambda_2 = 1$, $\xi_1(0) = \alpha_1 = 500$, $\xi_2(0) = 0$, $x_1^0 = 500$, $x_2^0 = 0$; число реализаций процесса $(\xi_1(t), \xi_2(t))$ равно 10^4 (для гистограммы).

$x(0) = x_0$. Точки равновесия системы определяются корнями уравнения $-\lambda_3 x^3 + \lambda_2 x^2 - \lambda_1 x + \lambda_0 = 0$. При наличии трех действительных и различных корней среднему корню соответствует положение неустойчивого равновесия, а двум другим корням — положения устойчивого равновесия. При единственном действительном корне имеется одна точка устойчивого равновесия системы.

Марковский процесс $\xi(t)$, соответствующий реакции (16), проводит большую часть времени вблизи точек устойчивого равновесия соответствующей детерминированной модели, переходя от одной точки к другой (бистабильная система¹²⁾). Гистограмма стационарного распределения имеет двухвершинный вид (см. рис. 4, вверху; положение неустойчивого равновесия обозначено штриховой линией). При увеличении интенсивности внешнего источника ($\lambda_0 \rightarrow \infty$) гистограмма приближается к кривой нормального закона распределения (см. рис. 4, внизу).

В 4.3 проведено моделирование систем вида (10), когда решения уравнений (11) и (12) неизвестны. Рассмотрена модель со схемой взаимодействий $T_1 \rightarrow \gamma_1 T_1 + \gamma_2 T_2$, $\gamma_1 = 0, 2$, $\gamma_2 = 0, 1$; $2T_1 \rightarrow T_1$ при $h_1(s, u) = 1/3 + u/3 + s^2 u/3$, $h_2(s, u) = s$. Для соответствующей детерминированной модели $x'_1 = -\lambda_1 x_1/3 - \lambda_2 x_1^2$, $x'_2 = 2\lambda_1 x_1/3$, $x_1(0) = x_1^0$, $x_2(0) = x_2^0$, имеем $\lim_{t \rightarrow \infty} x_1(t) = 0$, $\lim_{t \rightarrow \infty} x_2(t) = x_2^f$.

Путем численного моделирования получены оценки вероятностей финального распределения $\hat{q}_{(0, \beta_2)}^{(\alpha_1, 0)}$, $\beta_2 \in N$. Гистограмма близка к кривой нормальной плотности (см. рис. 5). Выборочное среднее близко к значению, даваемому оценкой (14).

Известны марковские модели при дискретных состояниях, когда распределение финального продукта отлично от нормального закона²⁾.

¹²⁾Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. — М.: Наука, 1986. — 528 с.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Исследована стохастическая модель системы с внешним источником, задаваемая кинетической схемой $0 \rightarrow k_0 T$, $2T \rightarrow k_2 T$, $k_0 = 1, 2$, $k_2 = 0, 1$. Найдены явные решения стационарного второго уравнения.

Получены выражения для математического ожидания и дисперсии стационарного распределения, исследованы их асимптотические свойства, и показана асимптотическая нормальность стационарного распределения при большой интенсивности внешнего источника частиц.

Проведено сравнение исследуемой стохастической модели с соответствующей детерминированной моделью. Получена оценка погрешности детерминированного приближения.

2. Рассмотрена дискретная модель системы с парными взаимодействиями и образованием финального продукта, задаваемая схемой $T_1 \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2$, $2T_1 \rightarrow \gamma_1^2 T_1 + \gamma_2^2 T_2$, $\gamma_1^1, \gamma_1^2 = 0, 1, 2$, $\gamma_2^1, \gamma_2^2 = 0, 1, 2, \dots$. Найдены представления решения стационарного первого уравнения Колмогорова в виде контурных интегралов.

Получена асимптотическая оценка логарифмического вида для математического ожидания финального числа частиц типа T_2 при большом начальном числе частиц типа T_1 ; установлена его связь с решением соответствующей детерминированной модели.

В случае $\gamma_1^1 = 0, 1$, $\gamma_1^2 = 1, 2$, установлена асимптотическая нормальность финального распределения при большом начальном числе нефинальных частиц.

3. На основе метода Монте-Карло сформулирован алгоритм численного моделирования на ЭВМ стохастических систем с дискретными состояниями, задаваемых схемами взаимодействий с произвольным числом типов частиц и комплексов взаимодействия. Алгоритм реализован в составе программного комплекса.

Результаты численного моделирования докритических систем со схемами вида $0 \rightarrow k_0 T$, $T \rightarrow k_1 T$, $2T \rightarrow k_2 T$, \dots , $lT \rightarrow k_l T$ демонстрируют близость стационарного распределения к нормальному при большой интенсивности поступления новых частиц.

Численные эксперименты, проведенные для докритических систем со схемами вида $T_1 \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2$, $2T_1 \rightarrow \gamma_1^2 T_1 + \gamma_2^2 T_2$, позволяют предположить асимптотическую нормальность распределения финального продукта при большом начальном числе нефинальных частиц.

4. Полученные в диссертации результаты об асимптотических свойствах стационарных и финальных распределений, а также методы численного моделирования, дают основу для проведения точных и приближенных расчетов дискретных марковских моделей систем с взаимодействием.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Ланге А.М. Об одном ветвящемся процессе с иммиграцией и взаимодействием частиц // Обозрение прикладной и промышленной математики. — 2001. — Т. 8, № 2. — С. 783–784.

2. Ланге А.М. Решение стационарного уравнения Колмогорова для обобщенного процесса рождения и гибели квадратичного типа // Современные естественно-научные и гуманитарные проблемы: Труды научно-методической конференции, посвященной 40-летию НУК ФН МГТУ им. Н.Э. Баумана. — М., 2005. — С. 333–335.

3. Ланге А.М. Статистическое моделирование открытой системы с тройными взаимодействиями частиц // Необратимые процессы в природе и технике: Тезисы докладов Третьей Всероссийской конференции. — М., 2005. — С. 60–62.

4. Ланге А.М. Статистическое моделирование открытых дискретных систем с взаимодействиями частиц одного типа // Необратимые процессы в природе и технике: Труды Третьей Всероссийской конференции. — М., 2005. — Вып. 1. — С. 56–67.

5. Ланге А.М. О распределении числа финальных частиц ветвящегося процесса со схемой взаимодействий $2T_1 \rightarrow \gamma_1^2 T_1 + \gamma_2^2 T_2$, $T_1 \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2$ // Обозрение прикладной и промышленной математики. — 2005. — Т. 12, № 2. — С. 417–419.

6. Ланге А.М. Асимптотические свойства финальных вероятностей одного ветвящегося процесса с взаимодействием частиц // Обозрение прикладной и промышленной математики. — 2005. — Т. 12, № 3. — С. 669–770.

7. Ланге А.М. Стационарное распределение в открытой стохастической системе с парным взаимодействием частиц // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. — 2005. — Вып. 1(16). — С. 3–22.

8. Численные методы Монте-Карло для моделирования схем взаимодействий при дискретных состояниях / А.В. Калинин, А.М. Ланге, А.В. Мاستихин, А.А. Шапошников // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. — 2005. — Вып. 2(17). — С. 53–74.

9. Ланге А.М. О распределении числа финальных частиц ветвящегося процесса с превращениями и парными взаимодействиями // Теория вероятностей и ее применения. — 2006. — Т. 51, № 4. — С. 801–809.

10. Ланге А.М. Распределение количества финального продукта в системе со схемой взаимодействий $T_1 \rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2$, $2T_1 \rightarrow \gamma_1^2 T_1 + \gamma_2^2 T_2$ // Необратимые процессы в природе и технике: Труды Четвертой Всероссийской конференции. — М., 2007. — С. 257–259.