А. В. К а л и н к и н (Москва, МГТУ)**. Решение уравнений Колмогорова для вероятностной модели бимолекулярной реакции.**

Марковская модель бимолекулярной реакции $T_1 + T_2 \to T_3$ [1], [2] представляет собой однородный во времени марковский процесс на множестве состояний $N^3 = \{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3),\ \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 = 0, 1, \ldots\}$, переходные вероятности $P^{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)}_{(\beta_1,\beta_2,\beta_3)}(t)$, $t \in [0, \infty)$, которого представимы при $t \to 0+$ в виде ($\lambda > 0$):

$$P^{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)}_{(\alpha_1-1,\alpha_2-1,\alpha_3+1)}(t) = \alpha_1\alpha_2\lambda t + o\,(t), \quad P^{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)}_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)}(t) = 1 - \alpha_1\alpha_2\lambda t + o\,(t).$$

Состояние процесса $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ интерпретируется как наличие α_1 частиц типа T_1, α_2 частиц типа T_2, α_3 частиц типа T_3. С помощью экспоненциальной (двойной) производящей функции ($|s_1| \leqslant 1$, $|s_2| \leqslant 1$, $|s_3| \leqslant 1$)

$$\mathcal{F}(t; z_1, z_2; s_1, s_2, s_3) = \sum_{\alpha_1,\alpha_2=0}^{\infty} \frac{z_1^{\alpha_1} z_2^{\alpha_2}}{\alpha_1!\alpha_2!} F_{(\alpha_1,\alpha_2,0)}(t; s_1, s_2, s_3);$$
$$F_{(\alpha_1,\alpha_2,0)}(t; s_1, s_2, s_3) = \sum_{\beta_1,\beta_2,\beta_3=0}^{\infty} P^{(\alpha_1,\alpha_2,0)}_{(\beta_1,\beta_2,\beta_3)}(t) s_1^{\beta_1} s_2^{\beta_2} s_3^{\beta_3},$$

первая и вторая системы дифференциальных уравнений для переходных вероятностей такого марковского процесса записываются в виде [3], [6]

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \lambda z_1 z_2 \left(s_3 \mathcal{F} - \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial z_1 \partial z_2} \right), \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \lambda (s_3 - s_1 s_2) \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial s_1 \partial s_2}, \tag{1}$$

с начальным условием $\mathcal{F}(0; z_1, z_2; s_1, s_2, s_3) = e^{z_1 s_1 + z_2 s_2}$. В [1] обсуждается связь второго уравнения и известного в химической кинетике закона действующих масс; получены труднообозримые явные выражения для переходных вероятностей. Линейные уравнения в частных производных второго порядка (1) решаются методом разделения переменных.

Теорема. *Решение уравнений Колмогорова* (1) *имеет вид*

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(t; z_1, z_2; s_1, s_2, s_3) = &\sum_{\alpha_1,\alpha_2=0}^{\infty} \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\max\{\alpha_1, \alpha_2\}} \frac{z_1^{\alpha_1} z_2^{\alpha_2}}{(\alpha_1 + \alpha_2)!} \\ &\times {}_0F_1(\alpha_1 + \alpha_2 + 1; z_1 z_2 s_3) s_\sigma^{|\alpha_1 - \alpha_2|} \\ &\times s_3^{\min\{\alpha_1,\alpha_2\}} P^{(-1,|\alpha_1-\alpha_2|)}_{\min\{\alpha_1,\alpha_2\}} \left(2\frac{s_1 s_2}{s_3} - 1 \right) e^{-\alpha_1\alpha_2\lambda t}, \end{aligned} \tag{2}$$

где ${}_0F_1(\alpha; z)$ *— обобщенная гипергеометрическая функция,* $P^{(-1,\beta)}_\alpha(s)$ *— многочлены Якоби;* $s_\sigma = s_1$, *если* $\alpha_1 \geqslant \alpha_2$ *и* $s_\sigma = s_2$, *если* $\alpha_1 < \alpha_2$; *при* $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 0$ *выражение* $(\alpha_1 + \alpha_2)/\max\{\alpha_1, \alpha_2\}$ *полагается равным* 1.

При $t = 0$ двойной ряд (2) свертывается к экспоненте последовательным применением формул суммирования 6.8.3.13 из [5] и 5.8.3.2 из [4]. Незамкнутое решение уравнений Колмогорова для одномерного процесса гибели квадратичного типа [7] имеет вид, аналогичный (2). Ряд (2) рассматривается с целью получить замкнутое решение уравнений (1) (ср. [8]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Баруча–Рид А. Т.* Элементы теории марковских процессов и их приложения. М.: Наука, 1969, 512 с.
2. *McQuarrie D. A.* Stochastic approach to chemical kinetic. — J. Appl. Probab., 1967, v. 4, p. 413–478.
3. *Севастьянов Б. А.*, *Калинкин А. В.* Ветвящиеся случайные процессы с взаимодействием частиц. — Докл. АН СССР, 1982, т. 264, в. 2, с. 306–308.
4. *Прудников А. П.*, *Брычков Ю. А.*, *Марычев О. И.* Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983, 752 с.
5. *Прудников А. П.*, *Брычков Ю. А.*, *Марычев О. И.* Интегралы и ряды. Дополнительные главы. М.: Наука, 1986, 800 с.
6. *Калинкин А. В.* Финальные вероятности для ветвящегося случайного процесса с взаимодействием частиц. — Докл. АН СССР, 1983, т. 269, в. 6, с. 1309–1312.
7. *Kalinkin A.*, *Valent G.* Exact solution of the linear Kolmogorov equations for a quadratic death process. — Обозрение прикл. и промышл. матем., сер. вероятн. и статист., 1998, т. 5, в. 2, с. 304–305.
8. *Калинкин А. В.* Марковские ветвящиеся процессы с взаимодействием. — Успехи матем. наук, 2002, т. 57, в. 2, с. 23–84.