

А. В. Калинин (Москва, МГТУ). **Специальный курс «Математическое моделирование кинетических схем».**

В различных областях естествознания и техники системы с взаимодействиями и превращениями составляющих их элементов задаются кинетическими схемами. Общая схема взаимодействий, в которой участвуют элементы типов T_1, \dots, T_n , имеет вид [1], [3]:

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

где $\varepsilon_j^i, \gamma_j^i$ ($i = 1, \dots, l, j = 1, \dots, n$) — целые неотрицательные числа. Примеры схем: последовательная $T_1 \rightarrow T_2 \rightarrow \dots \rightarrow T_n$; параллельные $T_1 \rightarrow T_2, T_3$ или $T_1 + T_2 \rightarrow T_4, T_1 + T_3 \rightarrow T_5$; последовательно-параллельная $T_1 \rightarrow T_2, T_2 \rightarrow T_3, T_4$; двусторонняя $T_1 + T_2 \rightarrow T_3, T_3 \rightarrow T_1 + T_2$; простая циклическая $T_1 \rightarrow T_2 \rightarrow \dots \rightarrow T_n \rightarrow T_1$; катализ $T_1 + T_2 \rightarrow T_2 + T_3$; автокатализ $T \rightarrow 2T$; цепная с ветвлением $T \rightarrow kT, k = 0, 1, 2, \dots$. Схемой (1) может быть учтено поступление элементов извне (открытая система) и образование конечных элементов (финального продукта).

В первой части учебного курса рассматривается детерминированный подход к моделированию схемы (1). Пусть $x_i(t)$ — количество элементов типа $T_i, i = 1, \dots, n$, в момент времени $t \in [0, \infty)$. Функции $x_1(t), \dots, x_n(t)$ удовлетворяют системе нелинейных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f_1(x_1, \dots, x_n); \\ \dots \\ \dot{x}_n = f_n(x_1, \dots, x_n), \end{cases} \quad (2)$$

с начальными условиями $x_1(0) = x_1^0, \dots, x_n(0) = x_n^0$. Вид функций f_1, \dots, f_n определяется феноменологическими законами кинетики [1]: для мономолекулярной реакции $T_1 \rightarrow T_2$ имеем $\dot{x}_1 = -\lambda x_1, \dot{x}_2 = \lambda x_1$; для бимолекулярной реакции $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$ имеем $\dot{x}_1 = -\lambda x_1 x_2, \dot{x}_2 = -\lambda x_1 x_2, \dot{x}_3 = \lambda x_1 x_2$, где $\lambda > 0$ — константа скорости реакции. В прикладных задачах функции f_1, \dots, f_n являются многочленами степени не выше третьей.

Во второй части курса рассматривается вероятностная модель [2] для схемы (1) в виде однородного во времени марковского процесса $\xi(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_n(t)), t \in [0, \infty)$, на фазовом пространстве $N^n = \{\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n), \alpha_i = 0, 1, 2, \dots, i = 1, \dots, n\}$. Состояние $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ соответствует наличию α_1 элементов типа T_1, \dots, α_n элементов типа T_n , а строке $\varepsilon_1^i T_1 + \dots + \varepsilon_n^i T_n \rightarrow \gamma_1^i T_1 + \dots + \gamma_n^i T_n$ соответствует скачок процесса из α в $\alpha - \varepsilon^i + \gamma^i$. Если процесс $\xi(t)$ из состояния α может совершить скачок только в такое состояние β , что $|\alpha_i - \beta_i| \leq 1$ для $i = 1, \dots, n$, то получаем процесс рождения и гибели. В состоянии α процесс находится случайное время с показательным распределением, зависящим от параметров таким образом, что стохастическая модель и детерминированная модель (2) связаны «термодинамическим предельным переходом».

Разбираются примеры применения аналитических методов решения дифференциальных уравнений Колмогорова для переходных вероятностей процесса $\xi(t)$ для моделей схем (1) в случаях $n \leq 2$ и $l \leq 2$. Например, явно решаемая схема $0 \rightarrow T, T \rightarrow 0$ интерпретируется в теории массового обслуживания как дисциплина $M|M|\infty$.

В третьей части курса рассматриваются численные методы. Для детерминированных моделей вида (2) применяется метод Рунге–Кутты. Для вероятностных моделей используется метод Монте-Карло. Излагаются итерационный алгоритм моделирования на ЭВМ марковского процесса $\xi(t)$ и метод статистических испытаний [5].

Обязательный семестровый курс читается по программе магистерской подготовки студентам специальности «Прикладная математика» Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана и является продолжением

курса [4]. Варианты задач типового расчета и возможные темы курсовых работ даны в учебном пособии [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г.* Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1974, 400 с.
2. *Севастьянов Б. А., Калинин А. В.* Ветвящиеся случайные процессы с взаимодействием частиц. — Докл. АН СССР, 1982, т. 264, в. 2, с. 306–308.
3. *Калинкин А. В.* Схемы взаимодействий: детерминированные и стохастические модели. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2005, 32 с. (Препринт архивирован: <http://www2.bmstu.ru/facult/fn/kalin/branching/interaction.ps>)
4. *Калинкин А. В.* Курс теории марковских процессов. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2001, т. 8, в. 1, с. 198–200.
5. *Калинкин А. В., Ланге А. М., Мاستихин А. В., Шапошников А. А.* Численные методы Монте-Карло для моделирования схем взаимодействий при дискретных состояниях. — Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. «Естеств. науки», 2005. (В печати.)