

УДК 531.19+519.21

А. В. Калинкин, А. М. Ланге,  
А. В. Мастихин, А. А. Шапошников

## ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СХЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИ ДИСКРЕТНЫХ СОСТОЯНИЯХ

*Рассмотрены стохастические модели систем взаимодействующих элементов, задаваемые кинетическими схемами. Представлен метод Монте-Карло численного исследования таких систем. В качестве примеров взяты модели бимолекулярной реакции, распространения эпидемии и брюсселятора в виде марковских случайных процессов с дискретным фазовым пространством.*

Сложные системы с взаимодействиями и превращениями составляющих их элементов часто задаются схемами взаимодействий. Общая схема взаимодействий, в которой участвуют элементы типов  $T_1, \dots, T_n$ , имеет вид

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

где  $\varepsilon_j^i$ ,  $\gamma_j^i$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ , — целые неотрицательные числа. В физике и химии схемы вида (1) называются *кинетическими схемами* [4, 8]; в экологии и эпидемиологии при описании систем с взаимодействием используется специальная терминология, однако во многих случаях такие описания сводятся к схемам вида (1) [11, 12]. В технике, в математической теории надежности запись  $T \rightarrow 0$  обозначает выход из строя элементов технических систем; в теории массового обслуживания схема  $0 \rightarrow T$ ,  $T \rightarrow 0$  интерпретируется как дисциплина обслуживания  $M/M/\infty$  [17]. В публикациях по математическому моделированию систем рассматриваемого класса для отдельных элементов используется название *частица*, что обусловлено спецификой процессов их взаимодействия. При различии физической природы, происхождения и масштабов таких частиц существенным является то, что

для исследования этих систем используются единые математические модели.

В первой части работы дается описание детерминированных и стохастических моделей, используемых при рассмотрении систем с взаимодействием, задаваемых схемами (1). При детерминированном подходе к схеме (1) определяют систему нелинейных дифференциальных уравнений (см. далее уравнения (6)). Вероятностный подход основан на понятиях и результатах теории марковских процессов со счетным множеством состояний [2]. Моделью системы со схемой взаимодействий (1) является обобщенный процесс рождения и гибели  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , при дискретном множестве состояний  $N^n$ ,  $N = \{0, 1, 2, \dots\}$  [4, 5, 17]. Точка фазового пространства  $(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in N^n$  интерпретируется как такое состояние системы, в котором имеется совокупность частиц  $\alpha_1 T_1 + \dots + \alpha_n T_n$ , состоящая из  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1, \dots, \alpha_n$  частиц типа  $T_n$ ; переход случайного процесса в другое состояние — результат взаимодействия одного из комплексов частиц  $\varepsilon_1^i T_1 + \dots + \varepsilon_n^i T_n$  согласно схеме (1). Процесс  $\xi(t)$  введен в работе [1] для кинетической схемы  $T_i + T_j \rightarrow T_k + T_l$ ,  $i, j, k, l = 1, \dots, n$ . В работе [1] указано на связь между стохастической и детерминированной моделями при большом числе частиц (см. также [4, 5, 12]). В настоящей статье примеры “термодинамического предельного перехода” даны для трех схем взаимодействий.

Аналитический метод исследования марковских процессов основан на рассмотрении первой и второй систем дифференциальных уравнений Колмогорова для переходных вероятностей (см. далее уравнения (7)). Для процессов  $\xi(t)$ , определяемых схемами взаимодействий (1), такое исследование сводится к рассмотрению уравнений в частных производных (9) и (10). Точные решения уравнений Колмогорова для некоторых схем взаимодействий, в случаях  $n \leq 2$  и  $l \leq 2$ , получены в работе [17].

В случаях  $n > 2$  или  $l > 2$  ввиду сложности уравнений (9) и (10) целесообразно использовать метод Монте-Карло — способ решения математических задач путем моделирования случайных величин и построения статистических оценок [3]. Модели при дискретных состояниях, совпадающие с рассматриваемыми в настоящей статье, изучались через численный эксперимент в работах: [9], где детально исследована схема  $2T \rightarrow kT$ ,  $k = 0, 1$ ; [10], где моделировалась химическая реакция  $2T_1 \rightarrow T_2$ ,  $T_2 \rightarrow 2T_1$ ,  $T_1 \rightarrow 0$ ,  $T_2 \rightarrow T_3$ ; [15], где методом статистических испытаний изучалась динамика конкурирующих популяций; [20] и др.

Во второй части статьи изложен итерационный алгоритм моделирования на ЭВМ случайного процесса  $\xi(t)$ , соответствующего схеме

ме (1). Методом статистических испытаний рассмотрены предельные поведения при  $t \rightarrow \infty$  стохастических систем с конкретными схемами взаимодействий: бимолекулярная схема  $2T \rightarrow T, 3T; T \rightarrow 0, 2T; 0 \rightarrow T$ ; процесс эпидемии  $T_1 + T_2 \rightarrow kT_1$ ,  $k = 1, 2$ ;  $T_1 \rightarrow 0$ ; брюселятор  $2T_1 + T_2 \rightarrow 3T_1$ ;  $T_1 \rightarrow 0, T_2$ ;  $0 \rightarrow T_1$ . Реализация моделей схемы (1) в виде комплекса программ для ЭВМ позволяет проводить вычислительные эксперименты и получать соответствующие выводы об объекте моделирования.

**Детерминированные модели для схем взаимодействий. Кинетические уравнения.** В химической кинетике для мономолекулярной реакции используется запись  $T_1 \rightarrow T_2$ . При детерминированном подходе реакция описывается количеством  $x_1(t)$  реагента  $T_1$  и количеством  $x_2(t)$  реагента  $T_2$  в момент времени  $t$ ,  $t \in [0, \infty)$ . Полагают справедливым феноменологический закон [8]

$$\dot{x}_1 = -\lambda x_1, \quad \dot{x}_2 = \lambda x_1, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0, \quad (2)$$

где  $\lambda > 0$  — константа скорости реакции.

Для бимолекулярной реакции  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$  пусть  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$  — количества реагентов типа  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ . Полагают справедливым закон действующих масс [8]:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\lambda x_1 x_2, & \dot{x}_2 &= -\lambda x_1 x_2, & \dot{x}_3 &= \lambda x_1 x_2, \\ x_1(0) &= x_1^0, & x_2(0) &= x_2^0, & x_3(0) &= x_3^0. \end{aligned} \quad (3)$$

В ядерной физике для цепной реакции размножения нейтронов используется запись  $T \rightarrow kT$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Уравнение детерминированной модели имеет вид [4, 5]

$$\dot{x} = \lambda x, \quad x(0) = x^0, \quad (4)$$

где  $-\infty < \lambda < \infty$ .

Динамику экологической системы “хищник–жертва” описывают количеством  $x_1(t)$  “жертв” и количеством  $x_2(t)$  “хищников”. Схеме взаимодействий  $T_1 + T_2 \rightarrow kT_2$ ,  $k = 0, 2$ ;  $T_1 \rightarrow 2T_1$ ;  $T_2 \rightarrow 0$  [4, 11, 20] соответствует система дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_1 = -\lambda_1 x_1 x_2 + \lambda_2 x_1, \quad \dot{x}_2 = \lambda_3 x_1 x_2 - \lambda_4 x_2, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0, \quad (5)$$

где  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_2 > 0$ ,  $\lambda_3 > 0$ ,  $\lambda_4 > 0$ .

При детерминированном подходе, в общем случае схемы (1), вводят количество  $x_i(t)$  частиц типа  $T_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Функции  $x_1(t), \dots, x_n(t)$

удовлетворяют системе нелинейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= f_1(x_1, \dots, x_n), \\ &\dots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_1, \dots, x_n)\end{aligned}\tag{6}$$

с начальными условиями  $x_1(0) = x_1^0, \dots, x_n(0) = x_n^0$  (кинетические уравнения). Вид функций  $f_1, \dots, f_n$  определяется по схеме (1) исходя из законов формальной кинетики [8] на основе простейших случаев (2) – (5). В прикладных задачах, как правило, функции  $f_1, \dots, f_n$  являются многочленами степени не выше третьей. Схемой (1) может быть учтено поступление частиц извне (открытая система) и образование финального продукта.

**Стохастические модели для схем взаимодействий. Уравнения Колмогорова.** Пусть  $N^n = \{\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n), \alpha_i = 0, 1, 2, \dots, i = 1, \dots, n\}$  — множество  $n$ -мерных векторов с неотрицательными целочисленными компонентами. Далее для  $\alpha, \beta, \gamma \in N^n$  приняты обозначения:  $\gamma = \alpha - \beta$ , если  $\gamma_1 = \alpha_1 - \beta_1, \dots, \gamma_n = \alpha_n - \beta_n$ , и т. п. Для однородного по времени марковского процесса  $\xi(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_n(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , на множестве состояний  $N^n$  обозначим переходные вероятности  $P_{\alpha\beta}(t) = P\{\xi(t) = \beta | \xi(0) = \alpha\}$ ,  $\alpha, \beta \in N^n$ . Такой случайный процесс задается плотностями переходных вероятностей  $a_{\alpha\beta} = (dP_{\alpha\beta}(t)/dt)|_{t=0+}$ . Далее всегда выполнены условия, при которых переходные вероятности удовлетворяют первой (обратной) и второй (прямой) системам дифференциальных уравнений Колмогорова [2]

$$\begin{aligned}\frac{dP_{\alpha\beta}(t)}{dt} &= \sum_{\gamma \in N^n} a_{\alpha\gamma} P_{\gamma\beta}(t), \quad \alpha \in N^n, \\ \frac{dP_{\alpha\beta}(t)}{dt} &= \sum_{\gamma \in N^n} P_{\alpha\gamma}(t) a_{\gamma\beta}, \quad \beta \in N^n,\end{aligned}\tag{7}$$

с начальными условиями  $P_{\alpha\alpha}(0) = 1, P_{\alpha\beta}(0) = 0$  при  $\alpha \neq \beta$ .

Марковский процесс, соответствующий схеме взаимодействий (1), указывается конкретным видом плотностей переходных вероятностей  $\{a_{\alpha\beta}, \alpha, \beta \in N^n\}$  [17]. Из схемы (1) имеем векторы  $\varepsilon^i = (\varepsilon_1^i, \dots, \varepsilon_n^i)$ ,  $i = 1, \dots, l$ . Каждому вектору  $\varepsilon^i$  сопоставим распределение вероятностей на  $N^n$ ,  $\{p_\gamma^i \geq 0, \sum_{\gamma \in N^n} p_\gamma^i = 1, p_{\varepsilon^i}^i = 0\}$ , и набор чисел  $\{\varphi_\alpha^i \geq 0, \alpha \in N^n; \varphi_\alpha^i = 0, \text{ если } \alpha_k < \varepsilon_k^i \text{ при некотором } k\}$  по формуле

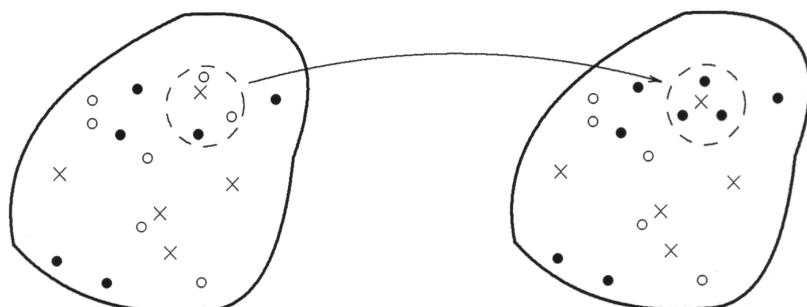
$$\varphi_\alpha^i = \lambda_i \prod_{j=1}^n \alpha_j (\alpha_j - 1) \dots (\alpha_j - \varepsilon_j^i + 1), \quad \alpha \in N^n,\tag{8}$$

где  $\lambda_i > 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ , — коэффициенты пропорциональности. Для марковского процесса  $\xi(t)$  по определению полагаем

$$a_{\alpha\alpha} = - \sum_{i=1}^l \varphi_\alpha^i, \quad a_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^l \varphi_\alpha^i p_{\beta-\alpha+\varepsilon^i}^i, \quad \alpha \neq \beta, \quad \alpha, \beta \in N^n.$$

Процесс  $\xi(t)$  интерпретируется как стохастическая модель системы взаимодействующих частиц  $n$  типов  $T_1, \dots, T_n$ . Событие  $\{\xi(t) = \beta\}$  есть такое состояние системы, в котором в момент времени  $t$  имеется совокупность  $S_\beta$  частиц, состоящая из  $\beta_1$  частиц типа  $T_1, \dots, \beta_n$  частиц типа  $T_n$ :  $S_\beta = \beta_1 T_1 + \dots + \beta_n T_n$ . Зададим  $l$  комплексов взаимодействия частиц  $S_{\varepsilon^i}$ , соответствующих векторам  $\varepsilon^i$ . Через случайное время  $\tau_\beta^i$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_\beta^i \leq t\} = 1 - e^{-\varphi_\beta^i t}$ , происходит взаимодействие комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$ . В этот момент из  $\beta_1$  частиц типа  $T_1$  выбирается  $\varepsilon_1^i$  частиц,  $\dots$ , из  $\beta_n$  частиц типа  $T_n$  выбирается  $\varepsilon_n^i$  частиц и этот комплекс частиц  $S_{\varepsilon^i}$  с распределением вероятностей  $\{p_\gamma^i\}$  заменяется совокупностью  $S_\gamma$  новых частиц. Система из состояния  $S_\beta$ , соответствующего вектору  $\beta$ , переходит в состояние  $S_{\beta-\varepsilon^i+\gamma}$ , соответствующее вектору  $\beta - \varepsilon^i + \gamma$  (см. рис. 1), и далее происходит аналогичная эволюция системы частиц. В состоянии  $S_\beta$  система находится случайное время  $\tau_\beta$ , пока не произойдет какое-либо одно из  $l$  взаимодействий, т.е.  $\tau_\beta = \min(\tau_\beta^1, \dots, \tau_\beta^l)$ . Предполагается, что случайные величины  $\tau_\beta^1, \dots, \tau_\beta^l$  независимы. Тогда  $\mathbf{P}\{\tau_\beta \leq t\} = 1 - e^{-(\varphi_\beta^1 + \dots + \varphi_\beta^l)t}$  и вероятность события, что произошло взаимодействие комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$  при условии, что взаимодействие произошло, равна  $\varphi_\beta^i (\sum_{i=1}^l \varphi_\beta^i)^{-1}$ . Возможные превращения частиц в такой системе представляются схемой взаимодействий (1), где случайный вектор  $\gamma^i = (\gamma_1^i, \dots, \gamma_n^i)$  имеет распределение  $\{p_\gamma^i\}$ ,  $i = 1, \dots, l$ .

Выбор значений (8) для  $\varphi_\beta^i$  объясняется следующим образом. Пусть марковский процесс находится в состоянии  $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ , что соответствует наличию совокупности частиц  $S_\beta = \beta_1 T_1 + \dots + \beta_n T_n$ .



**Рис. 1. Взаимодействие комплекса частиц  $T_1 + 2T_2 + T_3 \rightarrow T_1 + 3T_3$**

Предполагается, что за время  $\Delta t$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ , вероятность  $\varphi_\beta^i \Delta t + o(\Delta t)$  взаимодействия комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$  пропорциональна числу  $C_{\beta_1}^{\varepsilon_1^i}$  сочетаний  $\varepsilon_1^i$  частиц типа  $T_1$  из имеющихся  $\beta_1$  частиц типа  $T_1, \dots$ , пропорциональна числу  $C_{\beta_n}^{\varepsilon_n^i}$  сочетаний  $\varepsilon_n^i$  частиц типа  $T_n$  из имеющихся  $\beta_n$  частиц типа  $T_n$ .

Для введенных марковских процессов уравнения Колмогорова (7) для переходных вероятностей записываются в компактном виде с использованием производящих функций. *Многомерной производящей функцией*  $F_\xi(s_1, \dots, s_n)$ , соответствующей целочисленному случайному вектору  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  с распределением вероятностей  $\{p_\alpha \geq 0, \alpha \in N^n, \sum_{\alpha \in N^n} p_\alpha = 1\}$ , называется функция

$$F_\xi(s_1, \dots, s_n) = \mathbf{M} s_1^{\xi_1} \dots s_n^{\xi_n} = \sum_{\alpha \in N^n} p_\alpha s_1^{\alpha_1} \dots s_n^{\alpha_n}$$

(см. [2]). Далее применяется запись  $s = (s_1, \dots, s_n)$ ,  $s^\alpha = s_1^{\alpha_1} \dots s_n^{\alpha_n}$ . Для вектора используется обозначение 1, если все его компоненты равны единице;  $|s|$  обозначает вектор с компонентами  $|s_i|$ . Математические ожидания компонент случайного вектора вычисляются по формуле

$$\mathbf{M}_{\xi_i} = \left. \frac{\partial F_\xi(s)}{\partial s_i} \right|_{s=1},$$

дисперсия — по формуле

$$\mathbf{D}_{\xi_i} = \left. \frac{\partial^2 F_\xi(s)}{\partial s_i^2} \right|_{s=1} + \left. \frac{\partial F_\xi(s)}{\partial s_i} \right|_{s=1} - \left( \left. \frac{\partial F_\xi(s)}{\partial s_i} \right|_{s=1} \right)^2.$$

Для свертки второй системы дифференциальных уравнений используются производящие функции ( $|s| \leq 1$ )

$$F_\alpha(t; s) = \mathbf{M}(s^{\xi(t)} \mid \xi(0) = \alpha) = \sum_{\beta \in N^n} P_{\alpha\beta}(t) s^\beta, \quad h_i(s) = \sum_{\gamma \in N^n} p_\gamma^i s^\gamma.$$

**Теорема 1** [17]. *Производящая функция переходных вероятностей  $F_\alpha(t; s)$  марковского процесса  $\xi(t)$ , соответствующего схеме взаимодействий (1), удовлетворяет при  $|s| \leq 1$  линейному дифференциальному уравнению в частных производных*

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \sum_{i=1}^l \lambda_i (h_i(s) - s^{\varepsilon^i}) \frac{\partial^{\varepsilon^i} F_\alpha(t; s)}{\partial s^{\varepsilon^i}}, \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha, \quad (9)$$

где  $\lambda_i > 0$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Для свертки первой системы дифференциальных уравнений вводятся экспоненциальные производящие функции и дифференциальные операторы

$$G_\beta(t; z) = \sum_{\alpha \in N^n} \frac{z^\alpha}{\alpha!} P_{\alpha\beta}(t), \quad h_i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) = \sum_{\gamma \in N^n} p_\gamma^i \frac{\partial^{\gamma_1 + \dots + \gamma_n}}{\partial z_1^{\gamma_1} \dots \partial z_n^{\gamma_n}},$$

где  $z = (z_1, \dots, z_n)$ ,  $z^\alpha = z_1^{\alpha_1} \dots z_n^{\alpha_n}$ ,  $\alpha! = \alpha_1! \dots \alpha_n!$ .

**Теорема 2** [17]. Экспоненциальная производящая функция переходных вероятностей  $G_\beta(t; z)$  марковского процесса  $\xi(t)$ , соответствующего схеме взаимодействий (1), удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению в частных производных

$$\frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = \sum_{i=1}^l \lambda_i z^{\varepsilon^i} \left( h_i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{\partial^{\varepsilon^i}}{\partial z^{\varepsilon^i}} \right) G_\beta(t; z), \quad G_\beta(0; z) = \frac{z^\beta}{\beta!}. \quad (10)$$

Функции  $F_\alpha(t; s)$ ,  $h_i(s)$  и  $G_\beta(t; z)$  являются аналитическими в рассматриваемых областях.

**Алгоритм моделирования на ЭВМ марковского процесса  $\xi(t)$ .** При рассмотрении детерминированной модели схемы взаимодействий (1) — нелинейной системы уравнений (6) для  $x_1(t), \dots, x_n(t)$  — применяется метод Рунге–Кутта построения приближенного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

При исследовании вероятностной модели схемы взаимодействий (1) строятся реализации процесса  $\xi(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_n(t))$  методом Монте–Карло. Алгоритм моделирования следующий.

На пользовательский интерфейс вводятся исходные данные:  $[0, T]$  — время моделирования;  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  — начальное состояние;  $\varepsilon^1, \dots, \varepsilon^l$  — комплексы взаимодействия;  $\{p_\gamma^1\}, \dots, \{p_\gamma^l\}$  — распределения вероятностей на  $N^n$ ;  $\lambda_1, \dots, \lambda_l$  — набор чисел.

Используются переменные:  $m$  — номер итерации алгоритма;  $t^{(m)}$  —  $m$ -й момент изменения состояния марковского процесса;  $\beta^{(m)} = (\beta_1^{(m)}, \dots, \beta_n^{(m)})$  — состояние процесса на  $m$ -й итерации;  $\tau = (\tau^1, \dots, \tau^l)$  — вектор случайных времен,  $\tau_{\min}$  — минимальная координата вектора  $\tau$ ;  $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n)$  — вектор скачка, координаты которого вычисляются на  $m$ -й итерации;  $r = \text{random}[0, 1]$  — датчик случайных чисел, равномерно распределенных на отрезке  $[0, 1]$ .

1. Начальные значения переменных:  $m = 0$ ,  $t^{(0)} = 0$ ,  $\beta^{(0)} = \alpha$ .

2. Реализация вектора  $\tau$ . Цикл по  $i = 1, \dots, l$ .

2.1. Если  $\beta_k^{(m)} < \varepsilon_k^i$  при некотором  $k$ ,  $k = 1, \dots, n$ , то  $\tau^i = \infty$ . Иначе  $r := \text{random}[0, 1]$ , вычислить  $\varphi_{\beta^{(m)}}^i$  по формуле (8) и присвоить значение  $\tau_i = -(1/\varphi_{\beta^{(m)}}^i) \ln(1 - r)$ .

3. Определить  $\tau_{\min} = \min(\tau^1, \dots, \tau^l)$ . Пусть  $\tau_{\min} = \tau^i$ . Если  $\tau_{\min} = \infty$ , то конец алгоритма.

4. Задать  $r := \text{random}[0, 1]$ . С помощью  $r$  реализовать случайный вектор  $\gamma$  с распределением  $\{p_\gamma^i\}$ .

5. Присвоить значения переменным:  $t^{(m+1)} = t^{(m)} + \tau_{\min}$ ,  $\beta^{(m+1)} = \beta^{(m)} - \varepsilon^i + \gamma$ .

6. Если  $t^{(m+1)} < T$ , то  $m := m + 1$  и переход к п. 2. Иначе конец алгоритма.

По полученному массиву значений переменных  $\{t^{(m)}, \beta^{(m)}, m = 0, 1, 2, \dots\}$  производится визуализация числовых данных:

- вывод графиков траекторий детерминированной модели  $x_i(t)$  и реализаций стохастической модели  $\xi_i(t)$  в зависимости от  $t$ ,  $t \in [0, T]$ ,  $i = 1, \dots, n$ ;

- вывод графиков траекторий детерминированной модели на фазовой плоскости  $x_i O x_j$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ ,  $i \neq j$ ;

- вывод графиков реализаций  $\xi_i(t), \xi_j(t)$  стохастической модели на фазовой плоскости  $N^2$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ ,  $i \neq j$ .

**З а м е ч а н и е 1.** В п. 2.1 алгоритма используется следующее: если случайная величина  $r$  равномерно распределена на отрезке  $[0, 1]$ , то случайная величина, определенная формулой  $\tau = -(1/\lambda) \ln(1 - r)$ , имеет показательное распределение  $\mathbf{P}\{\tau \leq t\} = 1 - e^{-\lambda t}$ .

**З а м е ч а н и е 2.** В п. 3 алгоритма случай  $\tau_{\min} = \infty$  означает остановку случайного процесса в одном из поглощающих состояний.

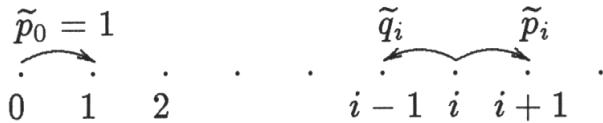
Вычислительные эксперименты проводились в системах Matlab, Maple, Delphi и других с использованием стандартных датчиков случайных чисел. Пример копии экрана ЭВМ с интерфейсом для одной из программ представлен на рис. 7 (см. далее).

**Бимолекулярная схема. Стационарное распределение.** На множестве состояний  $N = \{0, 1, 2, \dots\}$  рассматривается марковский процесс  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , соответствующий схеме взаимодействий

$$2T \rightarrow T, 3T; \quad T \rightarrow 0, 2T; \quad 0 \rightarrow T. \quad (11)$$

Вторая система дифференциальных уравнений Колмогорова для переходных вероятностей при помощи производящей функции  $F_i(t; s) = \sum_{j=0}^{\infty} P_{ij}(t)s^j$ ,  $i \in N$ ,  $|s| \leq 1$ , записывается в виде уравнения в частных производных второго порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial t} &= \lambda_2(p_3^2 s^3 + p_1^2 s - s^2) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \\ &+ \lambda_1(p_2^1 s^2 + p_0^1 - s) \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} + \lambda_0(s - 1)F_i(t; s), \quad F_i(0, s) = s^i, \quad (12) \end{aligned}$$



**Рис. 2. Скачки марковского процесса, соответствующего схеме (11)**

где  $\lambda_2 > 0$ ,  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_0 > 0$ ,  $p_3^2 \geq 0$ ,  $p_1^2 \geq 0$ ,  $p_3^2 + p_1^2 = 1$ ,  $p_2^1 \geq 0$ ,  $p_0^1 \geq 0$ ,  $p_2^1 + p_0^1 = 1$ .

Рассматриваемый случайный процесс является процессом рождения и гибели квадратичного типа [2]. В состоянии  $i$  процесс находится случайное время  $\tau_i$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_i \leq t\} = 1 - e^{-(\lambda_0 + \lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1))t}$ ; переходы процесса  $i \rightarrow i-1$  или  $i \rightarrow i+1$  происходят с вероятностями (см. рис. 2)

$$\tilde{q}_i = \frac{p_0^1 \lambda_1 i + p_1^2 \lambda_2 i(i-1)}{\lambda_0 + \lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1)}, \quad \tilde{p}_i = \frac{\lambda_0 + p_2^1 \lambda_1 i + p_3^2 \lambda_2 i(i-1)}{\lambda_0 + \lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1)}. \quad (13)$$

Имеем детерминированную модель для схемы взаимодействий (11). Дифференцируя уравнение (12) по  $s$ , получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s \partial t} &= \\ &= \lambda_2(3p_3^2 s^2 + p_1^2 - 2s) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \lambda_2(p_3^2 s^3 + p_1^2 s - s^2) \frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} + \\ &\quad + \lambda_1(2p_2^1 s - 1) \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} + \lambda_1(p_2^1 s^2 + p_0^1 - s) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \\ &\quad + \lambda_0 F_i(t; s) + \lambda_0(s-1) \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s}. \end{aligned} \quad (14)$$

Вводя обозначение для среднего числа частиц  $A_i(t) = (\partial F_i(t; s)/\partial s)|_{s=1}$  и учитывая, что  $F_i(t; 1) \equiv 1$ , получаем из (14) равенство

$$\frac{dA_i(t)}{dt} = \lambda_2(2p_3^2 - 1) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} \Big|_{s=1} + \lambda_1(2p_2^1 - 1) A_i(t) + \lambda_0.$$

Считая при  $i \rightarrow \infty$  справедливым “пределенный термодинамический переход” [1], [5]

$$\frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} \Big|_{s=1} \approx \left( \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} \Big|_{s=1} \right)^2,$$

приходим к кинетическому уравнению

$$\dot{x} = \lambda_2(2p_3^2 - 1)x^2 + \lambda_1(2p_2^1 - 1)x + \lambda_0, \quad x(0) = x^0, \quad (15)$$

где  $x(t)$  — количество реагента в момент времени  $t$  для бимолекулярной реакции со схемой (11). В случае  $p_3^2 < 1/2$  уравнение (15) известно

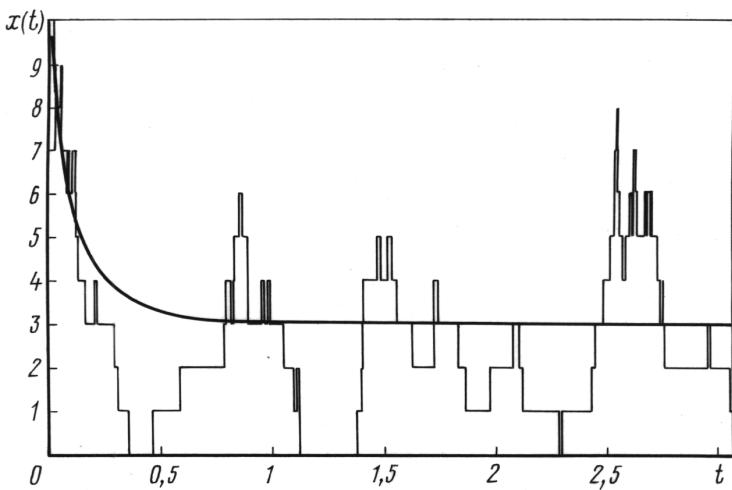


Рис. 3. Детерминированная модель  $x(t)$  и стохастическая реализация  $\xi(t)$

как уравнение популяционной динамики с внутривидовой конкуренцией [11].

На рис. 3 дана траектория детерминированной модели  $x(t)$  при начальном условии  $x(0) = 10$  и приведен пример реализации стохастического процесса  $\xi(t)$  при начальном условии  $\xi(0) = 10$ . Значения параметров составляют:  $\lambda_2 = 2$ ,  $\lambda_1 = 4,5$ ,  $\lambda_0 = 4,5$ ;  $p_3^2 = 1/4$ ,  $p_1^2 = 3/4$ ,  $p_2^1 = 2/3$ ,  $p_0^1 = 1/3$ ;  $T = 3,0688$ .

Схема (11) интерпретируется как система попарно взаимодействующих частиц с притоком частиц извне [4, 5]. При  $p_3^2 < 1/2$  вследствие формул (13) можно показать [2, гл. 7, § 4], что в системе при  $t \rightarrow \infty$  существует стационарное распределение, определяемое распределением вероятностей  $\{q_j, j = 0, 1, 2, \dots\}$ , где  $q_j = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{ij}(t)$ . Выражения для стационарных вероятностей  $q_j$  известны [2], но малопригодны для асимптотического исследования. Уравнение для производящей функции стационарных вероятностей  $f(s) = \sum_{j=0}^{\infty} q_j s^j$ ,  $|s| \leq 1$ , имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda_2(p_3^2 s^3 + p_1^2 s - s^2) \frac{\partial^2 f(s)}{\partial s^2} + \\ + \lambda_1(p_2^1 s^2 + p_0^1 - s) \frac{\partial f(s)}{\partial s} + \lambda_0(s-1)f(s) = 0. \quad (16) \end{aligned}$$

Уравнение (16) сводится к гипергеометрическому уравнению, однако исследовать свойства стационарного распределения, рассматривая функцию  $f(s)$ , не удается [19]. Уравнение (16) при  $\lambda_1 = 0$  и  $p_1^2 = 1$  является частным случаем рассмотренного в работе [19] более общего

уравнения для стационарных вероятностей; установлена асимптотическая нормальность стационарного распределения  $\{q_j\}$  при большой интенсивности  $\lambda_0$  поступления новых частиц.

**Теорема 3** [19]. Рассмотрим схему взаимодействий  $2T \rightarrow T$ ,  $0 \rightarrow T$ . Обозначим  $\eta = \eta(\lambda_0)$  целочисленную случайную величину с распределением  $\{q_j, j = 0, 1, 2, \dots\}$ . Положим  $x \in (-\infty, \infty)$ . Тогда

$$\lim_{\lambda_0 \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left\{ \frac{\eta(\lambda_0) - c_1 \lambda_0}{c_2 \sqrt{\lambda_0}} \leq x \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy,$$

где  $c_1 > 0$ ,  $c_2 > 0$  — некоторые константы.

Для схемы взаимодействий (11) описанным выше методом статистического моделирования получены оценки вероятностей стационарного распределения  $\hat{q}_j$ ,  $j \in N$ , вычисленные как отношение суммарного времени нахождения процесса в состоянии  $j$  ко всему времени моделирования  $T$ :  $\hat{q}_j = \sum_{l=1}^m \tau_j^l / T$ ,  $\tau_j^l$  — время нахождения процесса в состоянии  $j$  при  $l$ -м попадании в это состояние  $\sum_{j=0}^{\infty} \hat{q}_j = 1$ . На рис. 4 приведена гистограмма для  $\{\hat{q}_j\}$  при следующих значениях параметров:

$\lambda_2 = 2$ ,  $\lambda_1 = 15$ ,  $\lambda_0 = 50$ ;  $p_3^2 = 1/4$ ,  $p_1^2 = 3/4$ ,  $p_2^1 = 2/3$ ,  $p_0^1 = 1/3$ ;  $T = 25348$ . На рис. 5 дана гистограмма для  $\{\hat{q}_j\}$  при значениях параметров  $\lambda_2 = 2$ ,  $\lambda_1 = 15$ ,  $\lambda_0 = 500000$ ;  $p_3^2 = 1/4$ ,  $p_1^2 = 3/4$ ,  $p_2^1 = 2/3$ ,  $p_0^1 = 1/3$ ;  $T = 6,5953$ .

Сравнивая гистограммы, приведенные на рис. 4 и рис. 5, видим, что при увеличении параметра  $\lambda_0$  они близки к нормальной плотности распределения; выборочные средние и дисперсия — параметры кривой нормального закона на рис. 5 — вычислены по стандартным формулам. Аналогичные численные результаты получены при других значе-

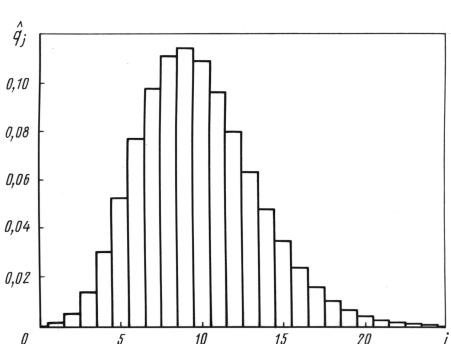


Рис. 4. Гистограмма стационарного распределения при  $\lambda_0 = 50$

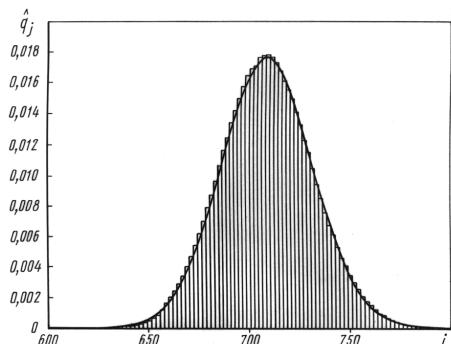


Рис. 5. Гистограмма стационарного распределения при  $\lambda_0 = 500\,000$

ниях параметров. Таким образом, статистическое моделирование марковского процесса  $\xi(t)$  со схемой взаимодействий (11) позволяет сделать предположение об асимптотической нормальности стационарного распределения  $\{q_j\}$  при  $\lambda_0 \rightarrow \infty$ .

Проведенные методом Монте-Карло исследования моделей схем взаимодействий общего вида  $\varepsilon T \rightarrow k_\varepsilon T, \dots, 2T \rightarrow k_2 T, T \rightarrow k_1 T, 0 \rightarrow k_0 T$  также привели к предположению об асимптотической нормальности стационарного распределения при  $\lambda_0 \rightarrow \infty$  и некоторых дополнительных условиях.

**Процесс эпидемии. Финальное распределение.** На множестве состояний  $N^2$  рассматривается марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , соответствующий схеме взаимодействий

$$T_1 + T_2 \rightarrow kT_1, \quad k = 1, 2; \quad T_1 \rightarrow 0. \quad (17)$$

Первое уравнение для производящей функции переходных вероятностей  $G_{(\beta_1, \beta_2)}(t; z_1, z_2)$  в случае процесса  $\xi(t)$  при  $\mu > 0$  имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = & \left[ z_1 z_2 \left( p_2 \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + p_1 \frac{\partial}{\partial z_1} - \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2} \right) + \right. \\ & \left. + \mu z_1 \left( 1 - \frac{\partial}{\partial z_1} \right) \right] G_\beta(t; z) \end{aligned}$$

с начальным условием  $G_\beta(0; z) = z^\beta / \beta!$ . Здесь  $p_1 \geq 0$ ,  $p_2 \geq 0$ ,  $p_1 + p_2 = 1$ . Второе уравнение для производящей функции  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  получает вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = (p_2 s_1^2 + p_1 s_1 - s_1 s_2) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \mu(1 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} \quad (18)$$

с начальным условием  $F_\alpha(0; s) = s^\alpha$ .

Рассматриваемый случайный процесс является двухмерным процессом рождения и гибели квадратичного типа; пример реализации процесса изображен на рис. 6, случай *a*. Событие  $\{\xi(t) = (\beta_1, \beta_2)\}$  означает наличие  $\beta_1$  частиц типа  $T_1$  и  $\beta_2$  частиц типа  $T_2$  в момент времени  $t$ . В вероятностных моделях распространения эпидемий частицы типа  $T_1$  интерпретируются как больные особи, частицы типа  $T_2$  — как здоровые особи, восприимчивые к инфекционному заболеванию. Через случайное время  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^2$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^2 \leq t\} = 1 - e^{-\beta_1 \beta_2 t}$ , происходит контакт больной и здоровой особей. Здоровая особь становится больной и с вероятностью  $p_2$  остается в популяции, и процесс переходит в состояние, соответствующее вектору  $(\beta_1 + 1, \beta_2 - 1)$ , или с вероятностью  $p_1$  удаляется из популяции, и процесс переходит в состояние,

соответствующее вектору  $(\beta_1, \beta_2 - 1)$ .

Кроме того, через случайное время  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^1$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^1 \leq t\} = 1 - e^{-\mu\beta_1 t}$ , больная особь умирает и процесс переходит в состояние, соответствующее вектору  $(\beta_1 - 1, \beta_2)$ . Случайные величины  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^1$ ,  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^2$  независимы; в состоянии  $(\beta_1, \beta_2)$  процесс находится случайное время  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)} = \min(\tau_{(\beta_1, \beta_2)}^1, \tau_{(\beta_1, \beta_2)}^2)$ . Случай  $p_1 = 1$  называется моделью эпидемии Вейса [13], а случай  $p_2 = 1$  называется моделью эпидемии Бартлетта–Мак-Кендрика [14].

Чтобы получить детерминированное приближение для процесса  $\xi(t)$ , соответствующего схеме взаимодействий (17), дифференцируем второе уравнение (18) по  $s_1$  и  $s_2$ ; получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial t} &= (2p_2 s_1 + p_1 - s_2) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \\ &+ (p_2 s_1^2 + p_1 s_1 - s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} - \mu \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \mu(1 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2 \partial t} &= -s_1 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \\ &+ (p_2 s_1^2 + p_1 s_1 - s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2^2} + \mu(1 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2}. \end{aligned}$$

Подставив  $s = 1$  и используя обозначения для среднего числа частиц типа  $T_i$ ,  $A_i(t) = (\partial F_\alpha(t; s)/\partial s_i)|_{s=1}$ ,  $i = 1, 2$ , получаем равенства

$$\begin{aligned} \frac{dA_1(t)}{dt} &= p_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1} - \mu A_1(t), \\ \frac{dA_2(t)}{dt} &= -\frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1}. \end{aligned} \tag{19}$$

Предположим, что при большом начальном числе частиц  $\alpha = (n\alpha_1, n\alpha_2)$ ,  $n \rightarrow \infty$ , выполнено условие “пределного перехода” [1]

$$\frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1} \approx \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} \Big|_{s=1} \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2} \Big|_{s=1};$$

тогда из (19) приходим к системе дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_1 = p_2 x_1 x_2 - \mu x_1, \quad \dot{x}_2 = -x_1 x_2, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0,$$

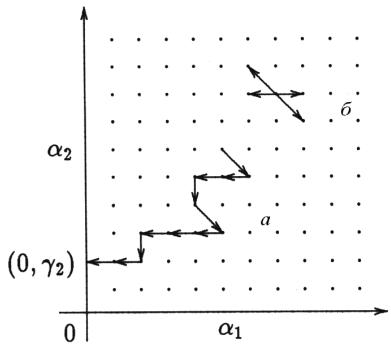


Рис. 6. Скачки марковских процессов на  $N^2$

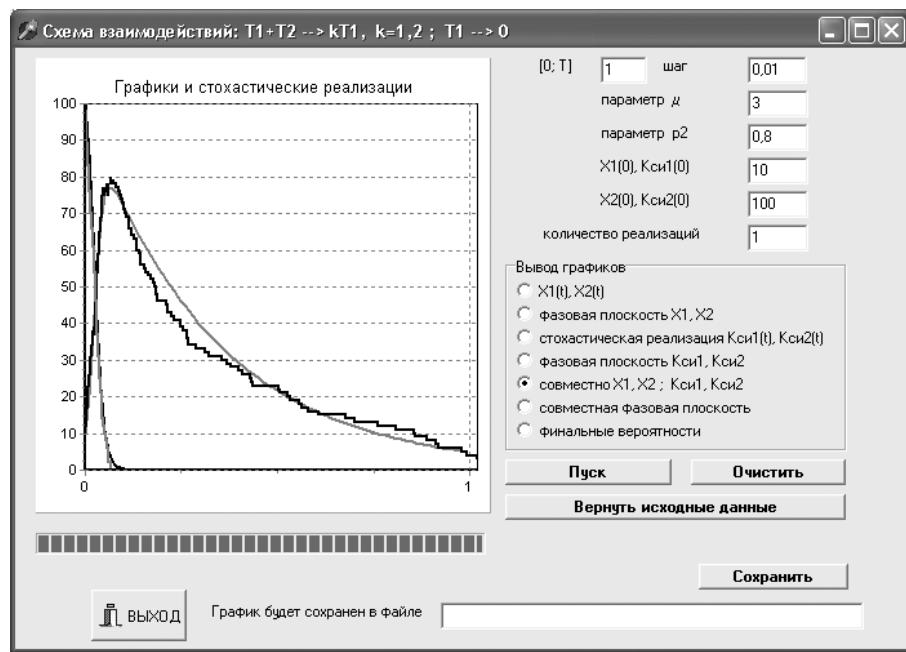


Рис. 7. Детерминированная модель  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  и стохастические реализации  $\xi_1(t)$ ,  $\xi_2(t)$

где  $x_1(t)$  — количество больных особей,  $x_2(t)$  — количество особей, восприимчивых к инфекционному заболеванию в детерминированной модели эпидемии. Взаимосвязь вероятностного и детерминистического описаний для различных схем эпидемий рассматривалась в [12, 13] и др.

На рис. 7 дана траектория детерминированной модели  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  при начальных условиях  $x_1(0) = 10$ ,  $x_2(0) = 100$ , и приведен пример реализации стохастического процесса эпидемии  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$  при начальных условиях  $(\xi_1(0), \xi_2(0)) = (10, 100)$ . Значения параметров следующие:  $\mu = 3$ ,  $p_2 = 0,8$ ,  $T = 1$ .

С вероятностью, равной 1, процесс  $\xi(t)$  остановится в одном из поглощающих состояний  $(0, \gamma_2)$ ,  $\gamma_2 = 0, 1, 2, \dots$  (остались только здоровые особи). Для финальных вероятностей  $q_{(0, \gamma_2)}^{(\alpha_1, \alpha_2)} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{(0, \gamma_2)}^{(\alpha_1, \alpha_2)}(t)$  вводим производящие функции ( $|s| \leq 1$ )

$$f_{(\alpha_1, \alpha_2)}(s) = \sum_{\gamma_2=0}^{\infty} q_{(0, \gamma_2)}^{(\alpha_1, \alpha_2)} s^{\gamma_2}, \quad g(z_1, z_2; s) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2=0}^{\infty} \frac{z_1^{\alpha_1} z_2^{\alpha_2}}{\alpha_1! \alpha_2!} f_{(\alpha_1, \alpha_2)}(s).$$

Стационарное первое уравнение Колмогорова получает вид

$$\left[ z_2 \left( p_2 \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + p_1 \frac{\partial}{\partial z_1} - \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2} \right) + \mu \left( 1 - \frac{\partial}{\partial z_1} \right) \right] g(z_1, z_2; s) = 0 \quad (20)$$

с граничными условиями  $g(0, z_2; s) = e^{z_2 s}$ ,  $g(z_1, 0; s) = e^{z_1}$ . Решение методом Римана задачи Дарбу–Пикара для гиперболического уравнения (20) дает в случае  $p_1 = 1$  [16] при  $\alpha_1 \neq 0$  выражение для производящей функции

$$f_{(\alpha_1, \alpha_2)}(s) = \frac{1}{(\alpha_1 - 1)!} \int_0^\infty x^{\alpha_1 - 1} (1 - e^{-x/\mu} + s e^{-x/\mu})^{\alpha_2} e^{-x} dx. \quad (21)$$

Пусть  $\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)}$  — число финальных частиц типа  $T_2$ , которые останутся после остановки процесса. Производящая функция (21) задает распределение случайной величины  $\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)}$  на состояниях  $\{(0, \gamma_2), \gamma_2 = 0, \dots, \alpha_2\}$ . Из (21) получаем для среднего и дисперсии:  $\mathbf{M}\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)} = c_1 \alpha_2$ ,  $\mathbf{D}\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)} \sim c_2 \alpha_2^2$  при  $\alpha_2 \rightarrow \infty$ , где  $c_1 > 0$ ,  $c_2 > 0$  — некоторые константы. Случай  $\alpha_2 \rightarrow \infty$  представляет интерес для приложений: в начальный момент времени имелось большое число здоровых особей и некоторое число больных особей. Из (21) стандартным методом характеристических функций устанавливается

**Теорема 4** [16]. *Рассмотрим марковский процесс, соответствующий схеме взаимодействий  $T_1 + T_2 \rightarrow T_1$ ,  $T_1 \rightarrow 0$ . Положим  $x \in [0, 1]$ . Тогда*

$$\lim_{\alpha_2 \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left\{ \frac{\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)}}{\alpha_2} \leq x \right\} = F^{(\alpha_1)}(x), \quad (22)$$

где  $F^{(\alpha_1)}(x) = x^\mu \sum_{n=0}^{\alpha_1-1} (-\mu \ln x)^n / n!$ .

Предельные соотношения типа (22) называют “пороговыми теоремами”, они используются для установления численного значения так называемого “эпидемического порога” при распространении инфекционных заболеваний [12].

Методом Монте-Карло для схемы взаимодействий (17) построены эмпирические функции распределения  $\widehat{F}_n^{(\alpha_1, \alpha_2)}(x)$  по выборкам, состоящим из  $n$  реализаций случайной величины  $\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)} / \alpha_2$  (линейная по  $\alpha_2$  нормировка). Статистические испытания показали сходимость функции  $\widehat{F}_n^{(\alpha_1, \alpha_2)}(x)$  к некоторой функции распределения при увеличении  $n$ .

На рис. 8, случай 1, приведен график функции  $F^{(3)}(x) = x^\mu (1 - \mu \ln x + \mu^2 \ln^2 x / 2)$  при  $\mu = 40$ . При значениях параметров  $\mu = 40$ ,  $p_2 = 0$  и начальных условиях  $\alpha_1 = 3$ ,  $\alpha_2 = 200$  было проведено  $n = 300$  испытаний. Эмпирическая функция распределения  $\widehat{F}_{300}^{(3,200)}(x)$ , представленная на рис. 8, случай 2, близка, в соответствии с теоремой 4, к функции распределения  $F^{(3)}(x)$ . Также на рис. 8 представлены графики функции  $\widehat{F}_{300}^{(3,200)}(x)$  при значениях: 3 —  $p_2 = 0,3$ ; 4 —  $p_2 = 0,5$ ; 5 —  $p_2 = 0,7$  и  $\mu = 40$ .

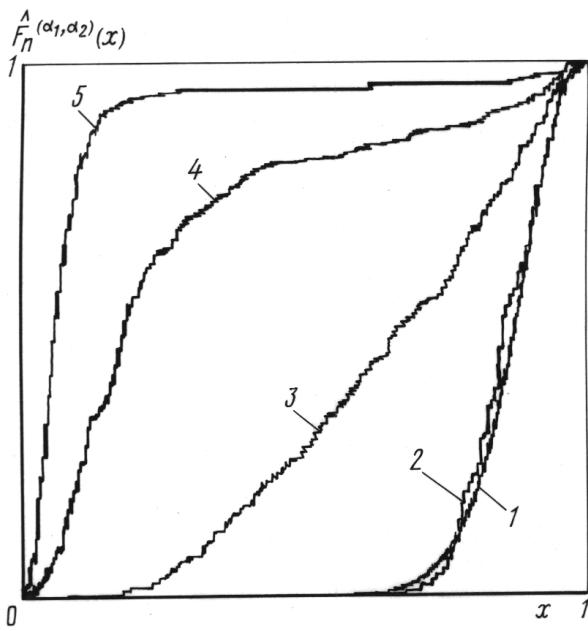


Рис. 8. Эмпирическая функция распределения

Разработанная программа моделирования (см. рис. 7) позволила провести численные эксперименты при различных значениях параметров  $\mu$ ,  $p_2$  и начальных условиях  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ . Полученные эмпирические функции распределения при больших значениях  $\alpha_2$  аналогичны представленным на рис. 7 и позволяют сделать следующий вывод. Поскольку при стремлении параметра  $p_2$  к единице эмпирическая функция распределения сходится к ступенчатой с единственным разрывом в нуле, то в случае  $p_2 = 1$  имеет место нормировка для числа финальных частиц, отличная от линейной. Таким образом, в рассматривающей стохастической эпидемической модели случай удаления  $p_1 > 0$  и случай неудаления  $p_1 = 0$  из популяции зараженных особей имеют качественное различие. В первом случае число выживших здоровых особей примерно пропорционально начальному их числу, а во втором случае число выживших здоровых особей — меньше.

Решение задачи о нахождении нормировки для  $\eta^{(\alpha_1, \alpha_2)}$  в случае  $p_2 = 1$  и вывод предельной теоремы для числа финальных частиц возможны аналитическими методами через построение решения уравнения (20) [18].

**Брюсселятор. Стационарное распределение.** Рассматривается марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , на множестве состояний  $N^2$ , соответствующий схеме взаимодействий [6]

$$2T_1 + T_2 \rightarrow 3T_1; \quad T_1 \rightarrow 0, T_2; \quad 0 \rightarrow T_1. \quad (23)$$

Второе уравнение Колмогорова для производящей функции переходных вероятностей  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} &= \lambda_2(s_1^3 - s_1^2 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial^2 s_1 \partial s_2} + \\ &+ \lambda_1(p_2 s_2 + p_0 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_0(s_1 - 1) F_\alpha(t; s), \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $\lambda_2 > 0$ ,  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_0 > 0$ ,  $p_0 \geq 0$ ,  $p_2 \geq 0$ ,  $p_0 + p_2 = 1$ . Рассматриваемый марковский процесс является двумерным процессом рождения и гибели кубического типа; возможные скачки процесса изображены на рис. 6, случай б.

Детерминированная модель брюсселятора выводится аналогично, как в предшествующем пункте; из уравнения (24) приходим к дифференциальным уравнениям

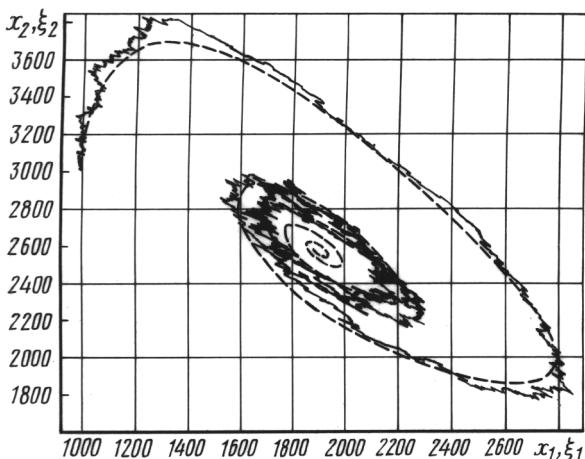
$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \lambda_2 x_1^2 x_2 - \lambda_1 x_1 + \lambda_0, \quad \dot{x}_2 = -\lambda_2 x_1^2 x_2 + \lambda_1 p_2 x_1, \\ x_1(0) &= x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0, \end{aligned} \quad (25)$$

где  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  — количество реагентов в момент времени  $t$  для реакции с кинетической схемой (23). Исследованиям поведения решений системы уравнений (25) посвящена обширная литература (см., например, [6, 7]). Для приложений важны случаи поведения траекторий, представленные на рис. 9 (устойчивый фокус) и рис. 11 (пределный цикл).

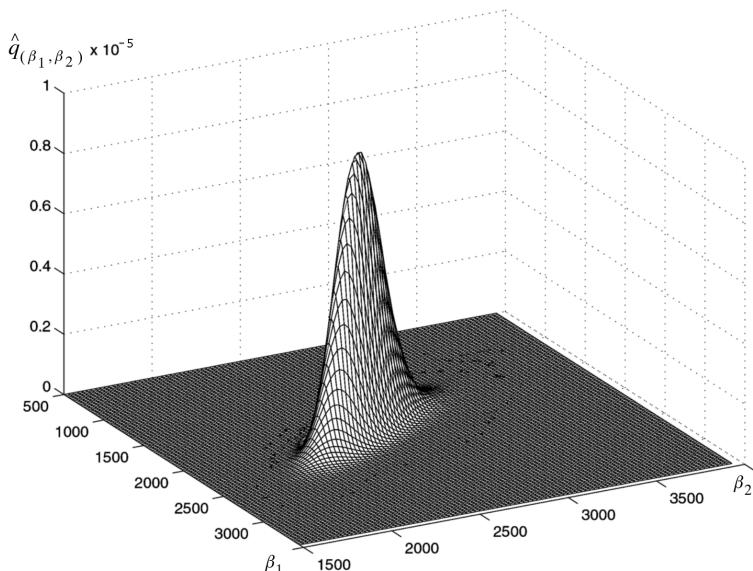
На рис. 9 дана траектория детерминированной модели  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  на фазовой плоскости  $x_1Ox_2$  при начальных условиях  $x_1(0) = 1000$ ,  $x_2(0) = 3000$  и приведен пример реализации стохастического процесса  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$  при начальных условиях  $(\xi_1(0), \xi_2(0)) = (1000, 3000)$ . Значения параметров составляют  $\lambda_2 = 0,000001$ ,  $\lambda_1 = 7$ ,  $\lambda_0 = 4000$ ,  $p_2 = 0,7$ ,  $T = 10$ .

На рис. 11 дана траектория детерминированной модели  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  на фазовой плоскости  $x_1Ox_2$  при начальных условиях  $x_1(0) = 1000$ ,  $x_2(0) = 3000$  и приведен пример реализации стохастического процесса  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$  при начальных условиях  $(\xi_1(0), \xi_2(0)) = (1000, 3000)$ . Значения параметров составляют  $\lambda_2 = 0,000001$ ,  $\lambda_1 = 8$ ,  $\lambda_0 = 4000$ ,  $p_2 = 0,7$ ,  $T = 10$ .

Схема (23) интерпретируется как открытая система частиц с тройными взаимодействиями. При  $t \rightarrow \infty$  существует стационарное распределение, характеризуемое распределением вероятностей  $\{q_{(\beta_1, \beta_2)}, (\beta_1, \beta_2) \in N^2\}$ , где  $q_{(\beta_1, \beta_2)} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{(\beta_1, \beta_2)}^{(\alpha_1, \alpha_2)}(t)$ .



**Рис. 9. Детерминированная и стохастическая реализации в случае устойчивого фокуса**



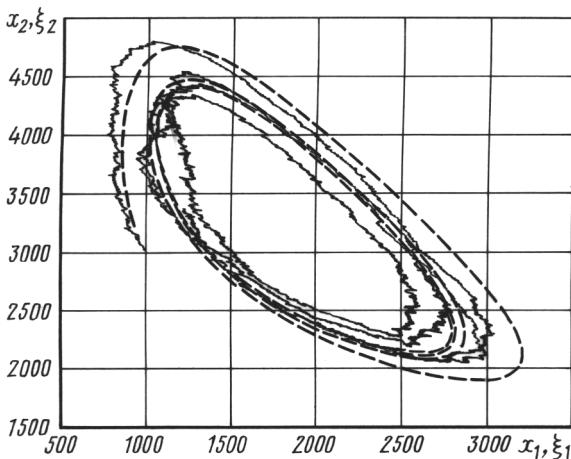
**Рис. 10. Двумерная гистограмма стационарного распределения при  $\lambda_1 = 7$**

Уравнение для производящей функции стационарных вероятностей

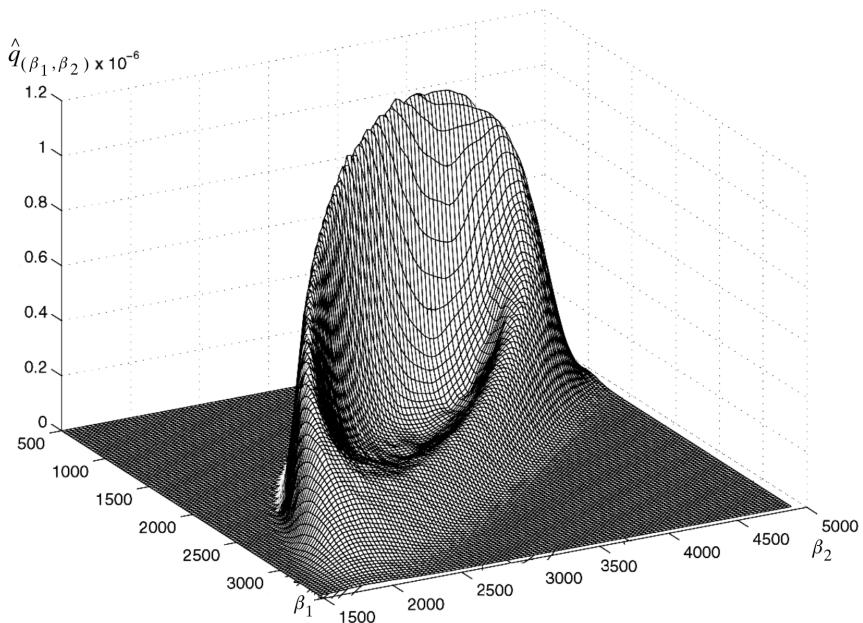
$$f(s_1, s_2) = \sum_{\beta_1, \beta_2=0}^{\infty} q_{(\beta_1, \beta_2)} s_1^{\beta_1} s_2^{\beta_2}, \quad |s_1| \leq 1, \quad |s_2| \leq 1,$$

имеет вид

$$\begin{aligned} \lambda_2(s_1^3 - s_1^2 s_2) \frac{\partial^3 f(s)}{\partial^2 s_1 \partial s_2} + \\ + \lambda_1(p_2 s_2 + p_0 - s_1) \frac{\partial f(s)}{\partial s_1} + \lambda_0(s_1 - 1) f(s) = 0. \quad (26) \end{aligned}$$



**Рис. 11. Детерминированная и стохастическая реализации в случае предельного цикла**



**Рис. 12. Двумерная гистограмма стационарного распределения при  $\lambda_1 = 8$**

Исследование свойств стационарного распределения путем решения уравнения третьего порядка (26) аналитическими методами затруднительно. Также не представляет интереса решение линейного уравнения в частных производных (26) сеточными методами, так как приближенное решение не дает возможности определить коэффициенты разложения функции  $f(s_1, s_2)$  в степенной ряд в нуле, т.е. искомые стационарные вероятности.

Методом статистического моделирования для схемы (23) получены

оценки вероятностей стационарного распределения  $\widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)}$ ,  $(\beta_1, \beta_2) \in N^2$ , вычисленные как отношение суммарного времени нахождения процесса в состоянии  $(\beta_1, \beta_2)$  ко всему времени моделирования  $T$ :

$$\widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)} = \sum_{l=1}^m \tau_{(\beta_1, \beta_2)}^l / T, \quad \tau_{(\beta_1, \beta_2)}^l — время нахождения процесса в состоянии (\beta_1, \beta_2) при l-м попадании в это состояние, \quad \sum_{\beta_1, \beta_2=0}^{\infty} \widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)} = 1.$$

На рис. 10 приведена гистограмма для  $\widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)}$  при значениях параметров  $\lambda_2 = 0,000001$ ,  $\lambda_1 = 7$ ,  $\lambda_0 = 4000$ ;  $p_2 = 0,7$ ;  $T = 50000$ . На рис. 12 дана гистограмма для  $\widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)}$  при значениях параметров  $\lambda_2 = 0,000001$ ,  $\lambda_1 = 8$ ,  $\lambda_0 = 4000$ ;  $p_2 = 0,7$ ;  $T = 50000$ . Возможность получения “кратерообразной поверхности” для стационарных вероятностей состояний обсуждается в работе [7] в связи с приложениями схемы (23) в теории диссипативных структур.

Статистическое моделирование марковского процесса  $\xi(t)$  со схемой взаимодействий (23) при различных значениях параметров приводит к выводу, что стохастические реализации близки к детерминированным траекториям лишь при значениях параметров из очень небольшой области по отношению ко всему пространству параметров. В большинстве случаев стохастические реализации брюсселятора носят вырожденный характер, так как большую часть времени случайный процесс проводит в точках около границы множества  $N^2$ . Варианты реализаций, близкие к представленным на рис. 9 и рис. 11, возможны при значениях параметров  $\lambda_i$ , значительно отличающихся по порядку. В некоторых случаях гистограмма стационарного распределения  $\widehat{q}_{(\beta_1, \beta_2)}$ ,  $(\beta_1, \beta_2) \in N^2$ , оказывается близкой к плотности распределения двумерного нормального закона, что проверялось с помощью статистических критериев согласия. Детальному исследованию поведения стохастической модели брюсселятора и стационарного распределения в зависимости от параметров будет посвящена отдельная публикация.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Леонтьев М. А. Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1935. – Т. 5, вып. 3–4. – С. 211–231.
- Гихман И. И., Скороход А. В. Введение в теорию случайных процессов. – М.: Наука, 1977. – 568 с.
- Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. Изд. 2-е. – М.: Наука, 1982.
- Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках. – М.: Наука, 1986. – 528 с.

5. Ван Кампен Н. Г. Стохастические процессы в физике и химии. – М.: Высшая школа, 1990. – 376 с.
6. Гленсдорф П., Прогожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. Изд. 2-е. – М.: УРСС, 2003. – 280 с.
7. Малек-Мансур М., Николис Г., Прогожин И. Неравновесные фазовые переходы в химических системах // Термодинамика и кинетика биологических процессов. – М.: Наука, 1980. – С. 59–83.
8. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. – М.: Высшая школа, 1974. – 400 с.
9. McQuarrie D. A., Jachimowcki C. J., Russell M. E. Kinetic of small system. II // J. Chim. Phys. – 1964. – V. 40, № 10. – P. 2914–2921.
10. Gillespie D. T. Approximate accelerated stochastic simulation of chemically reacting systems // J. Chim. Phys. – 2001. – V. 115, № 4. – P. 1716–1733.
11. Базыкин А. Д. Математическая биофизика взаимодействующих популяций. – М.: Наука, 1985. – 182 с.
12. Бейли Н. Математика в биологии и медицине. – М.: Мир, 1970. – 328 с.
13. Weiss G. On the spread of epidemics by carriers // Biometrics. – 1965. – V. 21, № 2. – P. 481–490.
14. Эпидемии и процессы // Математическая энциклопедия. Т. 5. – М.: Советская энциклопедия, 1985. – Кол. 1008.
15. Пичугин Б. Ю., Перецов Н. В. Статистическое моделирование популяций взаимодействующих частиц с произвольным распределением времени жизни // Матем. структуры и моделирование. – 2001. – Вып. 7. – С. 67–78.
16. Калинкин А. В. Финальные вероятности ветвящегося процесса с взаимодействием частиц и процесс эпидемии // Теория вероятн. и ее примен. – 1998. – Т. 43, вып. 4. – С. 773–780.
17. Калинкин А. В. Марковские ветвящиеся процессы с взаимодействием // Усп. матем. наук. – 2002. – Т. 57, вып. 2. – С. 23–84.
18. Калинкин А. В. Функция Римана для стационарного уравнения марковской эпидемии // Обозрение прикл. и промышл. математики. – 2003. – Т. 10, вып. 2. – С. 502.
19. Ланге А. М. Стационарное распределение в открытой стохастической системе с парными взаимодействиями частиц // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. – 2005. – № 1. – С. 3–22.
20. Калинкин А. В., Шапошников А. А. Марковский процесс “хищник-жертва” и результаты экспериментов Г.Ф.Гаузе // Обозр. прикл. и промышл. матем. – 2005. – Т. 12 (В печати.).

Статья поступила в редакцию 10.03.2005

Александр Вячеславович Калинкин родился в 1956 г., окончил в 1978 г. МГУ им. М.В.Ломоносова. Д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры “Высшая математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 40 научных работ в области теории вероятностей и математического моделирования.

A.V. Kalinkin (b. 1956) graduated from the Moscow State University n.a. M.V. Lomonosov in 1978. D. Sc. (Phys.-Math.), professor of “Higher Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 40 publications in the field of theory of probabilities and mathematical simulation.





Андрей Михайлович Ланге родился в 1979 г., окончил в 2002 г. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Ассистент кафедры “Высшая математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 3 научных работ в области математического моделирования.

A.M. Lange (b. 1979) graduated from the Bauman Moscow State Technical University in 2002. Assistant of “Higher Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 3 publications in the field of mathematical simulation.



Антон Вячеславович Мастихин родился в 1962 г., окончил в 1983 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Старший преподаватель кафедры “Высшая математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 4 научных работ.

A.V. Mastikhin (b. 1962) graduated from the Moscow State University n. a. M.V. Lomonosov in 1983. Senior teacher of “Higher Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of 4 publications.

Андрей Анатольевич Шапошников родился в 1980 г., окончил в 2004 г. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Аспирант кафедры “Высшая математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Специализируется в области статистического моделирования.

A.A. Shaposhnikov (b. 1980) graduated from the Bauman Moscow State Technical University in 2004. Post-graduate of “Higher Mathematics” department of the Bauman Moscow State Technical University. Specializes in the field of statistic simulation.

### **В издательстве МГТУ им. Н.Э. Баумана вышла книга**

#### **ТЕПЛОТЕХНИКА**

Учебник для вузов / А.М. Архаров, И.А. Архаров, В.Л. Бондаренко, Б.П. Борисов и др.; Под общ. ред. А.М. Архарова, В.Н. Афанасьева. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. – 712 с.: ил.

Во втором, исправленном и дополненном издании (1-е изд. - под ред. В.И. Крутова 1986 г.) учебника, имеющего энциклопедический характер, рассмотрены основы термодинамики и теории теплообмена, топливо и его горение, схемы и элементы расчета котлов, промышленных печей, паро- и газотурбинных установок, холодильных установок и компрессоров, двигателей внутреннего и внешнего сгорания, ракетных и авиационных двигателей, атомных и плазменных энергоустановок. Приведены расчеты систем отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха. Кроме того, включены важные разделы, касающиеся космических энергоустановок, теплообменных аппаратов, гидромашин, фотонных энергосистем, криогенных систем для охлаждения газов, разделения воздуха, получения неона, криптона и ксенона, термоэлектрических и термомагнитных низкотемпературных установок, а также систем регулирования. К работе над новыми разделами были привлечены известные специалисты. Большое внимание удалено вопросам экологии и защиты окружающей среды.

Содержание учебника соответствует курсам лекций, которые авторы читают в МГТУ им. Н.Э. Баумана и других крупных российских и зарубежных университетах.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению “Энергомашностроение”

По вопросам приобретения обращаться по тел. 263-60-45;  
e-mail: press@bmstu.ru