

Московский государственный технический университет  
имени Н.Э. Баумана

А.В. Калинин

# СХЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ: ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ И СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

*Методические указания к выполнению типового расчета по курсу  
«Дополнительные главы теории случайных процессов»*

Москва  
Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана  
2009

УДК 519.21+531.19  
ББК 22.171  
К172

Рецензент *И.К. Волков*

**Калинкин А.В.**

Схемы взаимодействий: детерминированные и стохастические модели: Метод. указания к выполнению типового расчета по курсу «Дополнительные главы теории случайных процессов». – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. – 44 с.: ил.

**К172**

Рассмотрены кинетические схемы, используемые для задания систем с взаимодействиями и превращениями составляющих их элементов. Даны примеры применения аналитических методов для марковских моделей таких систем с дискретным фазовым пространством и непрерывным временем. Приведены варианты задач для типового расчета. Предложены темы курсовых работ.

Для студентов 5-го курса, обучающихся по специальности «Прикладная математика».

УДК 519.21+531.19  
ББК 22.171

В методических указаниях изложены основы аналитического метода исследования класса дискретных стохастических моделей, задаваемых схемами взаимодействий. Базой этих рассмотрений являются дифференциальные уравнения Колмогорова для переходных вероятностей марковских процессов со счетным множеством состояний. Теоретические сведения, необходимые при выполнении типового расчета, даны в работе [14], где приведены, в частности, доказательства теорем 1 и 2.

## 1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

### 1.1. Детерминированные модели для схем взаимодействий

В различных областях естествознания и техники системы с взаимодействиями и превращениями составляющих их элементов задаются схемами взаимодействий. В химической кинетике для мономолекулярной реакции используется запись  $T_1 \rightarrow T_2$ . При детерминированном подходе реакцию описывают 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 [25] ( $\lambda > 0$  — константа скорости реакции)

$$\dot{x}_1 = -\lambda x_1; \quad \dot{x}_2 = \lambda x_1, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = x_2^0. \quad (1)$$

Для бимолекулярной реакции  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$  введем обозначения  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$  — количества реагентов типа  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ . Полагают

справедливым закон действующих масс [25]

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\lambda x_1 x_2; & \dot{x}_2 &= -\lambda x_1 x_2; & \dot{x}_3 &= \lambda x_1 x_2; \\ x_1(0) &= x_1^0; & x_2(0) &= x_2^0; & x_3(0) &= x_3^0. \end{aligned} \quad (2)$$

В ядерной физике для цепной реакции размножения нейтронов применяют запись  $T \rightarrow kT$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Уравнение детерминированной модели имеет вид [1, 24] ( $-\infty < \lambda < \infty$ )

$$\dot{x} = \lambda x; \quad x(0) = x^0. \quad (3)$$

Динамику экологической системы хищник — жертва описывают количеством  $x_1(t)$  «хищников» и количеством  $x_2(t)$  «жертв». Схеме взаимодействий  $T_1 + T_2 \rightarrow 2T_1$ ;  $T_1 \rightarrow 0$ ;  $T_2 \rightarrow 2T_2$  [6, 9, 21] соответствует система дифференциальных уравнений ( $\lambda > 0$ ,  $\mu > 0$ ,  $\rho > 0$ )

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\mu x_1 + \lambda x_1 x_2; & \dot{x}_2 &= \rho x_2 - \lambda x_1 x_2; \\ x_1(0) &= x_1^0; & x_2(0) &= x_2^0. \end{aligned} \quad (4)$$

В теории надежности запись  $T \rightarrow 0$  означает выход из строя элементов технических систем [19]. В теории массового обслуживания схема  $0 \rightarrow T$ ;  $T \rightarrow 0$  интерпретируется как дисциплина обслуживания  $M/M/\infty$  [3] (см. разд. 4.3). Общая схема взаимодействий, в которой участвуют элементы типов  $T_1, \dots, T_n$ , имеет вид

$$\left\{ \begin{aligned} \varepsilon_1^1 T_1 + \varepsilon_2^1 T_2 + \dots + \varepsilon_n^1 T_n &\rightarrow \gamma_1^1 T_1 + \gamma_2^1 T_2 + \dots + \gamma_n^1 T_n; \\ \varepsilon_1^i T_1 + \varepsilon_2^i T_2 + \dots + \varepsilon_n^i T_n &\rightarrow \gamma_1^i T_1 + \gamma_2^i T_2 + \dots + \gamma_n^i T_n; \\ \varepsilon_1^l T_1 + \varepsilon_2^l T_2 + \dots + \varepsilon_n^l T_n &\rightarrow \gamma_1^l T_1 + \gamma_2^l T_2 + \dots + \gamma_n^l T_n, \end{aligned} \right. \quad (5)$$

где  $\varepsilon_j^i$ ,  $\gamma_j^i$ ,  $i = 1, \dots, l$ ,  $j = 1, \dots, n$  — целые неотрицательные числа. Некоторые виды схем имеют специальные названия [25]: последовательная  $T_1 \rightarrow \dots \rightarrow T_n$ ; 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  $T_1 \rightarrow T_2, T_2 \rightarrow T_3, T_4$ ; двухсторонняя  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$ ;  $T_3 \rightarrow T_1 + T_2$ ; простая циклическая  $T_1 \rightarrow \dots \rightarrow T_n \rightarrow T_1$ ; катализ  $T_1 + T_2 \rightarrow T_2 + T_3$ ;

автокатализ  $T \rightarrow 2T$ ; цепная и др. В схеме (5) может быть учтено поступление элементов извне (открытая система) и образование конечных элементов (финального продукта).

При детерминированном подходе к рассмотрению схемы (5) вводят количество  $x_i(t)$  элементов типа  $T_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Функции  $x_1(t), \dots, x_n(t)$  удовлетворяют системе нелинейных дифференциальных уравнений (кинетические уравнения)

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

с начальными условиями  $x_1(0) = x_1^0, \dots, x_n(0) = x_n^0$ . Вид функций  $f_1, \dots, f_n$  определяют по схеме (5) исходя из законов формальной кинетики [25] на основе простейших случаев (1), (2), (3). В прикладных задачах функции  $f_1, \dots, f_n$ , как правило, являются многочленами степени не выше третьей.

## 1.2. Марковские процессы с дискретными состояниями. 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 следующие обозначения:  $\gamma = \alpha - \beta$ , если  $\gamma_1 = \alpha_1 - \beta_1, \dots, \gamma_n = \alpha_n - \beta_n$ ;  $\alpha \geq \beta$ , если  $\alpha_1 \geq \beta_1, \dots, \alpha_n \geq \beta_n$  и т. п.;  $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ . Для однородного во времени марковского процесса  $\xi(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_n(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , на множестве состояний  $N^n$ , обозначим переходные вероятности

$$P_{\alpha\beta}(t) = \mathbf{P}\{\xi(t) = \beta \mid \xi(0) = \alpha\}, \alpha, \beta \in N^n.$$

Такой случайный процесс задается плотностями переходных вероятностей  $a_{\alpha\beta} = (dP_{\alpha\beta}(t)/dt)|_{t=0+}$ . Далее всегда будем считать, что

выполнены условия, при которых переходные вероятности удовлетворяют первой (обратной) и второй (прямой) системам дифференциальных уравнений Колмогорова [7]

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

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

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

Состояние  $\alpha$  называют поглощающим, если  $a_{\alpha\alpha} = 0$ .

Марковский процесс  $\xi(t)$  называется процессом рождения и гибели, если из состояния  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  процесс может совершить скачок только в состояние  $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ , такое, что  $|\alpha_i - \gamma_i| \leq 1$  для всех  $i = 1, \dots, n$  [5, 7]. Если «вложенная цепь Маркова» [7] для процесса  $\xi(t)$  является случайным блужданием на  $N^n$ , то определяют типы процессов рождения и гибели: линейный, квадратичный и т. п., в зависимости от вида функции  $a_{\alpha\alpha} = \varphi(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ .

Из множества  $M$  всех марковских процессов на фазовом пространстве  $N^n$  выделяют специальные классы процессов  $B_2$  и  $B_1$ :

$$M \supset B_2 \supset B_1,$$

для каждого класса указывают конкретный вид плотностей переходных вероятностей  $\{a_{\alpha\beta}, \alpha, \beta \in N^n\}$  [14]. В данных методических указаниях вероятностной моделью для схемы взаимодействий (5) считается марковский процесс одного из классов  $B_2, B_1$ ; более общие вероятностные модели определены в [14].

## 2. МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ КЛАССА $B_2$

### 2.1. Стохастические модели для схем взаимодействий

Из схемы взаимодействий (5) имеем векторы  $\varepsilon^i = (\varepsilon_1^i, \dots, \varepsilon_n^i) \in N^n$ ,  $i = 1, \dots, l$ . 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  $\{\varphi_\alpha^i \geq 0, \alpha \in N^n; \varphi_\alpha^i = 0, \text{ если при некотором } k \alpha_k < \varepsilon_k^i\}$  по следующей формуле:

$$\varphi_\alpha^i = \lambda_i \prod_{j=1}^n \alpha_j (\alpha_j - 1) \dots (\alpha_j - \varepsilon_j^i + 1), \quad \alpha \in N^n, \quad (6)$$

где  $\lambda_i > 0$  — коэффициенты пропорциональности,  $i = 1, \dots, n$ . Для марковского процесса  $\xi(t)$  класса  $B_2$  по определению полагаем [13]

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

Процесс  $\xi(t)$  интерпретируется как стохастическая модель системы взаимодействующих частиц  $n$  типов  $T_1, \dots, T_n$ . Событие  $\{\xi(t) = \alpha\}$  есть такое состояние системы, в котором в момент времени  $t$  имеется совокупность  $S_\alpha$  частиц, состоящая из  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1, \dots, \alpha_n$  частиц типа  $T_n$ :

$$S_\alpha = \alpha_1 T_1 + \dots + \alpha_n T_n.$$

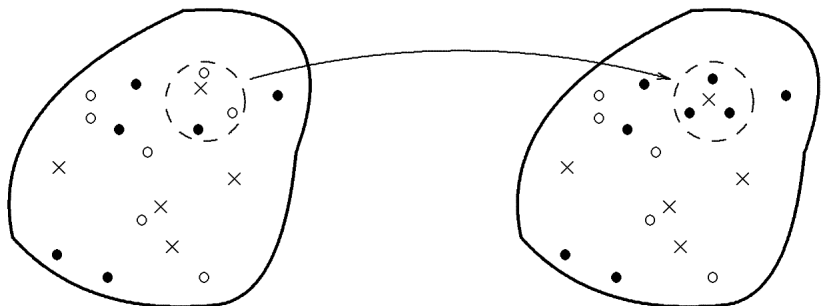
Зададим  $l$  комплексов взаимодействия частиц  $S_{\varepsilon^i}$ , соответствующих векторам  $\varepsilon^i$ . Через случайное время  $\tau_\alpha^i$ ,

$$\mathbf{P}\{\tau_\alpha^i \leq t\} = 1 - e^{-\varphi_\alpha^i t},$$

происходит взаимодействие комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$ . В этот момент из  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1$  выбирается  $\varepsilon_1^i$  частиц,  $\dots$ , из  $\alpha_n$  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  $S_\alpha$ , соответствующего вектору  $\alpha$ , переходит в состояние  $S_{\alpha-\varepsilon^i+\gamma}$ , соответствующее вектору  $\alpha - \varepsilon^i + \gamma$  (рис. 1), далее происходит аналогичная эволюция системы частиц.

В состоянии  $S_\alpha$  система находится случайное время  $\tau_\alpha$ , пока не произойдет какое-либо из  $l$  взаимодействий, т. е.  $\tau_\alpha = \min(\tau_\alpha^1, \dots, \tau_\alpha^l)$ . Здесь предполагается, что случайные величины  $\tau_\alpha^1, \dots, \tau_\alpha^l$  независимы. Тогда

$$\mathbf{P}\{\tau_\alpha \leq t\} = 1 - e^{-(\varphi_\alpha^1 + \dots + \varphi_\alpha^l)t}$$



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

и вероятность, что произошло взаимодействие комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$ , при условии, что взаимодействие произошло, равна  $\varphi_{\alpha}^i \left( \sum_{i=1}^l \varphi_{\alpha}^i \right)^{-1}$  [3, гл. 1, § 2]. Возможные превращения частиц в такой системе представляют схемой взаимодействий (5), где случайный вектор  $\gamma^i = (\gamma_1^i, \gamma_2^i, \dots, \gamma_n^i)$  имеет распределение  $\{p_{\gamma}^i\}$ ,  $i = 1, \dots, l$ .

Выбор значений (6) для  $\varphi_{\alpha}^i$  объясняется следующим образом. Пусть марковский процесс находится в состоянии  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ , что соответствует наличию совокупности частиц  $S_{\alpha} = \alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2 + \dots + \alpha_n T_n$ . Предполагаем, что за время  $\Delta t$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ , вероятность  $\varphi_{\alpha}^i \Delta t + o(\Delta t)$  взаимодействия комплекса частиц  $S_{\varepsilon^i}$  пропорциональна числу  $C_{\alpha_1}^{\varepsilon_1^i}$  сочетаний  $\varepsilon_1^i$  частиц типа  $T_1$  из имеющихся  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1, \dots$ , пропорциональна числу  $C_{\alpha_n}^{\varepsilon_n^i}$  сочетаний  $\varepsilon_n^i$  частиц типа  $T_n$  из имеющихся  $\alpha_n$  частиц типа  $T_n$ .

## 2.2. Первое и второе уравнения в производящих функциях

Для марковских процессов класса  $B_2$  уравнения для переходных вероятностей можно записать в компактном виде, используя производящие функции. 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 сумма ряда [7, 24]

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

Далее будем применять запись  $s = (s_1, \dots, s_n)$ ,  $s^\alpha = s_1^{\alpha_1} \dots s_n^{\alpha_n}$ ,  $\alpha! = \alpha_1! \dots \alpha_n!$ . Для вектора будем употреблять обозначение  $1$ , если все его компоненты равны единице;  $|s|$  обозначим вектор с компонентами  $|s_i|$ .

Математические ожидания компонент случайного вектора вычисляются по формуле

$$\mathbf{M}\xi_i = \frac{\partial F_\xi(1)}{\partial s_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

где производную в точке  $s = 1$  понимают как производную слева по всем координатам  $s_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Выражение для дисперсии имеет вид

$$\mathbf{D}\xi_i = \frac{\partial^2 F_\xi(1)}{\partial s_i^2} + \frac{\partial F_\xi(1)}{\partial s_i} - \left( \frac{\partial F_\xi(1)}{\partial s_i} \right)^2, \quad i = 1, \dots, n. \quad (7)$$

**Мультипликативное свойство.** Если  $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)}$  — независимые случайные векторы, то производящая функция их суммы равна произведению производящих функций слагаемых [7, 24], т. е.

$$F_{\xi^{(1)} + \dots + \xi^{(m)}}(s) = F_{\xi^{(1)}}(s) \dots F_{\xi^{(m)}}(s).$$

В частности, если  $\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(m)}$  — независимые одинаково распределенные случайные векторы, то

$$F_{\xi^{(1)} + \dots + \xi^{(m)}}(s) = F_{\xi^{(1)}}^m(s). \quad (8)$$

Для свертки первой системы дифференциальных уравнений Колмогорова вводятся экспоненциальные производящие функции для переходных вероятностей ( $z = (z_1, \dots, z_n)$ )

$$G_\beta(t; z) = \sum_{\alpha \in N^n} \frac{z^\alpha}{\alpha!} P_{\alpha\beta}(t)$$

и линейные дифференциальные операторы

$$h_i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) = \sum_{\gamma \in N^n} p_\gamma^i \frac{\partial^\gamma}{\partial z^\gamma}, \quad i = 1, \dots, l; \quad \frac{\partial^\gamma}{\partial z^\gamma} = \frac{\partial^{\gamma_1 + \dots + \gamma_n}}{\partial z_1^{\gamma_1} \dots \partial z_n^{\gamma_n}}.$$

**Т е о р е м а 1** [14]. Экспоненциальная производящая функция переходных вероятностей  $G_\beta(t; z)$  марковского процесса  $\xi(t)$  класса  $B_2$  при любом  $\beta \in N^n$  удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению в частных производных ( $\lambda_i > 0, i = 1, \dots, n$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} &= \sum_{i=1}^l \lambda_i z^{\varepsilon^i} \left( h_i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{\partial^{\varepsilon^i}}{\partial z^{\varepsilon^i}} \right) G_\beta(t; z), \\ G_\beta(0; z) &= \frac{z^\beta}{\beta!}. \end{aligned} \quad (9)$$

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

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

**Т е о р е м а 2** [14]. Производящая функция переходных вероятностей  $F_\alpha(t; s)$  марковского процесса  $\xi(t)$  класса  $B_2$  при любом  $\alpha \in N^n$  удовлетворяет при  $|s| \leq 1$  линейному дифференциальному уравнению в частных производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} &= \sum_{i=1}^l \lambda_i (h_i(s) - s^{\varepsilon^i}) \frac{\partial^{\varepsilon^i} F_\alpha(t; s)}{\partial s^{\varepsilon^i}}, \\ F_\alpha(0; s) &= s^\alpha. \end{aligned} \quad (10)$$

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

### 2.3. Бимолекулярная реакция. Закон действующих масс

В качестве вероятностной модели реакции  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$  рассматривают процесс класса  $B_2$  с тремя типами частиц  $T_1, T_2, T_3$  и одним комплексом взаимодействия [1, 20]: марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \xi_3(t)), t \in [0, \infty)$ , на множестве состояний  $N^3$ , определяемый набором

$$\varepsilon = (1, 1, 0), \{p_{(0,0,1)} = 1\}, \{\varphi_\alpha = \lambda\alpha_1\alpha_2, \alpha \in N^3, \lambda > 0\}.$$

Второе уравнение для производящей функции переходных вероятностей  $F_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)}(t; s_1, s_2, s_3)$  имеет вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \lambda(s_3 - s_1s_2) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2}, \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha. \quad (11)$$

Заметим, что  $\xi(t)$  есть процесс гибели на состояниях

$$\{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), (\alpha_1 - 1, \alpha_2 - 1, \alpha_3 + 1), \dots, (0, \alpha_2 - \alpha_1, \alpha_3 + \alpha_1)\}$$

с поглощающим состоянием  $(0, \alpha_2 - \alpha_1, \alpha_3 + \alpha_1)$  (для случая  $\alpha_1 \leq \alpha_2$ , см. рис. 2).

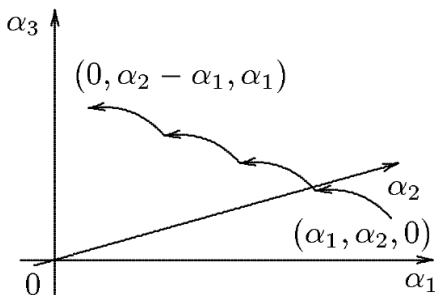


Рис. 2. Скачки процесса  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$ ,  $\alpha_1 \leq \alpha_2$

В состоянии  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  процесс находится случайное время  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)}$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)} \leq t\} = 1 - e^{-\lambda\alpha_1\alpha_2 t}$ . Явные выражения для переходных вероятностей процесса гибели находятся стандартными методами [5, 7].

Для вывода уравнений формальной кинетики, соответствующих схеме взаимодействий  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$ , дифференцируем уравнение (11) по  $s_1, s_2$  или  $s_3$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial t} &= -\lambda s_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \lambda (s_3 - s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2}; \\ \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2 \partial t} &= -\lambda s_1 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \lambda (s_3 - s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2^2}; \\ \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_3 \partial t} &= \lambda \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \lambda (s_3 - s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2 \partial s_3}.\end{aligned}$$

Подставляя  $s = 1$  и используя обозначения для среднего числа частиц типа  $T_i$ ,  $A_i(t) = (\partial F_\alpha(t; s) / \partial s_i) |_{s=1}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , получаем равенства

$$\begin{aligned}\frac{dA_1(t)}{dt} &= -\lambda \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1}; & \frac{dA_2(t)}{dt} &= -\lambda \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1}; \\ \frac{dA_3(t)}{dt} &= \lambda \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1}.\end{aligned} \quad (12)$$

Дифференциальные уравнения закона действующих масс соблюдаются как приближенные для средних  $A_i(t)$  при большом начальном числе частиц; полагают  $\alpha = (n\alpha_1, n\alpha_2, n\alpha_3)$ ,  $n \rightarrow \infty$  (предельный переход соответствует принятому в статистической физике термодинамическому предельному переходу [22]) и

$$\frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} \Big|_{s=1} \approx \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} \Big|_{s=1} \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2} \Big|_{s=1} = A_1(t) A_2(t).$$

Из (12) приходим к уравнениям детерминированной модели

$$\dot{x}_1 = -\lambda x_1 x_2; \quad \dot{x}_2 = -\lambda x_1 x_2; \quad \dot{x}_3 = \lambda x_1 x_2,$$

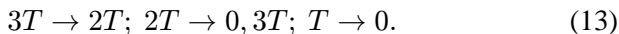
где  $x_1(t), x_2(t), x_3(t)$  — количества реагентов  $T_1, T_2, T_3$ .

Условия для такого детерминированного приближения процесса  $\xi(t)$  рассмотрены в [1, § 8.2, п. В] исходя из явных выражений для переходных вероятностей. С точки зрения указанного предельного

перехода в [17] рассмотрен процесс на  $N^n$  класса  $B_2$  со схемой взаимодействий  $T_i + T_j \rightarrow T_k + T_l$ ,  $i, j, k, l = 1, \dots, n$ . Другие примеры марковских моделей химических реакций даны в [1, гл. 8, «Приложения в химии»] и в работах [4, 6, 14, 20].

## 2.4. Тримолекулярная реакция

На множестве  $N = \{0, 1, 2, \dots\}$  рассмотрим марковский процесс  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , класса  $B_2$ , соответствующий схеме взаимодействий



Первую систему дифференциальных уравнений для переходных вероятностей  $P_{ij}(t) = \mathbf{P}\{\xi(t) = j | \xi(0) = i\}$ ,  $i, j \in N$ , при помощи экспоненциальной производящей функции  $G_j(t; z) = \sum_{i=0}^{\infty} (z^i / i!) P_{ij}(t)$ ,  $j \in N$ , запишем в виде уравнения третьего порядка ( $\lambda_i > 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ ):

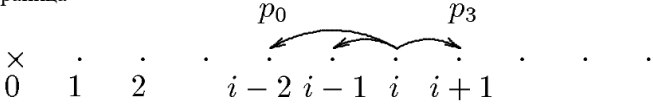
$$\frac{\partial G_j(t; z)}{\partial t} = \left[ \lambda_3 z^3 \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^3}{\partial z^3} \right) + \lambda_2 z^2 \left( p_3 \frac{\partial^3}{\partial z^3} + p_0 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \lambda_1 z \left( 1 - \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] G_j(t; z), \quad G_j(0, z) = \frac{z^j}{j!}.$$

Вторую систему дифференциальных уравнений для переходных вероятностей при помощи производящей функции  $F_i(t; s) = \sum_{j=0}^{\infty} P_{ij}(t) s^j$ ,  $i \in N$  ( $|s| \leq 1$ ), запишем в виде

$$\frac{\partial F_i(t; s)}{\partial t} = \lambda_3 (s^2 - s^3) \frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} + \lambda_2 (p_3 s^3 + p_0 - s^2) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \lambda_1 (1 - s) \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s}, \quad F_i(0, s) = s^i. \quad (14)$$

Рассматриваемый процесс является обобщенным процессом рождения и гибели кубического типа (рис. 3).

Поглощающая  
граница



**Рис. 3.** Скачки процесса со схемой (13)

В состоянии  $i$  процесс находится случайное время  $\tau_i$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_i \leq t\} = 1 - e^{-(\lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1) + \lambda_3 i(i-1)(i-2))t}$ . Происходит переход процесса  $i \rightarrow i-2$  с вероятностью

$$\frac{p_0 \lambda_2 i(i-1)}{\lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1) + \lambda_3 i(i-1)(i-2)}, \quad (15)$$

переход  $i \rightarrow i-1$  с вероятностью

$$\frac{\lambda_1 i + \lambda_3 i(i-1)(i-2)}{\lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1) + \lambda_3 i(i-1)(i-2)} \quad (16)$$

и переход  $i \rightarrow i+1$  с вероятностью

$$\frac{p_3 \lambda_2 i(i-1)}{\lambda_1 i + \lambda_2 i(i-1) + \lambda_3 i(i-1)(i-2)}. \quad (17)$$

Получим модель детерминированного приближения для процесса  $\xi(t)$ . Дифференцируем уравнение (14) по  $s$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s \partial t} &= \lambda_3 (2s - 3s^2) \frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} + \lambda_3 (s^2 - s^3) \frac{\partial^4 F_i(t; s)}{\partial s^4} + \\ &+ \lambda_2 (3p_3 s^2 - 2s) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} + \lambda_2 (p_3 s^3 + p_0 - s^2) \frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} - \\ &- \lambda_1 \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} + \lambda_1 (1-s) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2}. \quad (18) \end{aligned}$$

Введя обозначение для среднего числа частиц  $A_i(t) = (\partial F_i(t; s) / \partial s) |_{s=1}$ , получим из (18) равенство

$$\frac{dA_i(t)}{dt} = -\lambda_3 \frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} \Big|_{s=1} + \lambda_2 (3p_3 - 2) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} \Big|_{s=1} - \lambda_1 A_i(t).$$

Считая при  $i \rightarrow \infty$  справедливыми приближения

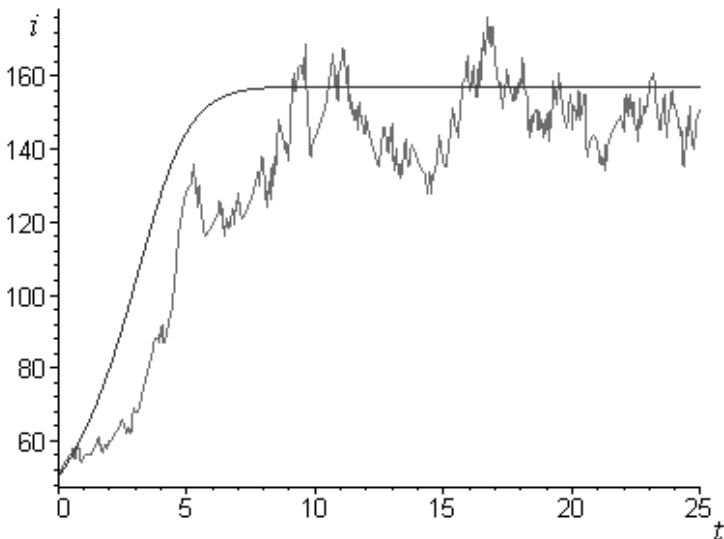
$$\frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2} \Big|_{s=1} \approx \left( \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} \Big|_{s=1} \right)^2,$$

$$\frac{\partial^3 F_i(t; s)}{\partial s^3} \Big|_{s=1} \approx \left( \frac{\partial F_i(t; s)}{\partial s} \Big|_{s=1} \right)^3,$$

приходим к уравнению детерминированной модели

$$\dot{x} = -\lambda_3 x^3 + \lambda_2(3p_3 - 2)x^2 - \lambda_1 x,$$

где  $x(t)$  — количество реагента в момент времени  $t$  для тримолекулярной реакции со схемой (13) [6, § 7.1.3].



**Рис. 4.** Детерминированная и стохастическая реализации

На рис. 4 показана траектория детерминированной модели  $x(t)$ ,  $t \in [0; 25]$ , при начальном условии  $x(0) = 50$ , значениях параметров  $\lambda_1 = 0,1$ ,  $\lambda_2 = 0,01$ ,  $\lambda_3 = 0,00005$ ,  $p_3 = 0,95$  и приведен пример реализации стохастического процесса  $\xi(t)$ . Данная реализация не характеризует поведение процесса при  $t \rightarrow \infty$ ; из формул (15) — (17) следует, что с вероятностью единица процесс остановится в поглощающем состоянии 0.

## 2.5. Брюсселятор

Рассмотрим марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , класса  $B_2$  со схемой взаимодействий [8, 18]

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

Первое уравнение для экспоненциальной производящей функции переходных вероятностей  $G_{(\beta_1, \beta_2)}(t; z_1, z_2)$  имеет вид ( $\lambda_0 > 0$ ,  $\lambda_1 > 0$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = & \left[ z_1^2 z_2 \left( \frac{\partial^3 G_\beta(t; z)}{\partial z_1^3} - \frac{\partial^3 G_\beta(t; z)}{\partial z_1^2 \partial z_2} \right) + \right. \\ & + \lambda_1 z_1 \left( p_2 \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_2} + p_0 G_\beta(t; z) - \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_1} \right) + \\ & \left. + \lambda_0 \left( \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_1} - G_\beta(t; z) \right) \right], \quad G_\beta(t; z) = \frac{z^\beta}{\beta!}. \end{aligned}$$

Здесь  $p_0 \geq 0$ ,  $p_2 \geq 0$ ,  $p_0 + p_2 = 1$ . Второе уравнение для производящей функции  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = & (s_1^3 - s_1^2 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} + \lambda_1 (p_2 s_2 + p_0 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \\ & + \lambda_0 (s_1 - 1) F_\alpha(t; s), \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha. \quad (19) \end{aligned}$$

Событие  $\{\xi(t) = (\alpha_1, \alpha_2)\}$  означает наличие  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1$  и  $\alpha_2$  частиц типа  $T_2$  в момент времени  $t$ . Через случайное время  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^2$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^2 \leq t\} = 1 - e^{-\alpha_1(\alpha_1-1)\alpha_2 t}$ , происходит взаимодействие группы из двух частиц типа  $T_1$  и одной частицы типа  $T_2$ . Эта группа частиц превращается в группу из трех частиц типа  $T_1$ ; процесс переходит в состояние, соответствующее вектору  $(\alpha_1 + 1, \alpha_2 - 1)$ . Через случайное время  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^1$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^1 \leq t\} = 1 - e^{-\lambda_1 \alpha_1 t}$ , частица типа  $T_1$  с вероятностью  $p_2$  превращается в частицу типа  $T_2$  или с вероятностью  $p_0$  исчезает; процесс переходит в состояние, соответствующее вектору  $(\alpha_1 - 1, \alpha_2 + 1)$  или вектору  $(\alpha_1 - 1, \alpha_2)$ . Кроме того, через случайное время  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^0$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^0 \leq t\} = 1 - e^{-\lambda_0 t}$ , в систему



добавляется одна частица типа  $T_1$ ; процесс переходит в состояние  $(\alpha_1 + 1, \alpha_2)$ . Случайные величины  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^0$ ,  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^1$ ,  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^2$  независимы; в состоянии  $(\alpha_1, \alpha_2)$  процесс находится случайное время  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)} = \min(\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^0, \tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^1, \tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^2)$ . Рассматриваемый процесс является двумерным процессом рождения и гибели кубического типа, возможные скачки процесса изображены на рис. 5, случай *a*.

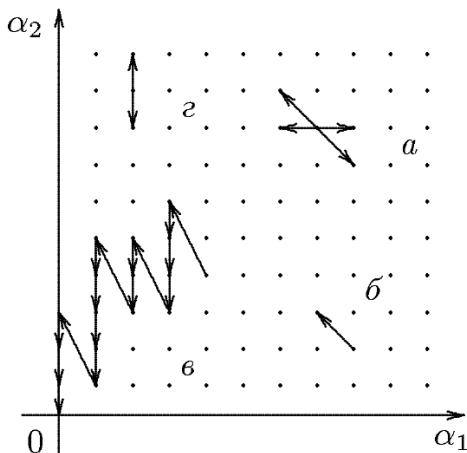


Рис. 5. Скачки случайных процессов на  $N^2$

Чтобы получить детерминированное приближение для процесса  $\xi(t)$ , дифференцируем второе уравнение (19) по  $s_1$  или  $s_2$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial t} &= (3s_1^2 - 2s_1 s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} + (s_1^3 - s_1^2 s_2) \frac{\partial^4 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^3 \partial s_2} - \\ &- \lambda_1 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_1 (p_2 s_2 + p_0 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2} + \\ &+ \lambda_0 F_\alpha(t; s) + \lambda_0 (s_1 - 1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1}; \\ \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2 \partial t} &= -s_1^2 \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} + (s_1^3 - s_1^2 s_2) \frac{\partial^4 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2^2} + \\ &+ \lambda_1 p_2 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_1 (p_2 s_2 + p_0 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \lambda_0 (s_1 - 1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2}. \end{aligned}$$

Подставляя  $s = 1$  и учитывая равенство  $F_\alpha(t; 1) \equiv 1$ , получаем

$$\begin{aligned}\frac{dA_1(t)}{dt} &= \left. \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} \right|_{s=1} - \lambda_1 A_1(t) + \lambda_0, \\ \frac{dA_2(t)}{dt} &= - \left. \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} \right|_{s=1} + \lambda_1 p_2 A_1(t).\end{aligned}$$

Считая при  $\alpha = (n\alpha_1, n\alpha_2)$ ,  $n \rightarrow \infty$ , справедливым приближение

$$\left. \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} \right|_{s=1} \approx \left( \left. \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} \right|_{s=1} \right)^2 \left. \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2} \right|_{s=1},$$

приходим к дифференциальным уравнениям брюсселятора [8, 18]

$$\dot{x}_1 = x_1^2 x_2 - \lambda_1 x_1 + \lambda_0; \quad \dot{x}_2 = -x_1^2 x_2 + \lambda_1 p_2 x_1,$$

где  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$  — количество реагентов в момент времени  $t$ .

На рис. 6 приведена траектория на фазовой плоскости  $x_1 \times x_2$  детерминированной модели  $(x_1(t), x_2(t))$ ,  $t \in [0; 0,005]$ , при началь-

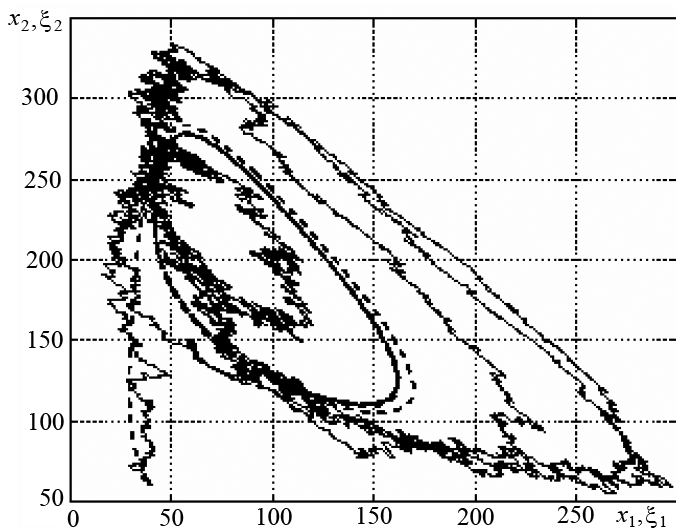


Рис. 6. Детерминированная и стохастическая реализации

ных условиях  $(x_1(0), x_2(0)) = (40, 60)$ , значениях параметров  $\lambda_0 = 60000$ ,  $\lambda_1 = 24000$ ,  $p_2 = 0,67$ , и дан пример реализации стохастического процесса  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$ .

**З а м е ч а н и е 1.** При построении рисунков вида 5 и 6 применяются метод Рунге — Кутты приближенного решения обыкновенных дифференциальных уравнений и систем. Реализации марковских процессов строятся методом Монте-Карло [9, 10, 11, 15]. Используется стандартный датчик равномерно распределенных на отрезке  $[0, 1]$  случайных чисел  $r = \text{RNDM}[0, 1]$ ; случайная величина с показательным распределением  $\mathbf{P}\{\tau \leq t\} = 1 - e^{-\lambda t}$  определяется формулой  $\tau = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - r)$ .

### 3. МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ КЛАССА $B_1$

#### 3.1. Третье уравнение теории ветвящихся процессов

Специальный класс марковских процессов  $B_1$  выделяется из класса  $B_2$  условиями на комплексы взаимодействия  $|\varepsilon^i| \leq 1$ ,  $i = 1, \dots, l$ . Пусть для определенности

$$\begin{aligned} \varepsilon^1 &= (1, 0, \dots, 0), \quad \varepsilon^2 = (0, 1, 0, \dots, 0), \quad \dots, \\ \varepsilon^l &= (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0). \end{aligned}$$

Тогда

$$\varphi_\alpha^i = \lambda_i \alpha_i, \quad \alpha \in N^n, \quad i = 1, \dots, l,$$

и второе уравнение (10) принимает вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \sum_{i=1}^l \lambda_i (h_i(s) - s_i) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_i}, \quad F_\alpha(0; s) = s^\alpha. \quad (20)$$

Решив уравнение в частных производных первого порядка (20) стандартными методами [16], получим свойство ветвления переходных вероятностей [24, гл. 4, § 2, формула (3)]:

$$\begin{aligned} F_\alpha(t; s) &= F_{\varepsilon^1}^{\alpha_1}(t; s) F_{\varepsilon^2}^{\alpha_2}(t; s) \dots F_{\varepsilon^l}^{\alpha_l}(t; s) s_{l+1}^{\alpha_{l+1}} \dots s_n^{\alpha_n}, \\ \alpha &\in N^n. \end{aligned} \quad (21)$$

Свойство ветвления — нелинейное свойство, выделяющее из марковских процессов класс ветвящихся процессов  $B_1$ , — состоит в том, что если состояние процесса интерпретировать как наличие совокупности частиц, то частицы, существующие в момент времени  $t_1$ , в любой следующий момент  $t_1 + t$ ,  $t > 0$ , эволюционируют и дают новые частицы независимо друг от друга. Это следует из сравнения формулы (21) и мультипликативных свойств производящих функций (8).

**Т е о р е м а 3** [24]. Производящие функции переходных вероятностей  $F_{\varepsilon^1}(t; s)$ ,  $\dots$ ,  $F_{\varepsilon^l}(t; s)$  марковского ветвящегося процесса удовлетворяют при  $|s| \leq 1$  системе нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений:

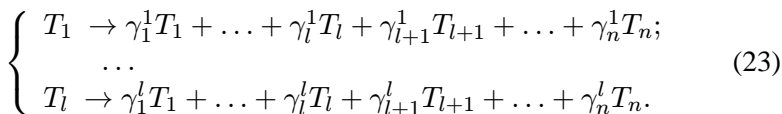
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_{\varepsilon^1}(t; s)}{\partial t} = \\ = \lambda_1 (h_1(F_{\varepsilon^1}(t; s), \dots, F_{\varepsilon^l}(t; s), s_{l+1}, \dots, s_n) - F_{\varepsilon^1}(t; s)); \\ \dots \\ \frac{\partial F_{\varepsilon^l}(t; s)}{\partial t} = \\ = \lambda_l (h_l(F_{\varepsilon^1}(t; s), \dots, F_{\varepsilon^l}(t; s), s_{l+1}, \dots, s_n) - F_{\varepsilon^l}(t; s)), \end{array} \right. \quad (22)$$

с начальными условиями  $F_{\varepsilon^1}(0; s) = s_1, \dots, F_{\varepsilon^l}(0; s) = s_l$ .

Функции  $F_{\varepsilon^1}(t; s), \dots, F_{\varepsilon^l}(t; s)$  называют одночастичными [22].

### 3.2. Мономолекулярные реакции. Предельная теорема

Марковские процессы класса  $B_1$  служат моделями мономолекулярных химических реакций; схема (5) принимает вид



Частицы типов  $T_{l+1}, \dots, T_n$  называют финальными. Если множеству  $\{\varepsilon^1, \dots, \varepsilon^l\}$  принадлежит нулевой вектор  $(0, \dots, 0)$  (тогда  $\varphi_\alpha^0 = \lambda_0$ ,  $\alpha \in N^n$ ,  $\lambda_0 > 0$ ), то ветвящийся процесс называют процессом с иммиграцией частиц. В [24, гл. 4, § 6] дана классификация

типов частиц ветвящегося процесса, являющаяся классификацией схем вида (23). Там же, в гл. 4, § 4, изложены общие методы вычисления среднего числа частиц типа  $T_i, i = 1, \dots, n$ ; в гл. 4, § 7 исследованы асимптотические свойства средних при  $t \rightarrow \infty$  в неразложимых ветвящихся процессах и указано на разнообразие поведения средних в разложимых процессах. Для химических реакций кинетические схемы вида (23), как правило, соответствуют разложимым процессам; к таким процессам относится следующий пример.

**С х е м а**  $T_1 \rightarrow T_2$ . В качестве вероятностной модели рассматривают процесс с двумя типами частиц  $T_1, T_2$  и одним комплексом взаимодействия [1, 17, 20]: марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , на множестве состояний  $N^2$ , определяемый набором

$$\varepsilon = (1, 0), \{p_{(0,1)} = 1\}, \{\varphi_\alpha = \lambda\alpha_1, \alpha \in N^2, \lambda > 0\}$$

(см. рис. 5, случай б). Второе уравнение для производящей функции переходных вероятностей  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  имеет вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \lambda(s_2 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1}, \quad (24)$$

начальное условие возьмем  $F_\alpha(0; s) = s_1^{\alpha_1}$ .

В рассматриваемом вероятностном процессе для среднего числа частиц  $A_1(t) = \mathbf{M}\xi_1(t)$ ,  $A_2(t) = \mathbf{M}\xi_2(t)$  выполнены уравнения детерминированной модели (1). Уравнение (24) дифференцируем по  $s_1$  или  $s_2$ :

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

Подставим  $s = 1$ , получим систему уравнений:

$$\frac{dA_1}{dt} = -\lambda A_1; \quad \frac{dA_2}{dt} = \lambda A_1,$$

с начальными условиями  $A_1(0) = \alpha_1, A_2(0) = 0$ .

Для одночастичной производящей функции система уравнений (22) имеет вид

$$\frac{\partial F_{(1,0)}(t; s)}{\partial t} = \lambda(s_2 - F_{(1,0)}(t; s)),$$

с начальным условием  $F_{(1,0)}(t; s) = s_1$ . Решение последнего уравнения [23]

$$F_{(1,0)}(t; s_1, s_2) = s_1 e^{-\lambda t} + s_2(1 - e^{-\lambda t}),$$

и по свойству (21) имеем

$$F_{(\alpha_1, 0)}(t; s_1, s_2) = (s_1 e^{-\lambda t} + s_2(1 - e^{-\lambda t}))^{\alpha_1}. \quad (25)$$

Производящая функция (25) соответствует биномиальному распределению на состояниях  $\{(\alpha_1, 0), (\alpha_1 - 1, 1), \dots, (0, \alpha_1)\}$ ; теорема Муавра—Лапласа об аппроксимации биномиального распределения нормальным распределением получает следующий вид. Из (25) дифференцированием по  $s_1$  или  $s_2$  находим средние  $A_1(t) = \alpha_1 e^{-\lambda t}$ ,  $A_2(t) = \alpha_1(1 - e^{-\lambda t})$  (рис. 7).

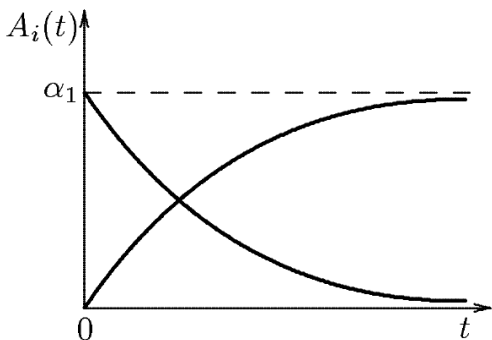


Рис. 7. Средние для схемы  $T_1 \rightarrow T_2$

Для дисперсии числа частиц  $D_1(t) = \mathbf{D}\xi_1(t)$ ,  $D_2(t) = \mathbf{D}\xi_2(t)$  из (25) по формуле (7) получаем  $D_1(t) = D_2(t) = \alpha_1 e^{-\lambda t}(1 - e^{-\lambda t})$ .

**Т е о р е м а 4.** Пусть  $\xi_i(t)$  — число частиц типа  $T_i$  в момент времени  $t$  для процесса класса  $B_1$  со схемой  $T_1 \rightarrow T_2$  и в момент

времени  $t = 0$  имелось  $\alpha_1$  частиц типа  $T_1$ . Тогда при фиксированном  $t > 0$

$$\lim_{\alpha_1 \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left\{ \frac{\xi_i(t) - A_i(t)}{\sqrt{D_i(t)}} \leq x \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-u^2/2} du, \quad i = 1, 2.$$

**З а м е ч а н и е 2.** При наблюдении за химической реакцией получают набор экспериментальных данных, по результатам статистической обработки которых находят приближения для кинетических кривых  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ . При этом, как правило, предполагают, что экспериментальные точки отклонены от кинетической кривой согласно нормальному закону. Предельная теорема 4 показывает, что при условиях рассматриваемой вероятностной модели отклонение «экспериментальных» значений  $\xi_i(t)$  от значений  $A_i(t)$  распределено по нормальному закону. Предположение о распределении ошибок наблюдений по нормальному закону является условием применения метода наименьших квадратов при обработке экспериментальных данных.

### 3.3. Аналитическое исследование последовательной схемы

На множестве  $N^2$  рассмотрим марковский процесс  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , со схемой превращений

$$T_1 \rightarrow 2T_2; \quad T_2 \rightarrow 0. \quad (26)$$

Реализация процесса изображена на рис. 5, случай *в*. Первое уравнение для функции  $G_{(\beta_1, \beta_2)}(t; z_1, z_2)$  имеет вид ( $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_2 > 0$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = \lambda_1 z_1 \left( \frac{\partial^2 G_\beta(t; z)}{\partial z_2^2} - \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_1} \right) + \\ + \lambda_2 z_2 \left( G_\beta(t; z) - \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_2} \right), \end{aligned}$$

с начальным условием  $G_\beta(t; z) = z^\beta / \beta!$ . Второе уравнение для функции  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  имеет вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2} \quad (27)$$

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

Свойство ветвления (21) позволяет дать следующее описание случайного процесса. Пусть в момент времени  $t$  имеется  $\beta_1$  частиц типа  $T_1$  и  $\beta_2$  частиц типа  $T_2$ . Каждая из  $\beta_1$  частиц типа  $T_1$  существует случайное время  $\tau_i^1$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_i^1 \leq t\} = 1 - e^{-\lambda_1 t}$ ,  $i = 1, \dots, \beta_1$ ; каждая из  $\beta_2$  частиц типа  $T_2$  существует случайное время  $\tau_j^2$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_j^2 \leq t\} = 1 - e^{-\lambda_2 t}$ ,  $j = 1, \dots, \beta_2$ . Все указанные случайные величины независимы. Совокупность частиц не меняется случайное время  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)} = \min(\tau_1^1, \dots, \tau_{\beta_1}^1, \tau_1^2, \dots, \tau_{\beta_2}^2)$ ,  $\mathbf{P}\{\tau_{(\beta_1, \beta_2)} \leq t\} = 1 - e^{-(\lambda_1 \beta_1 + \lambda_2 \beta_2)t}$  [3, гл. 1, § 2]. Равенство  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)} = \tau_i^1$  означает, что в этот момент времени  $i$ -я частица типа  $T_1$  заменяется на две частицы типа  $T_2$ , равенство  $\tau_{(\beta_1, \beta_2)} = \tau_j^2$  означает, что в этот момент времени  $j$ -я частица типа  $T_2$  исчезает в соответствии со схемой превращений (26). Далее происходит аналогичная эволюция системы независимых друг от друга частиц.

Для вывода уравнений детерминированной модели, соответствующих схеме (26), уравнение (27) дифференцируем по  $s_1$  или  $s_2$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial t} &= -\lambda_1 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2} + \\ &+ \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2}; \\ \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2 \partial t} &= 2\lambda_1 s_2 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} - \\ &- \lambda_2 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2} + \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

Подставив  $s = 1$ , получим уравнения для среднего числа частиц  $A_1(t) = \mathbf{M}\xi_1(t)$ ,  $A_2(t) = \mathbf{M}\xi_2(t)$ :

$$\frac{dA_1(t)}{dt} = -\lambda_1 A_1(t); \quad \frac{dA_2(t)}{dt} = 2\lambda_1 A_1(t) - \lambda_2 A_2(t)$$

с начальными условиями  $A_1(0) = \alpha_1$ ,  $A_2(0) = \alpha_2$ . Решение стандартными методами [23] линейной однородной системы дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами дает выра-



жения ( $\lambda_1 \neq \lambda_2$ )

$$A_1(t) = \alpha_1 e^{-\lambda_1 t}, \quad A_2(t) = \alpha_1 \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}) + \alpha_2 e^{-\lambda_2 t}.$$

На рис. 8 изображены графики  $A_1(t)$ ,  $A_2(t)$  при  $A_1(0) = \alpha_1$ ,  $A_2(0) = 0$ . Такой вид кинетических кривых характерен для мономолекулярной химической реакции последовательного типа  $T_1 \rightarrow T_2 \rightarrow T_3$  ([1], см. рис. 56).

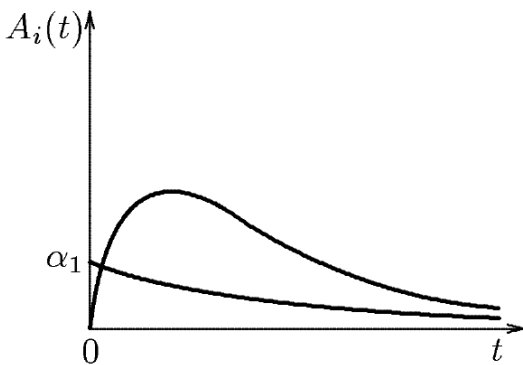


Рис. 8. Средние для схемы  $T_1 \rightarrow 2T_2, T_2 \rightarrow 0$

Для нахождения факториальных моментов

$$B_{11}(t) = \mathbf{M}\xi_1(t)(\xi_1(t) - 1), \quad B_{12}(t) = \mathbf{M}\xi_1(t)\xi_2(t), \\ B_{22}(t) = \mathbf{M}\xi_2(t)(\xi_2(t) - 1)$$

дифференцируем выражения (28):

$$\frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial t} = -2\lambda_1 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2} + \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^3} + \\ + \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2}; \\ \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2 \partial t} = -\lambda_1 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + 2\lambda_1 s_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2} + \\ + \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1^2 \partial s_2} - \lambda_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2^2};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2^2 \partial t} &= 2\lambda_1 \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + 4\lambda_1 s_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2} + \\ &+ \lambda_1 (s_2^2 - s_1) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_1 \partial s_2^2} - 2\lambda_2 \frac{\partial^2 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2^2} + \lambda_2 (1 - s_2) \frac{\partial^3 F_\alpha(t; s)}{\partial s_2^3}. \end{aligned}$$

Так как  $B_{11}(t) = (\partial^2 F_\alpha(t; s)/\partial s_1^2)|_{s=1}$ ,  $B_{12}(t) = (\partial^2 F_\alpha(t; s)/\partial s_1 \partial s_2)|_{s=1}$ ,  $B_{22}(t) = (\partial^2 F_\alpha(t; s)/\partial s_2^2)|_{s=1}$ , то имеем систему уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dB_{11}(t)}{dt} &= -2\lambda_1 B_{11}(t); \\ \frac{dB_{12}(t)}{dt} &= 2\lambda_1 B_{11}(t) - (\lambda_1 + \lambda_2) B_{12}(t); \\ \frac{dB_{22}(t)}{dt} &= 4\lambda_1 B_{12}(t) - 2\lambda_2 B_{22}(t) + 2\lambda_1 A_1(t) \end{aligned} \right. \quad (29)$$

с начальными условиями  $B_{11}(0) = \alpha_1(\alpha_1 - 1)$ ,  $B_{12}(0) = \alpha_1\alpha_2$ ,  $B_{22}(0) = \alpha_2(\alpha_2 - 1)$ . Легко найти решение системы (29) ( $\lambda_1 \neq \lambda_2$ ,  $\lambda_1 \neq 2\lambda_2$ ):

$$B_{11}(t) = \alpha_1(\alpha_1 - 1)e^{-2\lambda_1 t};$$

$$\begin{aligned} B_{12}(t) &= \alpha_1(\alpha_1 - 1) \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t} - e^{-2\lambda_1 t}) + \\ &+ \alpha_1\alpha_2 e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_{22}(t) &= \alpha_1(\alpha_1 - 1) \frac{4\lambda_1^2}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t})^2 + \\ &+ \alpha_2(\alpha_2 - 1)e^{-2\lambda_2 t} + \alpha_1\alpha_2 \frac{4\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-2\lambda_2 t} - e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t}) + \\ &+ \alpha_1 \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - 2\lambda_2} (e^{-2\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}). \end{aligned}$$

Для дисперсий  $D_1(t) = \mathbf{D}\xi_1(t)$ ,  $D_2(t) = \mathbf{D}\xi_2(t)$  получаем

$$D_1(t) = \alpha_1 (e^{-\lambda_1 t} - e^{-2\lambda_1 t});$$

$$D_2(t) = \alpha_1 \left( - \frac{4\lambda_1^2}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t})^2 + \right.$$

$$+ \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}) + \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - 2\lambda_2} (e^{-2\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}) + \alpha_2 (e^{-\lambda_2 t} - e^{-2\lambda_2 t}).$$

Введем обозначения для одночастичных производящих функций  $F_1(t; s) = F_{\varepsilon_1}(t; s)$ ,  $F_2(t; s) = F_{\varepsilon_2}(t; s)$ . Система нелинейных уравнений (22) принимает вид

$$\begin{cases} \frac{\partial F_1(t; s)}{\partial t} = \lambda_1 (F_2^2(t; s) - F_1(t; s)); \\ \frac{\partial F_2(t; s)}{\partial t} = \lambda_2 (1 - F_2(t; s)) \end{cases} \quad (30)$$

с начальными условиями  $F_1(0; s) = s_1$ ,  $F_2(0; s) = s_2$ . Решение второго уравнения системы (30) методом разделения переменных [23] дает

$$F_2(t; s) = 1 - e^{-\lambda_2 t} + s_2 e^{-\lambda_2 t}.$$

Подставив последнее выражение в первое уравнение системы (30), получим линейное неоднородное уравнение для  $F_1(t; s)$ , решение которого методом вариации константы [23] дает

$$F_1(t; s) = 1 - \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (1 - s_2) e^{-\lambda_2 t} + \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - 2\lambda_2} (1 - s_2)^2 e^{-2\lambda_2 t} + \left( -1 + s_1 + \frac{2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (1 - s_2) - \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - 2\lambda_2} (1 - s_2)^2 \right) e^{-\lambda_1 t}.$$

Согласно нелинейному свойству (21) для процессов класса  $B_1$ , получаем явное выражение для производящей функции переходных вероятностей рассматриваемого марковского процесса:

$$F_\alpha(t; s) = F_1^{\alpha_1}(t; s) F_2^{\alpha_2}(t; s), \quad \alpha \in N^2. \quad (31)$$

**З а м е ч а н и е 3.** Для контроля результатов аналитических выкладок отметим, что для полученных выражений:  $F_\alpha(t; 1) \equiv 1$ ; производные функции (31) по  $s_1$  или  $s_2$  при  $s = 1$  совпадают с найденными ранее средними  $A_1(t)$ ,  $A_2(t)$ ; выражения для факториальных моментов  $B_{11}(t)$ ,  $B_{12}(t)$ ,  $B_{22}(t)$  могут быть получены двойным дифференцированием формулы (31);  $\lim_{t \rightarrow \infty} F_\alpha(t; s) = 1$  (т. е. марковский процесс  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$  с вероятностью единица остановится в поглощающем состоянии  $(0, 0)$ ).

## 4. ФИНАЛЬНЫЕ И СТАЦИОНАРНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ

### 4.1. Стационарные уравнения

Пусть  $P_{\alpha\beta}(t)$  — переходные вероятности однородного марковского процесса на множестве  $N^n$  с непрерывным временем  $t$ ,  $t \in [0, \infty)$ . В общей теории процессов со счетным множеством состояний показано, при выполнении некоторых условий [14, гл. 3], что существуют пределы

$$q_{\alpha\beta} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{\alpha\beta}(t), \quad \alpha, \beta \in N^n;$$

$q_{\alpha\beta}$  называют предельными вероятностями,  $\sum_{\beta} q_{\alpha\beta} \leq 1$ . Пусть марковский процесс  $\xi(t)$  класса  $B_2$  задан набором  $\varepsilon^1, \{p_\gamma^1\}, \dots, \dots, \varepsilon^l, \{p_\gamma^l\}$ . Введем многомерные производящие функции

$$g_\beta(z) = \sum_{\alpha \in N^n} \frac{z^\alpha}{\alpha!} q_{\alpha\beta}, \quad f_\alpha(s) = \sum_{\beta \in N^n} q_{\alpha\beta} s^\beta, \quad \alpha, \beta \in N^n \quad (|s| \leq 1).$$

Предельное поведение марковских процессов имеет разнообразный характер, определяемый классификацией состояний процесса [7]. Можно выделить основные случаи — когда процесс попадает в поглощающее состояние или уходит в бесконечность и когда процесс приходит к стационарному положению. Для нахождения финальных вероятностей (вероятностей остановки процесса в поглощающих состояниях) решают стационарное первое уравнение

$$\sum_{i=1}^l \lambda_i z^{\varepsilon^i} \left( h_i \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) - \frac{\partial^{\varepsilon^i}}{\partial z^{\varepsilon^i}} \right) g_\beta(z) = 0; \quad (32)$$

для нахождения предельного стационарного распределения вероятностей решают стационарное второе уравнение

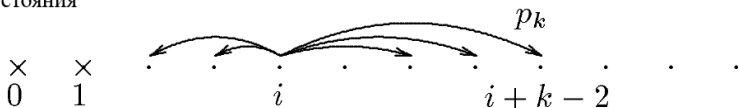
$$\sum_{i=1}^l \lambda_i (h_i(s) - s^{\varepsilon^i}) \frac{\partial^{\varepsilon^i} f_\alpha(s)}{\partial s^{\varepsilon^i}} = 0. \quad (33)$$

Уравнения (32) и (33) являются следствиями уравнений (9) и (10), см. доказательства теорем 3.1 и 3.2 в [14].

## 4.2. Финальные вероятности для схемы $2T \rightarrow kT, k = 0, 1$

На множестве  $N = \{0, 1, 2, \dots\}$  рассмотрим марковский процесс  $\xi(t), t \in [0, \infty)$ , соответствующий схеме взаимодействий  $2T \rightarrow kT$  (рис. 9).

Поглощающие  
состояния



**Рис. 9.** Скачки процесса  $2T \rightarrow kT$

Первую систему дифференциальных уравнений Колмогорова для переходных вероятностей

$$P_{ij}(t) = \mathbf{P}\{\xi(t) = j \mid \xi(0) = i\}, \quad i, j \in N,$$

при помощи экспоненциальной производящей функции  $G_j(t; z) = \sum_{i=0}^{\infty} (z^i / i!) P_{ij}(t)$ ,  $j \in N$ , запишем в виде уравнения ( $\lambda > 0$ )

$$\frac{\partial G_j(t; z)}{\partial t} = \lambda z^2 \left( h \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) G_j(t; z), \quad G_j(0, z) = \frac{z^j}{j!}.$$

Вторую систему дифференциальных уравнений для переходных вероятностей при помощи производящих функций  $F_i(t; s) = \sum_{j=0}^{\infty} P_{ij}(t) s^j$ ,  $i \in N$ , и  $h(s) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k s^k$  запишем в виде ( $|s| \leq 1$ )

$$\frac{\partial F_i(t; s)}{\partial t} = \lambda (h(s) - s^2) \frac{\partial^2 F_i(t; s)}{\partial s^2}, \quad F_i(0, s) = s^i.$$

Рассматриваемый процесс — обобщенный процесс рождения и гибели квадратичного типа. Состояния 0 и 1 являются поглощающими. Рассмотрим финальные вероятности  $q_{i0} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{i0}(t)$ ,  $q_{i1} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{i1}(t)$ ,  $i \in N$ . Очевидно, что

$$q_{00} = 1, \quad q_{10} = 0; \quad q_{01} = 0, \quad q_{11} = 1. \tag{34}$$

## Экспоненциальные производящие функции

$$g_0(z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{z^i}{i!} q_{i0}, \quad g_1(z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{z^i}{i!} q_{i1}$$

удовлетворяют стационарным уравнениям

$$\left( h\left(\frac{d}{dz}\right) - \frac{d^2}{dz^2} \right) g_0(z) = 0; \quad \left( h\left(\frac{d}{dz}\right) - \frac{d^2}{dz^2} \right) g_1(z) = 0$$

и в силу (34) выполнены граничные условия

$$g_0(0) = 1, \quad g_0'(0) = 0; \quad g_1(0) = 0, \quad g_1'(0) = 1. \quad (35)$$

Для простоты изложения ограничимся схемой  $2T \rightarrow kT$ ,  $k = 0, 1$ ; линейные уравнения с постоянными коэффициентами принимают вид

$$p_0 g_0(z) + p_1 g_0'(z) - g_0''(z) = 0; \quad p_0 g_1(z) + p_1 g_1'(z) - g_1''(z) = 0.$$

Характеристическое уравнение  $p_0 + p_1 s - s^2 = 0$  имеет два корня: 1 и  $-p_0$ . Следовательно, общее решение имеет вид  $C_1 e^z + C_2 e^{-p_0 z}$  [23]. Из условий (35) находим значения констант  $C_1, C_2$ . Получаем

$$g_0(z) = \frac{p_0 e^z + e^{-p_0 z}}{1 + p_0}; \quad g_1(z) = \frac{e^z - e^{-p_0 z}}{1 + p_0}.$$

Из определения функций  $g_0(z), g_1(z)$  и разложения

$$e^{zx} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{z^i}{i!} x^i,$$

приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $z$ , получаем

$$q_{i0} = \frac{p_0 + (-p_0)^i}{1 + p_0}; \quad q_{i1} = \frac{1 - (-p_0)^i}{1 + p_0}, \quad i \in N. \quad (36)$$

Заметим, что  $q_{i0} \geq 0, q_{i1} \geq 0$  и  $q_{i0} + q_{i1} = 1, i \in N$ .

Общий случай  $2T \rightarrow kT$  рассматривают аналогично [14, гл. 3].

З а м е ч а н и е 4. Рассматривая процесс  $\xi(t)$  только в моменты изменения состояния, мы получим «вложенную цепь Маркова» [7] на  $N$ :  $S_0, S_1, \dots, S_n, S_{n+1}, \dots$ , где  $\mathbf{P}\{S_{n+1} = i - 2 \mid S_n = i\} = p_0$ ,  $\mathbf{P}\{S_{n+1} = i - 1 \mid S_n = i\} = p_1$  и  $\mathbf{P}\{S_{n+1} = i \mid S_n = i\} = 1$  при  $i = 0, 1$ . Минимум  $\xi(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , совпадает с минимумом величин  $S_n$ ,  $n \geq 0$ . Следовательно, формулы (36) остаются справедливыми для вероятностей остановки случайного блуждания  $S_n$  в состояниях 0 и 1.

### 4.3. Стационарное распределение для марковской системы массового обслуживания

На множестве  $N^2$  рассмотрим марковский процесс  $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t))$ ,  $t \in [0, \infty)$ , со схемой превращений

$$T_1 \rightarrow T_1 + T_2; \quad T_2 \rightarrow 0.$$

Первое уравнение для функции  $G_{(\beta_1, \beta_2)}(t; z_1, z_2)$  имеет вид ( $\lambda > 0, \mu > 0$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial t} = \lambda z_1 \left( \frac{\partial^2 G_\beta(t; z)}{\partial z_1 \partial z_2} - \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_1} \right) + \\ + \mu z_2 \left( G_\beta(t; z) - \frac{\partial G_\beta(t; z)}{\partial z_2} \right) \end{aligned}$$

с начальным условием  $G_\beta(t; z) = z^\beta / \beta!$ . Второе уравнение для функции  $F_{(\alpha_1, \alpha_2)}(t; s_1, s_2)$  имеет вид

$$\frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial t} = \lambda(s_1 s_2 - s_1) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_1} + \mu(1 - s_2) \frac{\partial F_\alpha(t; s)}{\partial s_2}$$

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

Очевидно,  $\xi_1(t) \equiv \alpha_1$ . В теории массового обслуживания процесс  $\xi_2(t)$  интерпретируется как система  $M/M/\infty$  [3]. Имеется бесконечное число обслуживающих приборов, на которые поступает пуассоновский (марковский) входной поток заявок с интенсивностью  $\lambda \alpha_1$ , т. е. интервалы между временами поступления заявок

имеют распределение  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^1 \leq t\} = 1 - e^{-\lambda\alpha_1 t}$ . Величина  $\xi_2(t)$  есть случайное число занятых приборов. Случайное время обслуживания заявки каждым из занятых  $\alpha_2$  приборов имеет распределение  $\mathbf{P}\{\tau_j^2 \leq t\} = 1 - e^{-\mu t}$ ,  $j = 1, \dots, \alpha_2$  (марковская дисциплина обслуживания с интенсивностью  $\mu$ ). Приборы работают независимо друг от друга. Следовательно, время ожидания освобождения одного из них,  $\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)} = \min(\tau_1^2, \dots, \tau_{\alpha_2}^2)$ , имеет распределение  $\mathbf{P}\{\tau_{(\alpha_1, \alpha_2)}^2 \leq t\} = 1 - e^{-\mu\alpha_2 t}$ .

Рассмотрим предельные вероятности

$$q_{\alpha\beta} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{\alpha\beta}(t), \quad \alpha, \beta \in N^2.$$

Производящая функция

$$f_\alpha(s) = \sum_{\beta \in N^2} q_{\alpha\beta} s^\beta, \quad \alpha \in N^2,$$

удовлетворяет стационарному второму уравнению

$$\lambda(s_1 s_2 - s_1) \frac{\partial f_\alpha(s)}{\partial s_1} + \mu(1 - s_2) \frac{\partial f_\alpha(s)}{\partial s_2} = 0. \quad (37)$$

Скачки процесса  $(\xi_1(t), \xi_2(t))$  изображены на рис. 5, случай  $z$ . Множества  $K_{\alpha_1} = \{(\alpha_1, \alpha_2), \alpha_2 = 0, 1, 2, \dots\}$ ,  $\alpha_1 = 1, 2, \dots$  образуют классы сообщающихся состояний [7]. Для каждого класса имеем

$$\sum_{\beta \in K_{\alpha_1}} q_{\alpha\beta} = 1 \quad (38)$$

и  $f_\alpha(s) = s_1^{\alpha_1} f_{\alpha_1}(s_2)$ . После подстановки последнего выражения в (37) и преобразований получаем обыкновенное дифференциальное уравнение

$$-\alpha_1 \lambda f_{\alpha_1}(s_2) + \mu \frac{df_{\alpha_1}(s_2)}{ds_2} = 0.$$

Общее решение уравнения имеет вид  $C e^{\alpha_1 \lambda s_2 / \mu}$  [23]. Константу  $C$  найдем из условия (38):  $f_{\alpha_1}(1) = 1$ . Получим

$$f_{\alpha_1}(s_2) = e^{\alpha_1 \lambda (s_2 - 1) / \mu}.$$



Из определения функции  $f_{\alpha_1}(s_2)$  и разложения

$$e^{xs_2} = \sum_{\beta_2=0}^{\infty} \frac{x^{\beta_2}}{\beta_2!} s_2^{\beta_2},$$

приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $s_2$ , имеем пуассоновское стационарное распределение вероятностей для класса  $K_{\alpha_1}$ :

$$q_{(\alpha_1, \alpha_2)(\alpha_1, \beta_2)} = \frac{(\alpha_1 \lambda / \mu)^{\beta_2}}{\beta_2!} e^{-\alpha_1 \lambda / \mu}, \quad \beta_2 = 0, 1, 2, \dots$$

Существование предельного стационарного распределения в классе состояний  $K_{\alpha_1}$  следует из наличия нетривиального абсолютно суммируемого решения стационарной системы уравнений Колмогорова [3, гл. 1, § 5, теорема 4; 7, гл. 3, § 6], которое получено как решение уравнения (37).

В системе массового обслуживания  $M/M/\infty$  случайное число занятых приборов в стационарном режиме работы имеет пуассоновское распределение [3].

**З а м е ч а н и е 5.** Опишем способ вывода нелинейной системы уравнений для процессов с иммиграцией класса  $B_1$  [24, гл. 7, § 1] на примере схемы  $0 \rightarrow T; T \rightarrow 0$ . Очевидно, схема  $0 \rightarrow T; T \rightarrow 0$  эквивалентна схеме  $T_1 \rightarrow T_1 + T_2; T_2 \rightarrow 0$ , для которой система уравнений (22) имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_{(1,0)}(t; s_1, s_2)}{\partial t} = \\ = \lambda (F_{(1,0)}(t; s_1, s_2) F_{(0,1)}(t; s_1, s_2) - F_{(1,0)}(t; s_1, s_2)); \\ \frac{\partial F_{(0,1)}(t; s_1, s_2)}{\partial t} = \mu (1 - F_{(0,1)}(t; s_1, s_2)) \end{array} \right. \quad (39)$$

с начальными условиями  $F_{(1,0)}(0; s_1, s_2) = s_1, F_{(0,1)}(0; s_1, s_2) = s_2$ . Подставив соотношения

$$F_{(1,0)}(t; s_1, s_2) = s_1 F_0(t; s_2), \quad F_{(0,1)}(t; s_1, s_2) = F_1(t; s_2)$$

в (39), получим систему уравнений (полагаем  $s_2 = s$ ):

$$\begin{cases} \frac{\partial F_0(t; s)}{\partial t} = \lambda(F_0(t; s)F_1(t; s) - F_0(t; s)); \\ \frac{\partial F_1(t; s)}{\partial t} = \mu(1 - F_1(t; s)) \end{cases} \quad (40)$$

с начальными условиями  $F_0(0; s) = 1$ ,  $F_1(0; s) = s$ .

Для процесса с иммиграцией  $0 \rightarrow T$ ;  $T \rightarrow 0$  имеем переходные вероятности  $P_{ij}(t)$ ,  $i, j \in N$ , и производящую функцию

$F_i(t; s) = \sum_{j=0}^{\infty} P_{ij}(t)s^j$ . Нелинейное свойство ветвления принимает вид

$$F_i(t; s) = F_0(t; s)F_1^i(t; s), \quad i \in N,$$

где функции  $F_0(t; s)$  и  $F_1(t; s)$  находятся из системы уравнений (40).

В общем случае, если схема (23) содержит строку

$$0 \rightarrow \gamma_1^i T_1 + \dots + \gamma_n^i T_n,$$

то следует сделать замену на строку

$$T_{n+1} \rightarrow \gamma_1^i T_1 + \dots + \gamma_n^i T_n + T_{n+1}.$$

## Типовой расчет

При решении дифференциальных уравнений можно использовать пакеты программ Maple и Convode\* — аналитические решатели обыкновенных дифференциальных уравнений и систем, уравнений в частных производных первого порядка.

**Задача 1.** Для схемы взаимодействий марковского процесса класса  $B_2$  выписать первое и второе уравнения для производящих функций переходных вероятностей. Описать процесс  $\xi(t)$  через случайные времена  $\tau_\alpha$  и скачки на  $N^n$ . Указать наличие: иммиграции, финальных вероятностей (поглощающих состояний), стационарного распределения, возможность ухода на бесконечность.

Получить уравнения детерминированной модели. Найти точки стационарности системы дифференциальных уравнений.

1.  $T_1 + T_2 \rightarrow 2T_1; T_1 \rightarrow 0; T_2 \rightarrow 0; 0 \rightarrow T_1, T_2$  (модель общей эпидемии).

2.  $T_1 + T_2 \rightarrow 2T_2; 2T_1 \rightarrow T_1; T_1 \rightarrow 2T_1$ .

3.  $T_1 + T_2 \rightarrow 2T_1; T_1 \rightarrow T_3, T_2 + T_3$  (модель замкнутой эпидемии).

4.  $T_1 + T_2 \rightarrow T_2; T_1 \rightarrow 0, 2T_1; T_2 \rightarrow 0, 2T_2; 0 \rightarrow T_1, T_2$  (модель взаимодействия двух видов).

5.  $T_1 + T_2 \rightarrow 0, 2T_1; T_2 \rightarrow 2T_2; T_1 \rightarrow 0$  (система «хищник—жертва»;  $p_2 > p_0$ ).

6.  $3T \rightarrow 2T; 2T \rightarrow 3T; T \rightarrow 0; 0 \rightarrow T$  (бистабильная система).

7.  $T_1 + T_2 \rightarrow 2T_1; T_1 \rightarrow 0; 0 \rightarrow T_2$  (модель повторяющейся эпидемии).

8.  $T_1 + T_2 \rightarrow T_1, T_2; 2T_1 \rightarrow T_1; 2T_2 \rightarrow T_2; T_1 \rightarrow 2T_1; T_2 \rightarrow 2T_2$  (модель конкуренции двух видов).

9.  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3; T_3 \rightarrow T_2 + T_4; 0 \rightarrow T_1$  (система массового обслуживания).

10.  $T_1 + T_2 \rightarrow 0, 2T_1; T_2 \rightarrow 2T_2; T_1 \rightarrow 0; 0 \rightarrow T_1, T_2$  (система «хищник—жертва» с иммиграцией;  $p_2 > p_0$ ).

\* <http://www.physique.fundp.ac.be/administration/convode2.html>

**Задача 2.** Для схемы превращений  $T \rightarrow kT$  марковского процесса класса  $B_1$  выписать первое, второе и третье уравнения для производящих функций переходных вероятностей. Описать процесс  $\xi(t)$  через случайные времена  $\tau_i$  и скачки на  $N$  при данной производящей функции  $h(s)$ .

Найти математическое ожидание  $A_i(t)$  и дисперсию  $D_i(t)$  при начальном состоянии процесса  $i$ . Найти явное выражение для  $F_1(t; s)$ . Рассмотреть функцию  $F_i(t; s)$  при  $t \rightarrow \infty$  и сделать вывод о предельном поведении ветвящегося процесса  $\xi(t)$ .

1.  $h(s) = 1$ .

2.  $h(s) = s^2$ .

3.  $h(s) = p_2 s^2 + p_0, p_2 + p_0 = 1, p_2 \neq p_0$ .

4.  $h(s) = \frac{1}{2} s^2 + \frac{1}{2}$ .

5.  $h(s) = s^3$ .

6.  $h(s) = 1 - (1 - s)^\alpha, 0 < \alpha < 1$ .

7.  $h(s) = s + (1 - s) \ln(1 - s)$ .

8.  $h(s) = s + \lambda(1 - s)^{1+\alpha}, \lambda > 0, 0 < \alpha < 1$ .

9.  $h(s) = \frac{1}{2} s^3 + \frac{1}{2} s^2$ .

10.  $h(s) = \frac{1}{4} s^4 + \frac{3}{4} s^3$ .

**Задача 3.** Для схемы превращений марковского процесса класса  $B_1$  выписать первое, второе и третье уравнения для производящих функций переходных вероятностей. Описать процесс  $\xi(t)$  через случайные времена  $\tau_\alpha$  и скачки на  $N^n$ .

Найти математические ожидания  $A_i(t)$  и дисперсии  $D_i(t)$  путем дифференцирования второго уравнения (в соответствии со схемой задать начальные условия с нулевым числом частиц некоторых типов). Построить графики функций  $A_i(t)$  и  $A_i(t) \pm \sqrt{D_i(t)}$ . Найти явные выражения для одночастичных производящих функций и выписать нелинейное свойство ветвления (выполнить проверку вычислений согласно замечанию 3). Рассмотреть предельное поведение процесса  $\xi(t)$  при  $t \rightarrow \infty$ .

1.  $0 \rightarrow 2T_1, T_2$ .

2.  $T_1 \rightarrow 0, T_2; T_2 \rightarrow 0$ .

3.  $T_1 \rightarrow 0, T_1 + 2T_2.$
4.  $T_1 \rightarrow T_2; 0 \rightarrow T_1.$
5.  $T_1 \rightarrow 0; T_2 \rightarrow 0, T_1 + T_2.$
6.  $T \rightarrow kT, k = 0, 2; 0 \rightarrow T.$
7.  $T_1 \rightarrow T_2; T_2 \rightarrow T_1.$
8.  $T_1 \rightarrow T_2 + T_3; T_2 \rightarrow T_3.$
9.  $T_1 \rightarrow T_1 + T_2, 2T_1, 2T_1 + 2T_2.$
10.  $T_1 \rightarrow 3T_2; T_2 \rightarrow 2T_3.$

**Задача 4.** Для схемы взаимодействий марковского процесса класса  $B_2$  выписать первое и второе уравнения для производящих функций переходных вероятностей. Описать процесс  $\xi(t)$  через случайные времена  $\tau_\alpha$  и скачки на  $N^n$ . Найти классы сообщающихся состояний в множестве  $N^n$ . Найти производящую функцию стационарного распределения при данном начальном состоянии.

1.  $2T \rightarrow T; T \rightarrow 2T, \quad i = 3.$
2.  $T_1 + T_2 + T_3 \rightarrow T_2 + T_4; T_2 + T_4 \rightarrow T_1 + T_2 + T_3, \quad \alpha = (2, 1, 1, 0).$
3.  $3T_1 + T_3 \rightarrow 2T_2; 2T_2 \rightarrow 3T_1 + T_3, \quad \alpha = (4, 1, 1).$
4.  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3; T_3 \rightarrow T_1 + T_2, \quad \alpha = (1, 1, 1).$
5.  $T_1 \rightarrow T_2, T_3; T_2 \rightarrow T_3; T_3 \rightarrow T_1, \quad \alpha = (0, 1, 0).$
6.  $T_1 + 2T_2 \rightarrow T_1 + T_2; T_1 + T_2 \rightarrow T_1 + 2T_2, \quad \alpha = (1, 1).$
7.  $2T_1 \rightarrow T_2, T_3; T_2 \rightarrow 2T_1; T_3 \rightarrow 2T_1, \quad \alpha = (3, 0, 0).$
8.  $2T_1 + T_2 \rightarrow T_3; T_3 \rightarrow 2T_1 + T_2, \quad \alpha = (1, 1, 1).$
9.  $T \rightarrow kT, k = 0, 2; 0 \rightarrow T, \quad i = 0.$
10.  $T_1 + T_2 \rightarrow T_1 + T_3, T_2 + T_3; T_2 + T_3 \rightarrow T_1 + T_3, T_1 + T_3;$   
 $T_1 + T_3 \rightarrow T_1 + T_2, T_2 + T_3, \quad \alpha = (1, 0, 1).$

**Задача 5.** Для схемы взаимодействий, приведенной в задаче 1, составить программы численной реализации на ЭВМ детерминированной и стохастической моделей. Построить графики:

- а) траектории детерминированной модели  $x_i(t)$  и реализации стохастической модели  $\xi_i(t)$  в зависимости от  $t, i = 1, \dots, n;$
- б) траектории детерминированной модели на фазовых плоскостях  $x_i, x_j, i, j = 1, \dots, n (i \neq j);$
- в) реализации стохастической модели  $\xi_i(t), \xi_j(t)$  на множестве  $N^2, i, j = 1, \dots, n (i \neq j);$
- г) траекторий и реализаций на одной фазовой плоскости.

Статистическими экспериментами определить порядок начального состояния  $\alpha$ , при котором стохастические реализации близки к детерминированным траекториям (если такая близость имеется). Рассмотреть поведение детерминированной и стохастической моделей при  $t \rightarrow \infty$ . Исследовать поведение детерминированной и стохастической моделей в зависимости от параметров (во втором уравнении параметр  $\lambda$  при старшей производной положить равным единице).

**Задача 6.** Основываясь на результатах исследований, приведенных в задачах 1 и 5, построить для марковского процесса гистограмму финального распределения, или стационарного распределения, используя метод Монте-Карло — многократного численного моделирования процесса  $\xi(t)$  (при большом промежутке времени моделирования  $[0, T_0]$ ).

Исследовать, как изменяются гистограммы в зависимости от одного из параметров (либо один из параметров  $\lambda$ , либо начальное число частиц — по указанию преподавателя). Возможны ли значения параметров, когда гистограмма близка к плотности нормального закона, или плотности показательного распределения, или другому известному вероятностному распределению?

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### Темы курсовых работ

1. В [17] рассчитана детерминированная модель для кинетической схемы  $T_1 \rightarrow T_2, T_3; T_2 \rightarrow T_1, T_3; T_3 \rightarrow T_1, T_2$ . Провести аналитическое исследование соответствующего марковского процесса класса  $B_1$ . Установить предельную теорему для стационарного распределения при большом числе начальных частиц.

2. В [17] рассчитана детерминированная модель для схемы превращений  $T_1 \rightarrow T_2, T_3; T_2 \rightarrow T_1, 2T_3$ . Провести аналитическое исследование соответствующего марковского процесса класса  $B_1$ . Установить предельную теорему для числа финальных частиц типа  $T_3$  при начальном состоянии  $(\alpha_1, 0, 0)$  и  $\alpha_1 \rightarrow \infty$ .

3. Найти явное выражение для финальных вероятностей процесса класса  $B_2$  со схемой взаимодействий  $2T_1 + 2T_2 \rightarrow 4T_1, 4T_2$ . При рассмотрении граничной задачи для стационарного первого уравнения использовать общее решение уравнения гиперболического типа

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} = 0,$$

которое имеет вид

$$u(x, y) = (x + y)\varphi(x - y) + (x - y)\psi(x + y) + \varphi_1(x - y) + \psi_1(x + y),$$

где  $\varphi, \varphi_1, \psi, \psi_1$  — произвольные четырежды непрерывно дифференцируемые функции [2, задача 546].

4. Схемы вида (5) позволяют учитывать случайное время взаимодействия комплекса частиц. Например, при замене схемы  $T_1 + T_2 \rightarrow T_3$  схемой  $T_1 + T_2 \rightarrow T_4; T_4 \rightarrow T_3$  частица дополнительного типа  $T_4$  определяет время взаимодействия. Исследовать поведение соответствующих детерминированных и стохастических моделей в зависимости от параметров. Переходит ли модель второй схемы в модель первой схемы, если соответствующий превращению  $T_4 \rightarrow T_3$  параметр  $\lambda$  стремится к бесконечности?

5. В химической кинетике полагается, что тримолекулярная реакция  $3T \rightarrow 2T; 2T \rightarrow 3T$  осуществляется в несколько стадий:  $T_1 + T_2 \rightarrow T_2; T_2 \rightarrow T_1 + T_2; 2T_1 \rightarrow T_2; T_2 \rightarrow 2T_1$  ([6, § 7.7.6]). Рассмотреть в зависимости от параметров близость соответствующих детерминированных и стохастических моделей, устремляя к бесконечности параметр  $\lambda$  для короткоживущего промежуточного соединения  $T_2$ .

6. Для открытой системы с катализатором  $0 \rightarrow T_1; T_1 \rightarrow 0; T_1 + T_2 \rightarrow T_2 + T_3$  [4] рассмотреть стационарное распределение числа частиц типа  $T_1$  и распределение финального продукта  $T_3$  при  $t \rightarrow \infty$ .

7. В [21] рассмотрена детерминированная модель распространения инфекционного заболевания в виде системы дифференциальных уравнений ( $\lambda > 0, \mu > 0, \rho > 0$ )

$$\dot{x}_1 = \rho x_3 - \lambda x_1 x_2; \quad \dot{x}_2 = \lambda x_1 x_2 - \mu x_2, \quad \dot{x}_3 = \mu x_2 - \rho x_3$$

с начальными условиями  $x_1(0) = x_1^0$ ,  $x_2(0) = x_2^0$ ,  $x_3(0) = x_3^0$ . Функциям  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $x_3(t)$ ,  $t \in [0, \infty)$ , соответствует численность восприимчивых (S), зараженных (E) и заболевших (I) индивидуумов в популяции. Составить схему взаимодействий и исследовать стохастическую модель распространения эпидемии.

8. В [27] описана эпидемия типа SEIR (S — восприимчивые, E — в инкубации, I — инфекционные, R — переболевшие индивидуумы) с очень коротким инкубационным периодом (E) и аэрогенным механизмом передачи возбудителя ( $I \rightarrow S$ ). Составить схему взаимодействий и исследовать соответствующую марковскую модель. Использовать данные в [26] и [14, § 3.3.2] схемы взаимодействий для моделей эпидемии типа SEIRF и SEIRS.

9. Для приближенного решения систем нелинейных алгебраических уравнений применяется статистическое моделирование методом Монте-Карло ветвящихся процессов класса  $B_1$  [10, стр. 279]. Обобщить метод [10] на случай процессов класса  $B_2$ . Составить программы численной реализации на ЭВМ.

10. В [11] описаны способы приближенного решения линейных дифференциальных уравнений в частных производных методом статистического моделирования. Предложить аналогичный способ для приближенного решения уравнений вида (10) на основе представления  $F_\alpha(t; s) = \mathbf{M}(s^{\xi(t)} \mid \xi(0) = \alpha)$ . Составить программы численной реализации на ЭВМ.



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Баруча-Рид А.Т.* Элементы теории марковских процессов и их приложения: Пер. с англ. М.: Наука, 1969. 512 с.
2. *Бицадзе А.В., Калинин Д.Ф.* Сборник задач по уравнениям математической физики. Изд. 2-е. М.: Наука, 1985. 312 с.
3. *Бочаров П.П., Печинкин А.В.* Теория массового обслуживания. М.: Изд-во РУДН, 1995. 529 с.
4. *Ван Кампен Н.Г.* Стохастические процессы в физике и химии: Пер. с англ. М.: Высш. шк., 1990. 376 с.
5. *Волков И.К., Зуев С.М., Цветкова Г.М.* Случайные процессы: Учеб. для вузов / Под ред. В.С. Зарубина, А.П. Крищенко. 2-е изд., стереотип. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 448 с.
6. *Гардинер К.В.* Стохастические методы в естественных науках: Пер. с англ. М.: Наука, 1985.
7. *Гихман И.И., Скороход А.В.* Введение в теорию случайных процессов. М.: Наука, 1977. 568 с.
8. *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. Изд. 2-е: Пер. с англ. М.: Едиториал УРСС, 2003. 280 с.
9. *Демидов С.А., Калинин А.В., Стрыгина Л.А.* Ветвящийся процесс со схемой взаимодействий частиц вида «хищник — жертва» // Обзорение прикладной и промышленной математики. Вероятность и статистика. 1999. Т. 6, № 1. С. 137–138 (<http://hoster.bmstu.ru/~kalinkin/markov/markov.htm#volterra>).
10. *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976. 320 с.
11. *Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984. 206 с.
12. *Завада К.Г., Вржещ П.В.* Предстаационарная кинетика ферментативных реакций. Полное решение и анализ трехстадийной системы: Учеб. пособие / МГУ. М.: Макс Пресс, 2003. 63 с.
13. *Калинкин А.В.* Ветвящийся процесс с взаимодействием частиц // Вероятность и математическая статистика: Энцикл. М.: Большая Российская энциклопедия, 1999. С. 104.
14. *Калинкин А.В.* Марковские ветвящиеся процессы с взаимодействием // Успехи математических наук. 2002. Т. 57, № 2. С. 23–84 ([http://hoster.bmstu.ru/~kalinkin/branching/kalin2u\\_ps.zip](http://hoster.bmstu.ru/~kalinkin/branching/kalin2u_ps.zip)).

15. *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. «Естественные науки». 2005. Вып. 2(17). С. 53–74 (<http://hoster.bmstu.ru/~kalinkin/branching/53-74.zip>).

16. *Камке Э.* Справочник по дифференциальным уравнениям в частных производных первого порядка: Пер. с нем. М.: Наука, 1966. 260 с.

17. *Леонтович М.А.* Основные уравнения кинетической теории газов с точки зрения теории случайных процессов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1935. Т. 5, № 3–4. С. 211–231.

18. *Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б.* Современные проблемы нелинейной динамики. Изд. 2-е. М.: Едиториал УРСС, 2002. 336 с.

19. Математические методы в теории надежности / Г.Д. Карташов, О.И. Тескин, О.А. Бархатова, С.М. Швартин. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1982. 32 с.

20. *McQuarrie D.A.* Stochastic approach to chemical kinetic // J. Appl. Probability. 1967. V. 4. P. 413–478.

21. *Перцев Н.В.* Математические модели взаимодействующих популяций: Учебное пособие / ОмГУ. Омск: Изд-во «Полиграфический центр КАН», 2003. 88 с.

22. *Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш.* Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1977. 552 с.

23. Сборник задач по математике для вузов: Учеб. пособие для вузов. Ч. 2: Специальные разделы математического анализа / Под ред. А.В. Ефимова, Б.П. Демидовича. М.: Наука, 1986. 464 с.

24. *Севастьянов Б.А.* Ветвящиеся процессы. М.: Наука, 1971. 436 с.

25. *Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г.* Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1974. 400 с.

26. Эпидемии процесс // Математическая энциклопедия. Т. 5. М.: Сов. энцикл., 1985. Кол. 1008.

27. Эпидемиологическая кибернетика: Модели, информация, эксперименты: Сб. науч. тр. / Под ред. Б.В. Боева. М.: НИИЭМ им. Н.Ф. Гамалеи АМН СССР, 1991. 216 с.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>1. Основные определения</b> .....	3
1.1. Детерминированные модели для схем взаимодействий .....	3
1.2. Марковские процессы с дискретными состояниями. Уравнения Колмогорова .....	5
<b>2. Марковские процессы класса <math>B_2</math></b> .....	6
2.1. Стохастические модели для схем взаимодействий .....	6
2.2. Первое и второе уравнение в производящих функциях .....	8
2.3. Бимолекулярная реакция. Закон действующих масс .....	11
2.4. Тримолекулярная реакция .....	13
2.5. Брюсселятор .....	16
<b>3. Марковские процессы класса <math>B_1</math></b> .....	19
3.1. Третье уравнение теории ветвящихся процессов .....	19
3.2. Мономолекулярные реакции. Предельная теорема .....	20
3.3. Аналитическое исследование последовательной схемы .....	23
<b>4. Финальные и стационарные вероятности</b> .....	28
4.1. Стационарные уравнения .....	28
4.2. Финальные вероятности для схемы $2T \rightarrow kT$ , $k = 0, 1$ .....	29
4.3. Стационарное распределение для марковской системы массового обслуживания .....	31
Приложение 1. Типовой расчет .....	35
Приложение 2. Темы курсовых работ .....	38
<b>Список литературы</b> .....	41

*Учебное издание*

**Калинкин Александр Вячеславович**

**СХЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ: ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ  
И СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ**

Редактор *С.А. Серебрякова*

Корректор *Л.И. Малютина*

Компьютерная верстка *В.И. Товстоног*

Подписано в печать 10.01.2009. Формат 60×84/16. Бумага офсетная.

Усл. печ. л. 2,56. Уч.-изд. л. 2,35. Тираж 300 экз. Изд. № 165.

Заказ

Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана

Типография МГТУ им. Н.Э. Баумана

105005, Москва, 2-я Бауманская ул., 5