|  |  |
| --- | --- |
|  | **Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  **высшего образования**  **«Московский государственный технический университет**  **имени Н.Э. Баумана**  **(национальный исследовательский университет)»**  **(МГТУ им. Н.Э. Баумана)** |

ФАКУЛЬТЕТ «Фундаментальные науки»

КАФЕДРА «Вычислительная математика и математическая физика» (ФН-11)

**РАСЧЁТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА**

**к курсовой работе на тему:**

*Исследование бистабильных систем методами стохастического моделирования кинетических схем*

Дисциплина: *Численные методы*

Студент группы ФН11-62Б  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_** М.Х. Хаписов

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Руководитель курсовой работы,

канд. физ.-мат. наук, доцент  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_** Т.В. Облакова

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Оценка: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Москва, 2023

# СОДЕРЖАНИЕ

[ВВЕДЕНИЕ](#_ВВЕДЕНИЕ) 3

[1 Теоретическая часть 4](#_1_Теоретическая_часть)

[1.1 Непрерывные марковские процессы со счётным множеством состояний 4](#_1.1_Непрерывные_марковские)

[1.2 Стохастические модели для схем взаимодействий](#_1.2_Стохастические_модели) 9

[1.3 Производящие функции](#_1.2_Производящие_функции) 11

[1.4 Уравнение Фоккера-Планка 1](#_1.3_Уравнение_Фоккера-Планка)3

[1.5 Причины возникновения бистабильного поведения термодинамической системы 1](#_1.5_Причины_возникновения)4

2 [Практическая часть 1](#_2_Анализ_модели)6

[2.1 Составление стохастической модели 1](#_2.1_Составление_стохастической)6

[2.2 Детерминированный подход 1](#_2.1_Детерминированный_подход)8

[2.3 Нахождение плотности эволюции системы](#_2.2_Уравнение_Фоккера-Планка)22

[2.4 Стационарные решения детерминированного уравнения](#_2.3_Стационарные_решения)24

[2.5 Анализ особых точек детерминированного уравнения](#_2.5_Анализ_особых)26

[2.5.1 Анализ особых точек системы с бистабильным поведением](#_2.5.1_Анализ_особых)27

[2.5.2 Анализ особых точек системы с моностабильным поведением](#_2.5.2_Анализ_особых)31

[2.6 Сравнение детерминированной и стохастической моделей](#_2.6_Сравнение_детерминированной)35

[2.6.1 Система с бистабильным поведением](#_2.6.1_Система_с)35

[2.6.2 Система с моностабильным поведением](#_2.6.2_Система_с)41

[ЗАКЛЮЧЕНИЕ](#_ЗАКЛЮЧЕНИЕ) 47

[СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ) 48

ПРИЛОЖЕНИЕ А 49

# ВВЕДЕНИЕ

При изучении различных кинетических схем взаимодействий могут встречаться модели с моностабильным и бистабильным поведением. Бистабильность динамической системы означает, что она имеет два равновесных состояния. При этом детерминированный и стохастический анализы этих схем могут давать совершенно разные результаты.

Целью данной курсовой работы является исследование бистабильных систем методами стохастического моделирования кинетических схем.

Объектом данной курсовой работы является составление стохастической и детерминированной моделей системы, нахождение плотности эволюции системы и анализ особых точек детерминированного уравнения.

# 1 Теоретическая часть

## 1.1 Непрерывные марковские процессы со счётным множеством состояний

Для начала определим некоторые важные для дальнейшего рассмотрения понятия. Рассмотрим случайный процесс , где – неслучайный параметр, играющий роль времени. Зафиксируем параметр : пусть . Тогда будем называть *сечением* этого случайного процесса. [1] Наконец, дадим определение марковскому процессу. Для этого рассмотрим некоторый счётный или конечный набор сечений данного случайного процесса:

, где

Если набор конечен и число сечений равно , будем считать, что .

Будем называть случайный процесс *марковским*, если

То есть значение процесса на -ом шаге зависит только от значения процесса на предыдущем, -ом шаге и не зависит от предыдущих результатов.

Марковский случайный процесс с дискретными состояниями и с дискретным временем называется *марковской цепью*. Для таких процессов моменты времени , в которые происходит смена состояния системы, рассматриваются как последовательные шаги процесса, а аргументом процесса служит не время , а номер шага.

Будем называть переходной вероятностью вероятность перехода из состояния в состояние на -ом шаге. Можно рассматривать матрицу переходных вероятностей . В случае конечного числа состояний N принимаем, что при

Пусть – множество -мерных векторов с неотрицательными целочисленными компонентами. Обозначим переходные вероятности [2]

Свойства матрицы переходных вероятностей:

1. Условие неотрицательности:
2. Каждая строка матрицы характеризует данное состояние системы. Элементами строки в матрице являются вероятности переходов за один шаг из данного состояния в любое.
3. Элементы столбцов показывают вероятности переходов из любых состояний в данное.
4. Матрица переходных вероятностей является стохастической, то есть сумма элементов любой её строки равна 1, так как переходы образуют полную группу несовместных событий.
5. Любой элемент главной диагонали представляет собой вероятность того, что система останется в том же состоянии.
6. Пусть – вектор вероятностных состояний системы на -ом шаге. Тогда , где – вектор вероятностных состояний системы на -ом шаге, – матрица переходных вероятностей
7. Марковское свойство:
8. Условие стохастической непрерывности:

При многократном применении свойства 5 получаем

Здесь – вектор исходных вероятностей. [3]

Из свойства 7 вытекает уравнение Колмогорова-Чепмена

Если переходные вероятности не зависят от , то такая марковская цепь называется однородной. В таком случае, матрица переходных вероятностей становится постоянной, потому что она более не зависит от номера шага, и верна формула

Марковский случайный процесс с дискретными состояниями и непрерывным временем называется *непрерывной цепью Маркова*при условии, что переход системы из состояния в состояние про­исходит не в фиксированные, а в случайныемоменты времени.

Пусть система характеризуется счётным или конечным числом состояний , и переход из состояния в состояние может происходить в любой момент времени. Обозначим вероятность пребывания системы в состоянии в момент времени за . Требуется определить вероятности для любого момента времени . Для конечного числа состояний принимаем, что . Для процесса с непрерывным временем вместо переходных вероятностей рассматриваются плотности вероятностей перехода , причём

Если , то такой процесс называется однородным

При рассмотрении непрерывных марковских процессов приня­то представлять переходы системы S из состояния в состояние как происходящие под влиянием некоторых потоков событий. *Потоком событий* называется последовательность однородных событий, следующих одно за другим через какие-то, вообще говоря, случайные интервалы времени. Плотность вероятности перехода интерпретируется как интенсивность соответствующих потоков. Если все потоки пуассоновские, то процесс будет марковским. [3]

Пусть система S имеет конечное или счётное число состояний Тогда случайный процесс, протекающий в этой системе, описывается вероятностями , при этом

Здесь также считается, что, если набор конечен и число состояний равно , принимаем, что .

Вероятности состояний находятся путём решения системы дифференциальных уравнений Колмогорова

Уравнения составляют по размеченному графу состояний системы, пользуясь следующим мнемоническим правилом:

Производная вероятности каждого состояния равна сумме всех потоков ве­роятности, идущих из других состояний в данное состояние, минус сумма всех потоков вероятности, идущих из данного состояния в другие. [3]

Марковские цепи с непрерывным временем задаются инфинитезимальной матрицей . В однородном процессе, когда , .

Если инфинитезимальная матрица постоянна, то есть если процесс однороден, переходные вероятности удовлетворяют следующим системам дифференциальных уравнений:

Первая система уравнений называется прямыми уравнениями Колмогорова, вторая – обратными уравнениями Колмогорова.

Действительно, из уравнения Колмогорова-Чепмена (1.1) следует, что

Таким образом, получили прямое уравнение Колмогорова.

Если продифференцировать уравнение Колмогорова-Чепмена по при , получим

– обратное уравнение Колмогорова

## 1.2 Стохастические модели для схем взаимодействий

Схемы взаимодействий часто применяются в различных областях естествознания и техники. Запишем общую схему комплексов взаимодействий элементов типа

Каждому вектору сопоставим распределение вероятностей

и следующий набор чисел

где – интенсивность взаимодействия, – количество частиц типа

Процесс интерпретируется как стохастическая модель системы взаимодействующих частиц типов . Событие – это состояние системы, в котором в момент времени имеется такая совокупность частиц, что

Через случайное время происходит взаимодействие комплекса частиц

В этот момент из частиц типа выбирается частиц, … , из частиц типа выбирается частиц и этот комплекс с распределением вероятностей заменяется совокупностью частиц.

Система находится в состоянии случайное время до тех пор, пока не произойдет какое-либо из взаимодействий, т.е. . При этом предполагается, что случайные величины независимы. Поэтому,

## 1.3 Производящие функции

Для марковских процессов уравнения для переходных вероятностей можно записать в компактном виде, используя производящие функции. Многомерной производящей функцией , соответствующей целочисленному случайному вектору с распределением вероятностей , называется сумма ряда

Далее примем следующую систему обозначений

Производящая функция удовлетворяет мультипликативному свойству: пусть – независимые случайные векторы, тогда производящая функция их суммы равна произведению производящих функций слагаемых, то есть

В частности, если – независимые одинаково распределённые случайные векторы, то

Пусть случайный процесс подчинён схеме взаимодействий (1.6), в которой участвуют элементы типов

Тогда для свёртки обратной системы дифференциальных уравнений Колмогорова (1.5) можно ввести экспоненциальные производящие функции для переходных вероятностей и линейные дифференциальные операторы

Теорема 1. Экспоненциальная производящая функция переходных вероятностей марковского процесса при любом удовлетворяет следующему линейному дифференциальному уравнению в частных производных

Для свёртки прямой системы дифференциальных уравнений Колмогорова используют следующие производящие функции

Теорема 2. Производящая функция переходных вероятностей марковского процесса при любом удовлетворяет следующему линейному дифференциальному уравнению в частных производных

Причём функции являются аналитическими в рассматриваемых областях.

## 1.4 Уравнение Фоккера-Планка

Рассмотрим дифференциальный оператор второго порядка с непрерывными коэффициентами

Запишем для него прямое уравнение Колмогорова

Это уравнение называется уравнением Фоккера-Планка, вектор – вектором сноса, – тензором диффузии.

Обратное уравнение Колмогорова в этом случае даёт следующий результат

В одномерном случае уравнение Фоккера-Планка записывается в следующем виде

## 1.5 Причины возникновения бистабильного поведения термодинамической системы

Исследование проблемы устойчивости стационарного состояния приводит к термодинамическому критерию устойчивости – обращению в нуль избыточного производства энтропии . В общем случае о знаке величины избыточного производства энтропии ничего сказать нельзя. Заметим, однако, что если она положительна, то вторая вариация энтропии будет функцией Ляпунова и стационарное состояние будет асимптотически устойчивым. Если же она отрицательна, то стационарное состояние будет неустойчивым. Обращение в нуль избыточного производства энтропии будет соответствовать состоянию, переходному между асимптотической устойчивостью и неустойчивостью (это будет состояние нейтральной устойчивости). Далее, поскольку в линейной области стационарное состояние было асимптотически устойчивым, вследствие непрерывности можно предположить, что оно будет устойчивым также в некоторой части нелинейной области. Вблизи равновесия стационарные состояния всегда устойчивы и производство энтропии положительно. По мере удаления системы от равновесия избыточное производство энтропии может изменить знак. Система при этом теряет устойчивость и эволюционирует в другие состояния, которые были названы диссипативными структурами. Переход в такие состояния получил название неравновесного фазового перехода.

Необходимым условием нарушения устойчивости химической системы является наличие автокаталитической стадии.

Рассмотрим, например, мономолекулярную реакцию с константами и . Тогда где – универсальная газовая постоянная, – концентрация молекул .

Теперь рассмотрим автокаталитическую реакцию с константами и . В этом случае , где – концентрация молекул . Отсюда видно, что при избыточное производство энтропии и система устойчива. Если же , то избыточное производство энтропии меняет знак и система может потерять устойчивость.

Таким образом, автокаталитическая реакция может дестабилизировать систему. Естественно, что отдельная реакция не может породить неустойчивость и образовать диссипативную структуру, поскольку в ней всегда устанавливается равновесие. Однако автокаталитическая реакция может входить в совокупность реакций, протекающих в открытой системе и в этом случае возможно появление неустойчивости.

Кроме этого, система должна описываться нелинейными уравнениями. Только учет нелинейности может приводить к качественно новому поведению системы. Модельные химические системы (модель Шлегля, брюсселятор и др.), по сути, стали своеобразным "полигоном" для апробации новых идей и концепций и именно для них были впервые сформулированы основные положения теории самоорганизации. [4]

# 2 Практическая часть

Будем анализировать упрощённую версию модели Шлёгля, которая считается простейшей возможной одномерной бистабильной системой

## 2.1 Составление стохастической модели

Рассмотрим систему (2.1), состоящую только из одного типа частиц. Каждое взаимодействие происходит с заданной интенсивностью . Значение соответствует интенсивности появление новой частицы , гибель частицы, соответствует интенсивности преобразования 2 частиц в 3 частицы того же типа, аналогично соответствует интенсивности преобразования 3 частиц в 2 частицы того же типа.

Пусть – число частиц в произвольный момент времени , – непрерывный Марковский процесс на дискретном счетном множестве состояний для .

Согласно общей схеме взаимодействий (1.6) выпишем значения и для

При этом каждому соответствует свой набор чисел , согласно (1.7). Для схемы (2.1) получаем следующий набор чисел

С учетом заданных комплексов взаимодействий частиц , соответствующих значениям . Через случайное время :

происходит взаимодействие комплекса частиц . В этот момент из частиц выбирается частиц, и этот комплекс с распределением вероятностей заменяется совокупностью частиц.

Система находится в состоянии случайное время до тех пор, пока не произойдет какое-либо из 4 взаимодействий, т.е. [2].

При моделировании стохастической модели для схемы взаимодействий (2.1) реализации случайного процесса на ЭВМ используется метод Монте-Карло [5]. Суть метода заключается в многократном использовании генератора случайных чисел для описания математической модели. Для процесса задаются интенсивности , начальное количество частиц и промежуток времени .

## 2.2 Детерминированный подход

Запишем с помощью экспоненциальной производящей функции обратную систему дифференциальных уравнений Колмогорова для переходных вероятностей с помощью (4) и (5)

Аналогично запишем прямую систему дифференциальных уравнений Колмогорова с помощью производящей функции с помощью (6) и (7)

Продифференцируем это уравнение по

Введём обозначение для среднего числа частиц и подставим его в

Будем считать, что при справедливы приближения

Учитывая также, что

Приходим к уравнению детерминированной модели

где – количество молекул вещества [2]

Составим задачу Коши

где – исходное число частиц.

Примем новые обозначения . Тогда, решая дифференциальное уравнение, получаем

Для вычисления интеграла найдём корни многочлена в знаменателе

Пусть . Тогда, после раскрытия скобок и приведения подобных слагаемых, получим

Примем следующие обозначения

Тогда, по формуле Кардано, получаем, что корни многочлена (2.6) равны

Наконец, вычислим исходный интеграл

Этот случайный процесс относится к обобщённым процессам рождения и гибели кубического типа.

Детерминированный подход хорошо описывает поведение данного процесса при большом количестве молекул, что даёт возможность пренебречь стохастическими флуктуациями. [6]

## 2.3 Нахождение плотности эволюции системы

Рассмотрим уравнение Фоккера-Планка для данной модели Шлёгля

где

При уравнение Фоккера-Планка становится стационарным и не зависит от времени, поэтому можно записать

Решая это уравнение, получим

где – константа, нормализующее распределение. Можно показать, что это решение является точным для систем с гауссовым белым шумом [6].

Рассмотрим подынтегральное выражение в (2.12)

Введём следующие обозначения

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Тогда  Теперь, с учётом (2.23) и (2.24), получаем  где можно получить из условия нормировки |  |
|  |  |

## 2.4 Стационарные решения детерминированного уравнения

Стационарное решение дифференциального уравнения (2.4) реализуется при . Корни этого многочлена уже были найдены ранее в (2.8). Заметим, что все эти корни действительны и различны тогда и только тогда, когда найденный в (2.7) . Решая это неравенство, получаем соответствующее неравенство для дискриминанта кубического многочлена

При система бистабильна с одной нестабильной фиксированной точкой между двумя стабильными фиксированными точками, при система моностабильна. Переход от моностабильности к бистабильности происходит через бифуркацию седлового узла [6].

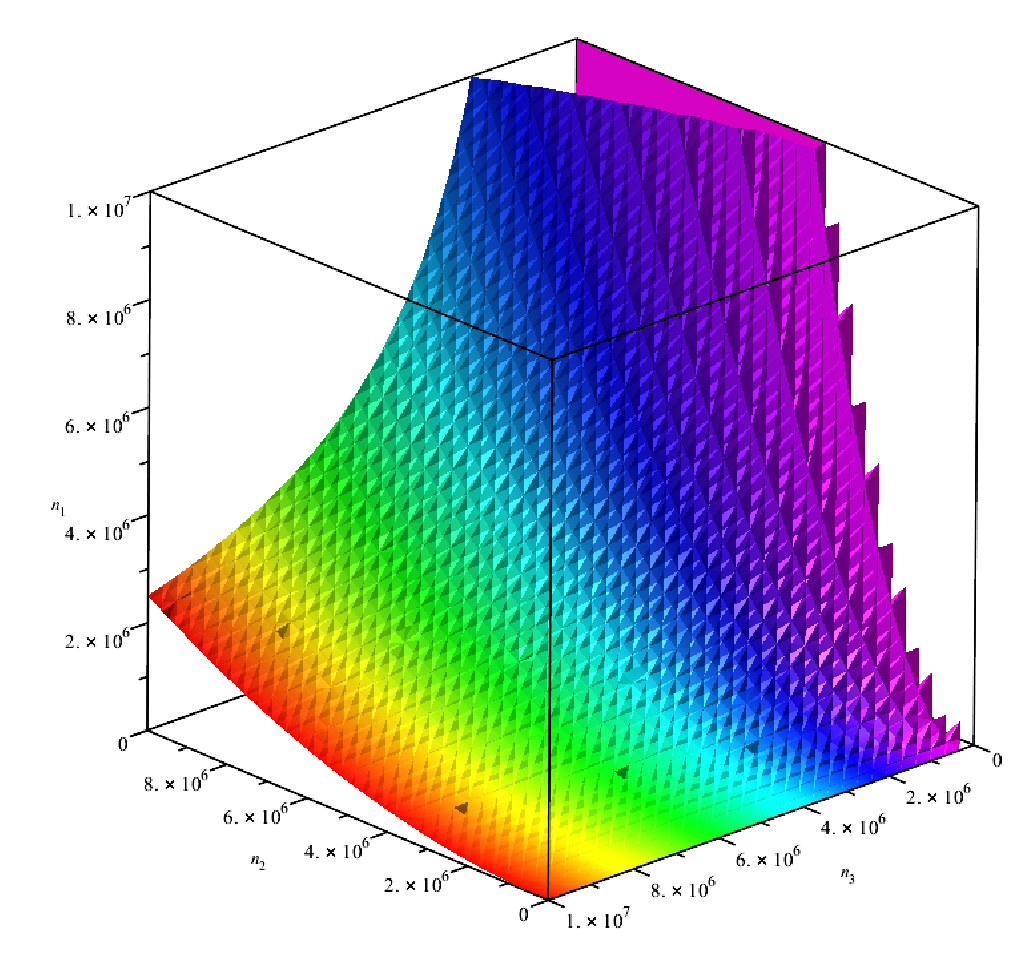
**

Рисунок 1 – графическое решение уравнения (2.27), где

## 2.5 Анализ особых точек детерминированного уравнения

Особые точки детерминированной модели найдём из уравнения

Решая уравнение, получим 3 особые точки, найденные в (2.8) [7].

Рассмотрим уравнение детерминированной модели (2.4)

Так как это уравнение нелинейно относительно , будем рассматривать линеаризованное уравнение. Для этого найдём первую производную выражения (2.10)

Тогда запишем линеаризованное уравнение в общем виде

где

С помощью метода разделения переменных, находим решение этого уравнения в общем виде

Решая задачу Коши (2.5) получаем и

Таким образом, устойчивость особой точки определяется знаком функции в этой точке.

### 2.5.1 Анализ особых точек системы с бистабильным поведением

Примем следующие значения интенсивностей

При этом, подставив (2.31) в (2.27), получим, что , что должно гарантировать нам бистабильное поведение системы.

Тогда особыми точками будут

Рассмотрим линеаризованное дифференциальное уравнение для особой точки

Решением этого дифференциального уравнения является функция

Решая задачу Коши (2.5), получим

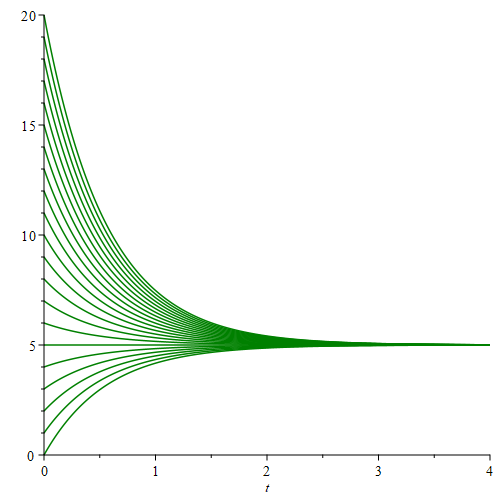


Рисунок 2 – Устойчивость особой точки уравнения (2.4) для интенсивностей (2.31) при

Из рисунка 2 видно, что фазовые траектории линеаризованного дифференциального уравнения в окрестности точки сходятся с течением времени к фазовой траектории , что говорит о том, что – устойчивая особая точка уравнения (2.4) для интенсивностей (2.31).

Рассмотрим следующую особую точку . Линеаризованное дифференциальное уравнение принимает вид

Решением этого дифференциального уравнения является функция

Решая задачу Коши (2.5), получим

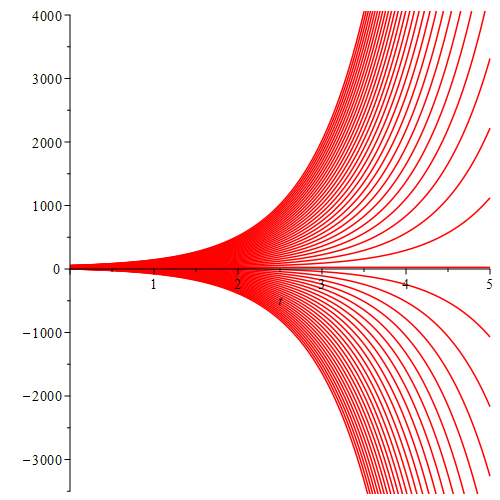
**

Рисунок 3 – Устойчивость особой точки уравнения (2.4) для интенсивностей (2.31) при

Заметим, что в этом случае показатель экспоненты положителен , поэтому с течением времени функция будет быстро расти по модулю и . Поэтому особая точка не является устойчивой.

Теперь рассмотрим последнюю особую точку . Линеаризованное дифференциальное уравнение принимает вид

Решением этого дифференциального уравнения является функция

Решая задачу Коши (2.5), получим

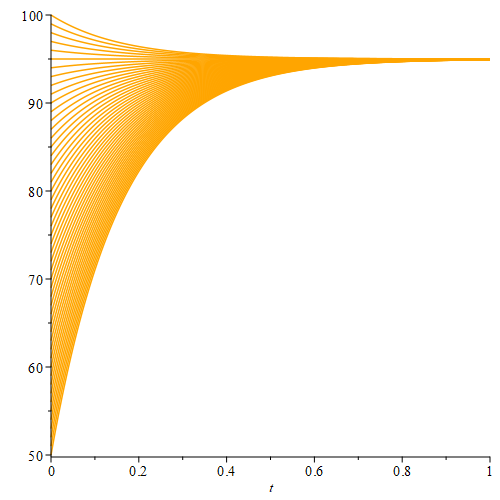


Рисунок 4 – Устойчивость особой точки уравнения (2.4) для интенсивностей (2.31) при

Из рисунка 4 видно, что, как и в случае с точкой , точка устойчива.

Таким образом, с заданными значениями интенсивности (2.31) поведение системы является бистабильным, то есть устойчивым в двух состояниях.

### 2.5.2 Анализ особых точек системы с моностабильным поведением

Примем теперь следующие значения интенсивностей

При этом, подставив (2.33) в (2.27), получим, что , что должно гарантировать нам моностабильное поведение системы.

Тогда особыми точками будут

Поскольку выражает количество молекул типа в момент времени , комплексные корни теряют свой физический смысл и по этой причине нам не подходят. Рассмотрим особую точку . Линеаризованное дифференциальное уравнение принимает вид

Решением этого дифференциального уравнения является функция

Решая задачу Коши (2.5), получим .

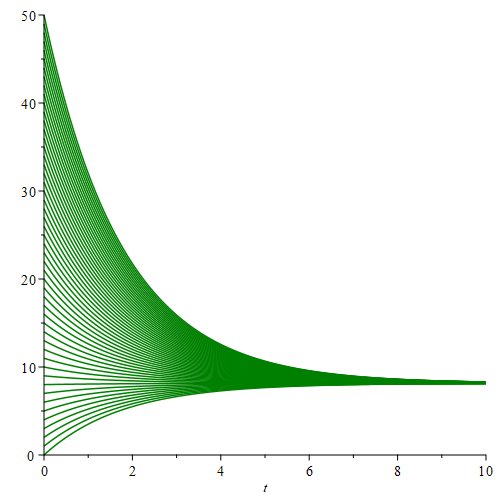
**

Рисунок 5 – Устойчивость особой точки уравнения (2.4) для интенсивностей (2.33) при

Из рисунка 5 видно, что фазовые траектории линеаризованного дифференциального уравнения в окрестности точки сходятся с течением времени к фазовой траектории , что говорит о том, что – устойчивая особая точка уравнения (2.4) для интенсивностей (2.33). Поэтому интенсивности (2.33) предоставляют моностабильное поведение системы.

Далее снова примем новые значения интенсивностей для рассмотрения ещё одного примера моностабильности.

При этом, подставив (2.35) в (2.27), получим, что , что должно гарантировать нам моностабильное поведение системы.

Тогда особыми точками будут

Поскольку выражает количество молекул типа в момент времени , комплексные корни теряют свой физический смысл и по этой причине нам не подходят. Рассмотрим особую точку . Линеаризованное дифференциальное уравнение принимает вид

Решением этого дифференциального уравнения является функция

Решая задачу Коши (2.5), получим

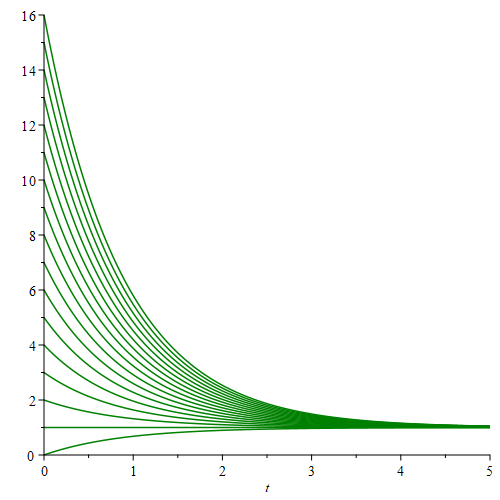


Рисунок 6 – Устойчивость особой точки уравнения (2.4) для интенсивностей (2.35) при

Из рисунка 6 видно, что фазовые траектории линеаризованного дифференциального уравнения в окрестности точки сходятся с течением времени к фазовой траектории , что говорит о том, что – устойчивая особая точка уравнения (2.4) для интенсивностей (2.35). Поэтому интенсивности (2.35) снова предоставляют моностабильное поведение системы.

Таким образом, при исследовании детерминированной модели схемы взаимодействий (2.1) с разными интенсивностями , , можно получить как бистабильное, так и моностабильное поведение системы частиц. Это объясняется тем, что при определенных значениях ,, дискриминант кубического полинома (2.10) становится меньше нуля и две особые точки уравнения (2.4) переходят в комплексную плоскость, тем самым теряя свой физический смысл и фактически переставая описывать количество частиц в системе.

## 2.6 Сравнение детерминированной и стохастической моделей

### 2.6.1 Система с бистабильным поведением

Рассмотрим задачу Коши (2.5) с интенсивностями (2.31), которые соответствуют бистабильному поведению системы

Выпишем особые точки этого дифференциального уравнения (2.32)

Решая поставленную задачу Коши с использованием метода Рунге-Кутта 4-го порядка, мы можем получить 3 семейства решений, которые были рассмотрены в разделе 2.5.

Первое стабильное состояние (Рисунок 7) достигается при начальных значениях задачи Коши . Любое полученное решение при заданном начальном количестве частиц является устойчивым и стремится к первой устойчивой особой точке дифференциального уравнения (2.4). Это означает, что при любом начальном значении в системе в среднем находится 5 частиц при .

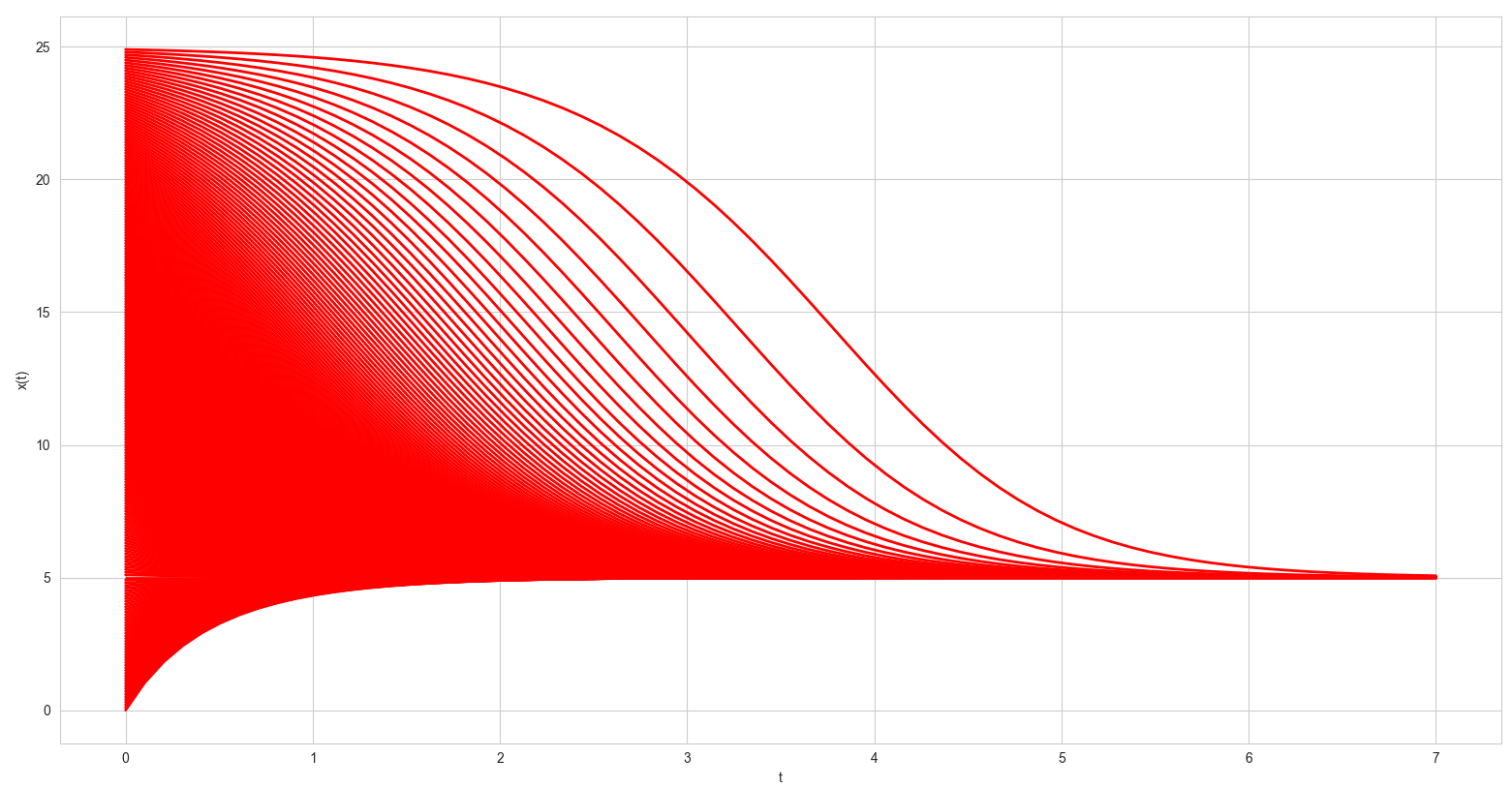


Рисунок 7 Решение задачи Коши (2.37) при для

Второе стабильное состояние (Рисунок 8) достигается при . При любое полученное решение задачи Коши (2.37) с заданным диапазоном начальных значений будет стремиться к функции , соответствующей второй устойчивой особой точке дифференциального уравнения (2.4), т.е. при в системе в среднем находится 50 частиц.

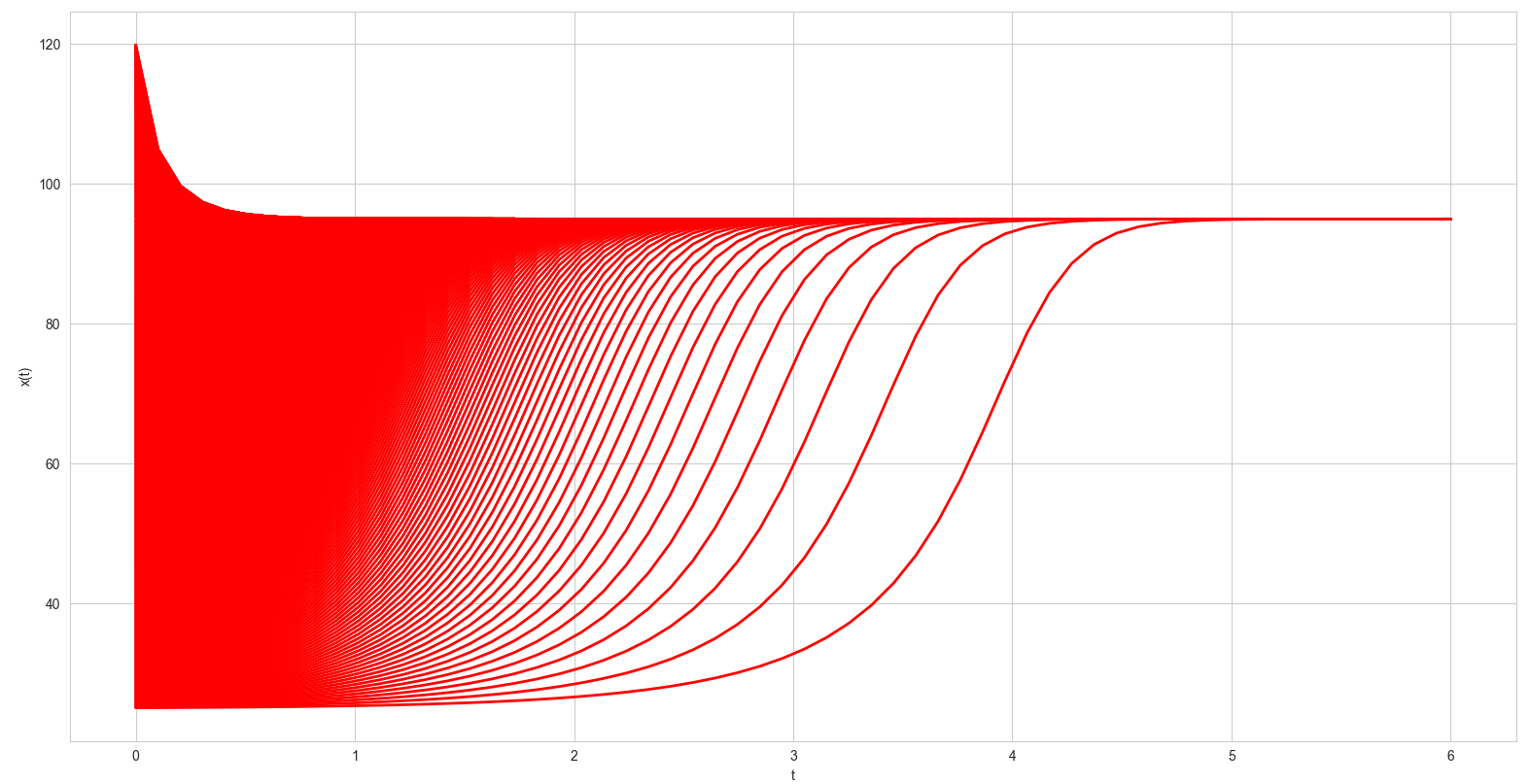


Рисунок 8 Решение задачи Коши (2.37) при для

Ниже приведено графическое решение задачи Коши (2.37) при всех значениях

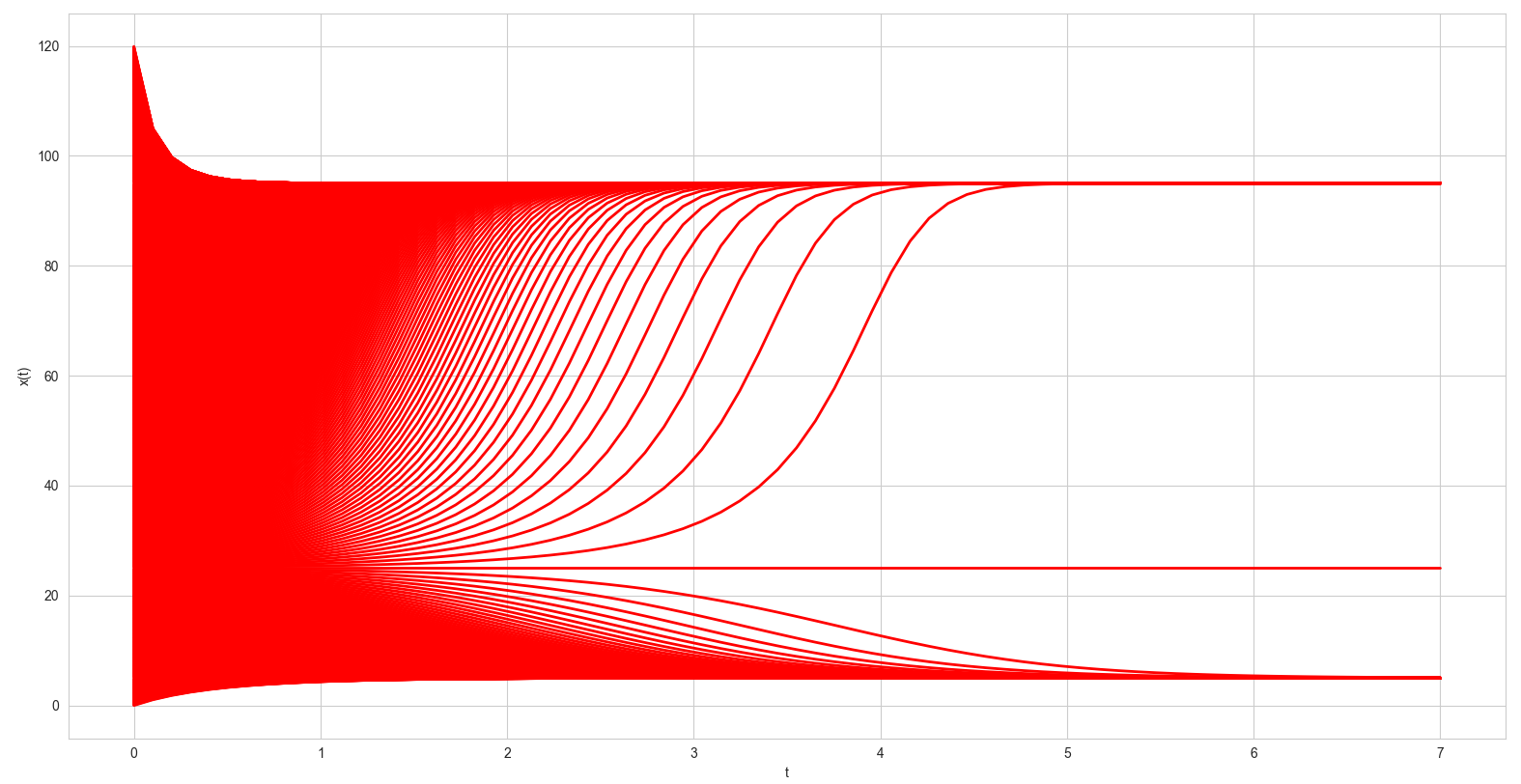


Рисунок 9 Решение задачи Коши (2.37) для

Таким образом, результаты, получаемые с помощью детерминированной модели, сильно зависят от начальных условий задачи Коши (2.37) [8].

Рассмотрим стохастическую модель схемы взаимодействий (2.1). При многократном моделировании системы можно получить все 3 случая, рассмотренные выше, но при этом они не зависят от начальных значений, а определяются лишь плотностью вероятности эволюции системы (Рисунок 10).

Для задачи (2.37) найдем функцию плотности вероятности эволюции системы согласно (2.25)

где

Таким образом, при поведение функции (2.38) является бимодальным, что соответствует двум устойчивым детерминированным состояниям и .

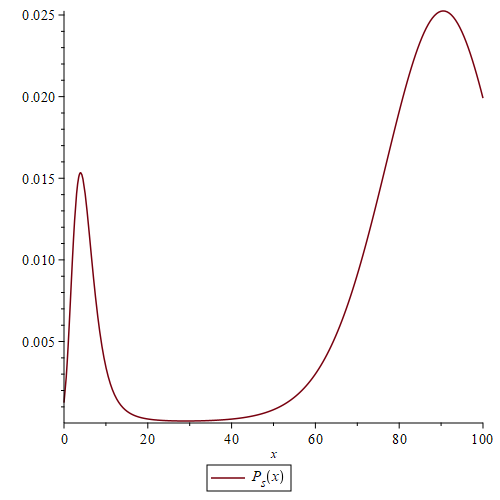


Рисунок 10 Плотность вероятности эволюции системы (2.37)

С течением времени наиболее вероятным исходом эволюции системы будет схождение к одному из двух стабильных состояний (Рисунки 11, 12).

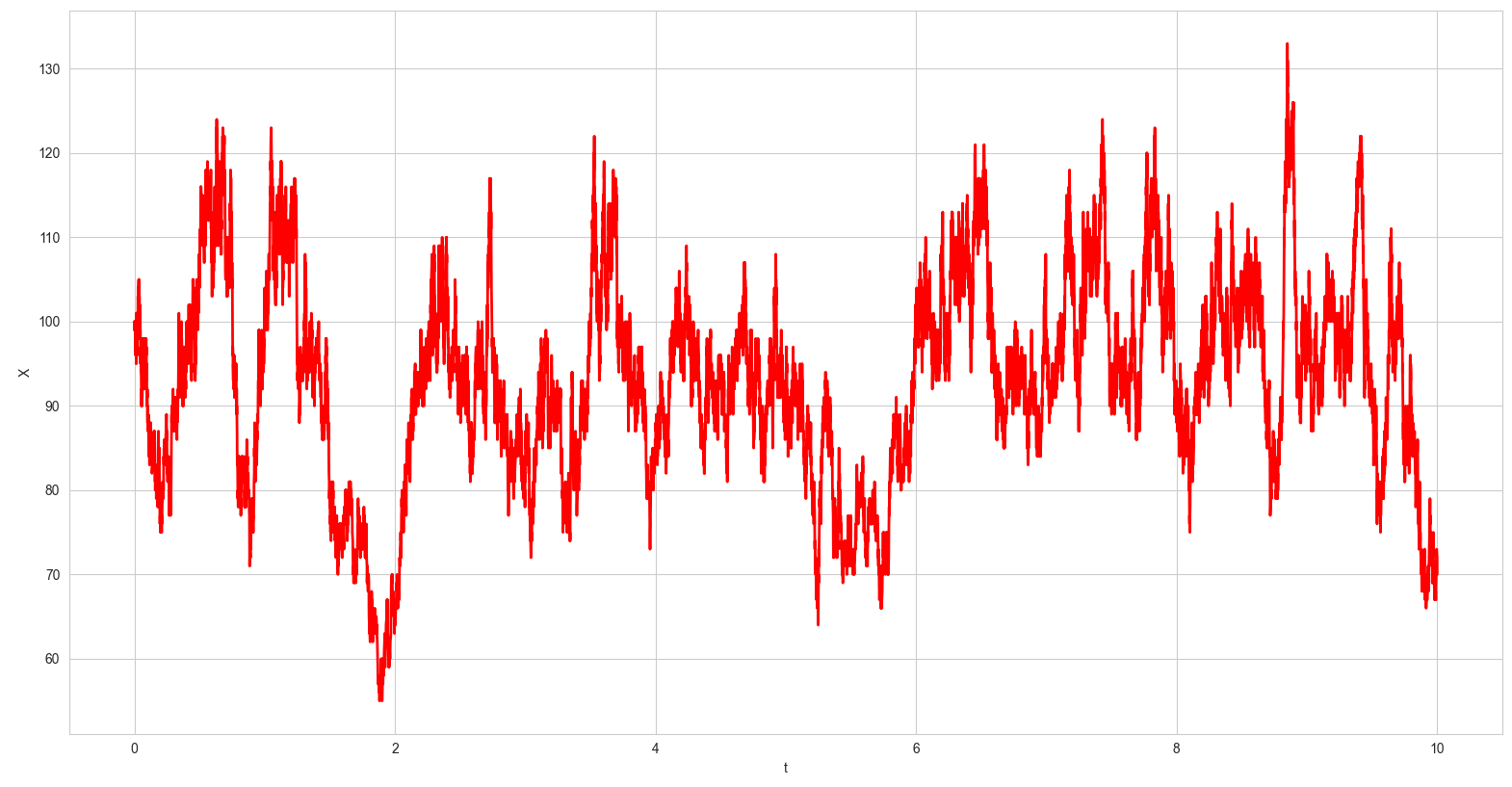


Рисунок 11 Сходимость стохастической модели с интенсивностями к стабильному состоянию для при

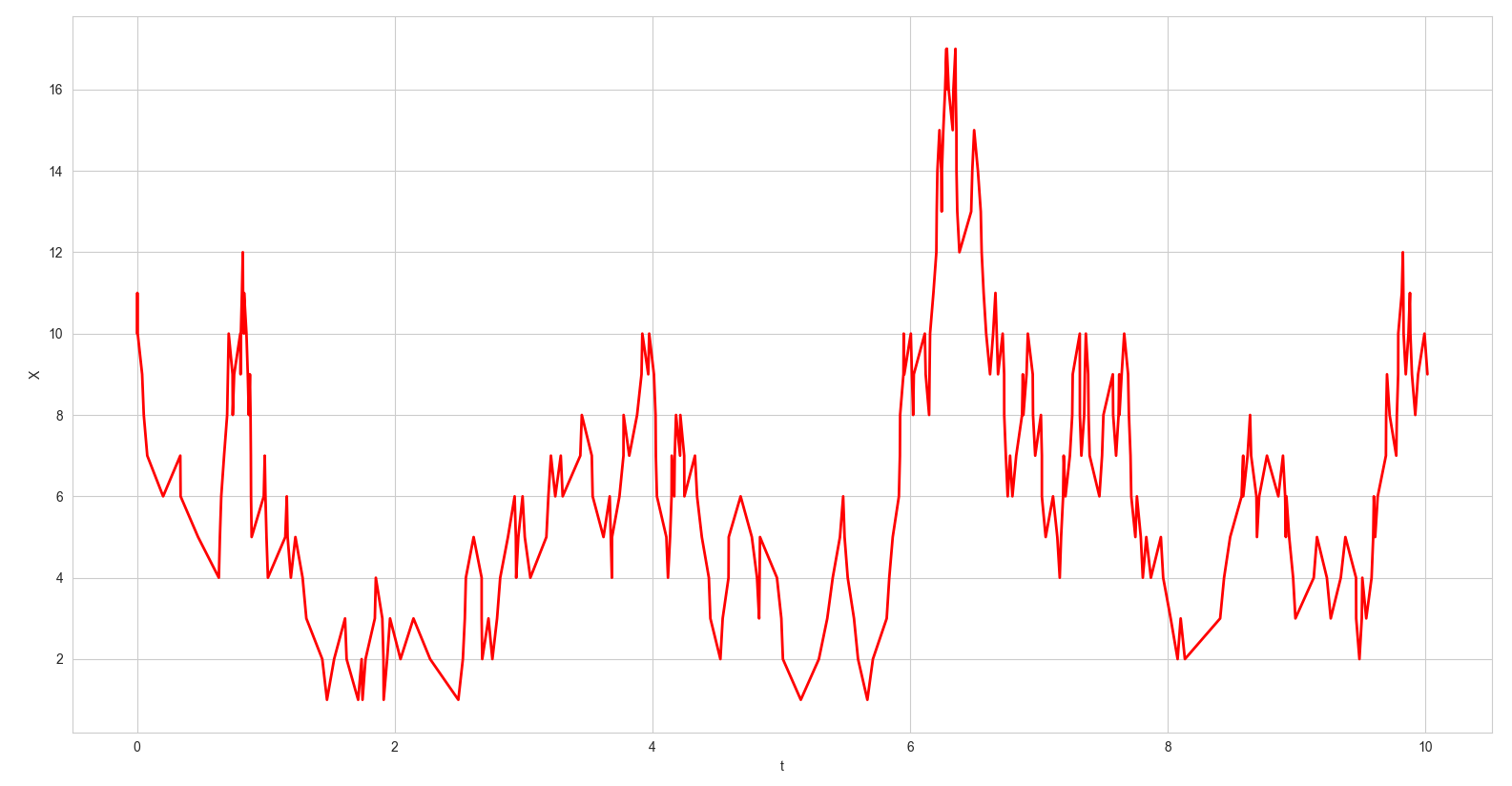


Рисунок 12 Сходимость стохастической модели с интенсивностями к стабильному состоянию для при

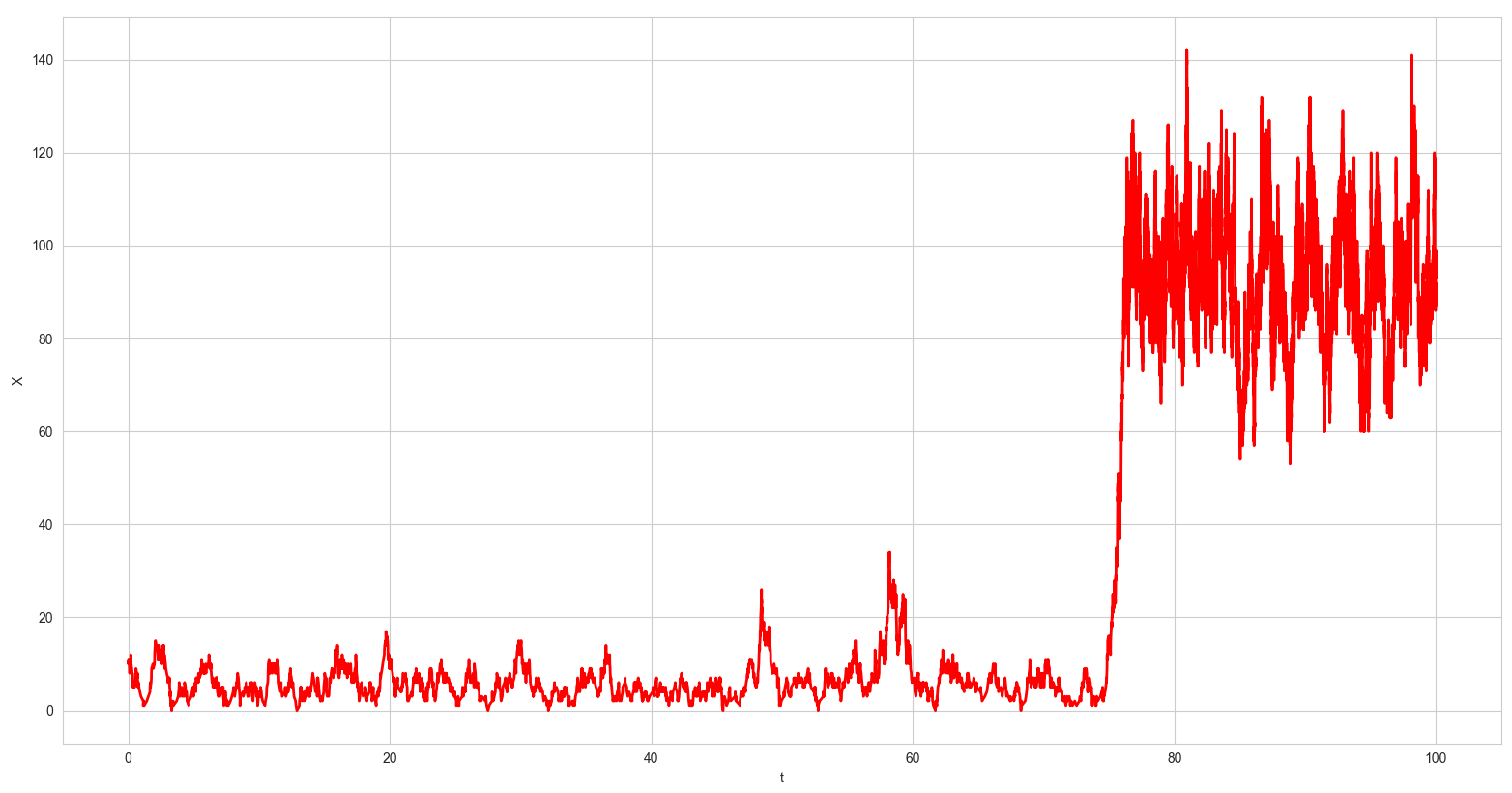


Рисунок 13 Бистабильное поведение стохастической модели с интенсивностями (2.31) для при

На рисунке 13 видно, как количество частиц в системе переходит из одного стабильного состояния в другое, быстро проходя через нестабильное.

Таким образом, в рассматриваемой модели Шлёгля, которая является автокаталитической системой, может происходить неравновесный фазовый переход между двумя устойчивыми стационарными состояниями, подобный фазовому переходу первого рода. Его можно назвать неравновесным фазовым переходом первого рода. [4]

### 2.6.2 Система с моностабильным поведением

Рассмотрим две задачи Коши с интенсивностями (2.33) и (2.35), соответствующие моностабильным поведениям системы

и

Выпишем соответствующие им особые точки (2.34) и (2.36)

и

По аналогии с бистабильной системой проведём анализ задач (2.39) и (2.40). При исследовании этих задач методом Рунге-Кутта 4-го порядка будем получать одно стабильное состояние для каждой задачи, причём моностабильное поведение будет возникать независимо от выбора .

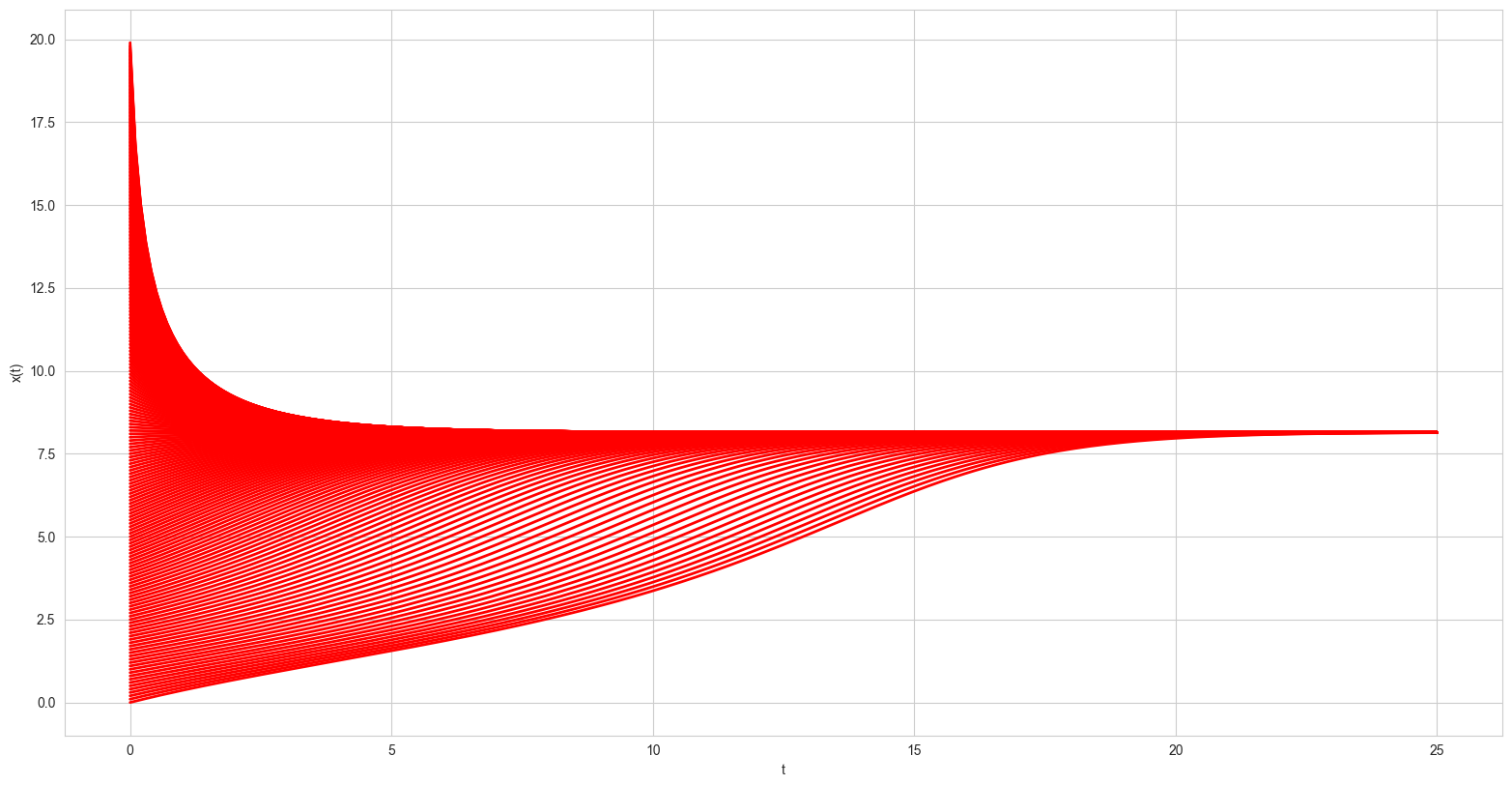


Рисунок 14 Моностабильное поведение стохастической модели с интенсивностями (2.33) при

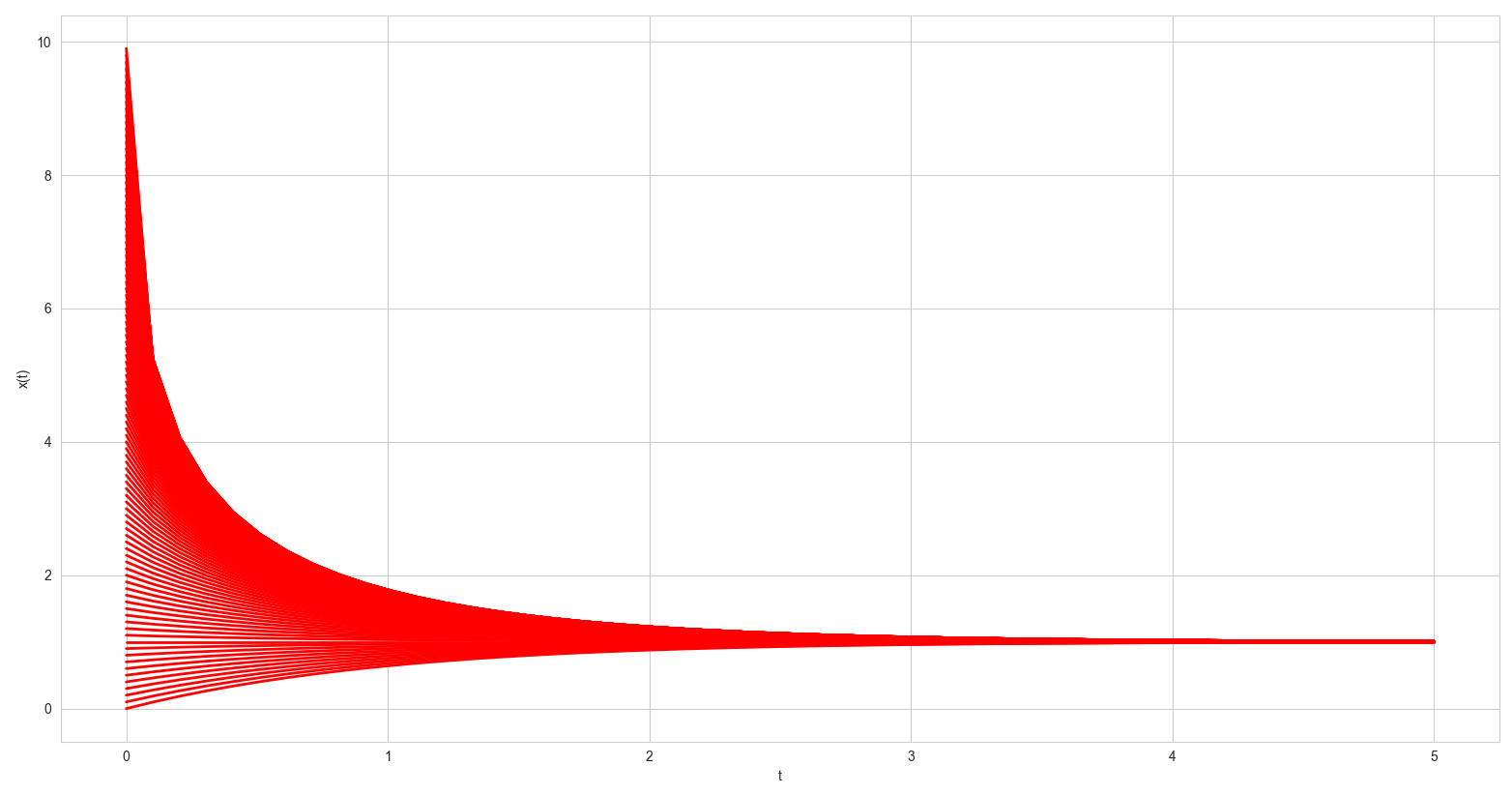


Рисунок 15 Моностабильное поведение стохастической модели с интенсивностями (2.35) при

Теперь рассмотрим плотности эволюции системы для интенсивностей (2.33) и (2.35)

где , и

где



Рисунок 16 Плотность вероятности эволюции системы (2.39)

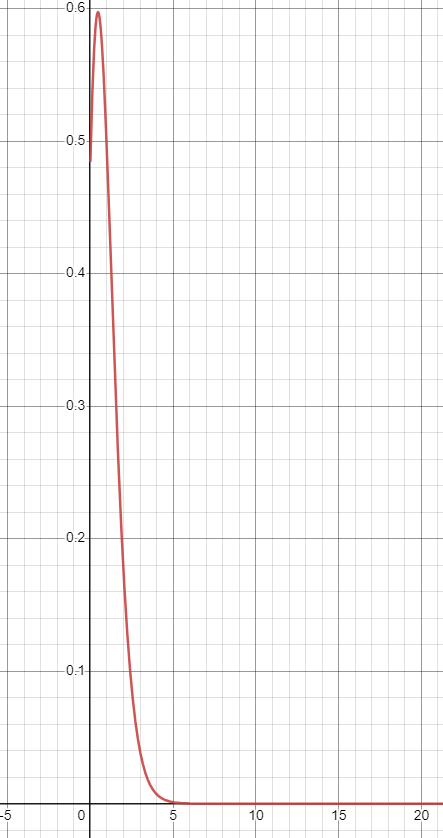


Рисунок 17 Плотность вероятности эволюции системы (2.40)

В обоих случаях функция плотности вероятности эволюции системы является унимодальной и достигает своего максимума приблизительно в действительной особой точке дифференциального уравнения.

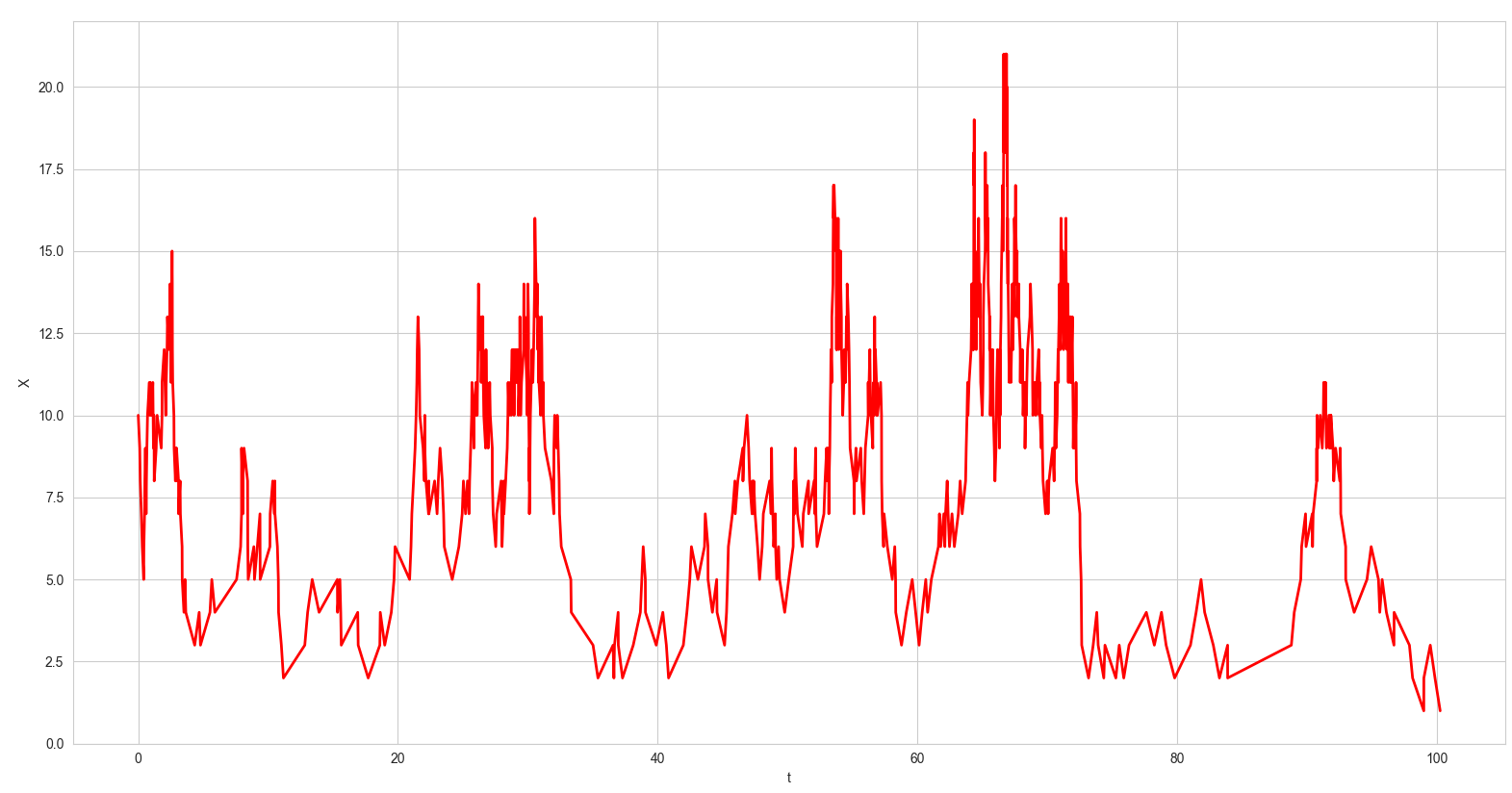


Рисунок 18 Реализация траекторий стохастической модели задачи (2.39) при

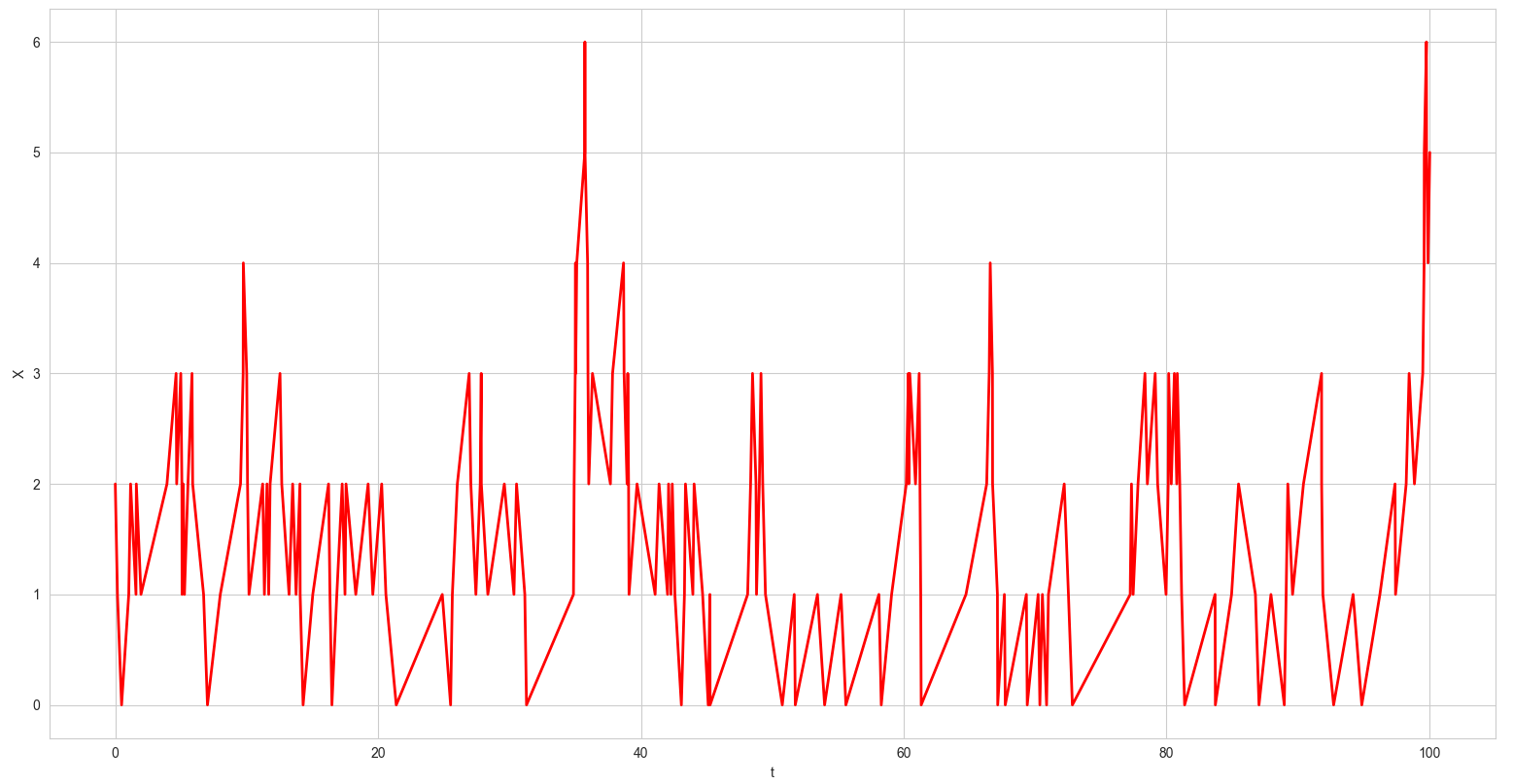


Рисунок 19 Реализация траекторий стохастической модели задачи (2.40) при

Многократное моделирование стохастической модели задач (2.39) и (2.40) дают похожие результаты, доказывая тем самым моностабильность этих систем.

Таким образом, варьируя интенсивности , , при исследовании модели на основе схем взаимодействий, результаты, получаемые при детерминированном и стохастическом анализах, могут как отличаться, так и быть приблизительно схожими. При этом поведение моностабильной системы может частично совпадать с поведением одного из устойчивых состояний бистабильной системы.

Исходя из полученных траекторий стохастической модели, можно сделать вывод о том, что вероятностный анализ дает более полное представление о том, как система ведёт себя с течением времени. При этом детерминированное исследование дает точную информацию о том, в каких точках будет наблюдаться стабильное и нестабильное поведение. Применение обоих методов позволяет полностью описать систему, основанную на схеме взаимодействий.

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, было проведено ознакомление с темой однородных марковских процессов со счетным множеством состояний, а также исследование бистабильной системы на основе схемы взаимодействий.

В процессе выполнения курсовой работы были выполнены следующие задачи:

* ознакомление с непрерывными марковскими процессами со счетным множеством состояний;
* ознакомление со стохастическими моделями для схем взаимодействий;
* ознакомление с детерминированными моделями для схем взаимодействий;
* ознакомление с методами составления плотности вероятности эволюции системы;
* составление стохастической модели для схемы взаимодействий;
* составление детерминированной модели для схемы взаимодействий;
* нахождение плотности вероятности эволюции системы;
* сравнение детерминированной и стохастической моделей;
* анализ особых точек детерминированного уравнения.

# СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1 И. К. Волков, С. М. Зуев, Г. М. Цветкова, Случайные процессы: Учеб. для вузов / Под ред. B.C. Зарубина, А.П. Крищенко. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1999. – 448 с. (Сер. Математика в техническом университете; Вып. XVIII).

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

3 Рассказова М.Н. Имитационное моделирование систем: учебное пособие   
/ М. Н. Рассказова. – Омск: Омский государственный институт сервиса, 2010. – 80 с.

4 Пуртов П. А. Введение в неравновесную химическую термодинамику: Учеб. пособие / Новосиб. ун-т. Новосибирск, 2000. 97 с.

5 А. В. Калинкин, Ланге А.М., Мастихин А.В., Шаповников А.А., Численные методы Монте-Карло для моделирования схем взаимодействий при дискретных состояниях // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». 2005. № 2. С. 53–74

6 Falk J, Mendler M, Drossel B, A minimal model of burst-noise induced bistability, PLoS ONE 12(4): e0176410, 2017. – 15 с.

7 А. Ф. Филиппов, Введение в теорию дифференциальных уравнений: Учебник. Изд. 2-е, испр. М.: КомКнига, 2007. – 240 с.

8 Michail Vlysidis, Yiannis N. Kaznessis, On Differences between Deterministic and Stochastic Models of Chemical Reactions: Schlögl Solved with ZI-Closure, Department of Chemical Engineering and Materials Science, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455, USA; // Журнал «entropy». 2018. – 14 с.