

# ДЕТЕРМИНИСТСКОЕ И СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭКОСИСТЕМЫ (ЖЕРТВА–ХИЩНИК), ХИМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ (ГОРЮЧЕЕ–ОКИСЛИТЕЛЬ), ЭКОНОМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ (РЕСУРСЫ–ИНДУСТРИЯ)

Ю. А. Ромашев и Г. А. Скоробогатов

*Химический факультет Санкт–Петербургского государственного университета,  
198504 Санкт–Петербург, Россия*

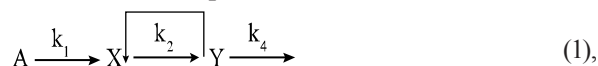
Получена редакцией 27 июля 2011 г.

Процесс рождения–уничтожения изучен для системы ресурс–продуценты–консументы (РПК), которой в химии соответствует модель горения углеводов Франк–Каменецкого, а в экологии — модель жертва–хищник Вольтерры–Лотки. Для конечного (небольшого) числа объектов (частиц, особей) адекватное математическое описание временной эволюции системы РПК дает теория случайных процессов Колмогорова, из которой лишь при огромном числе частиц (особей) для их математических ожиданий вытекают детерминистские уравнения закона действующих масс (в химической кинетике) или уравнения Вольтерры–Лотки (в популяционной динамике). Изучены пределы применимости кумулянтных разложений.

*Ключевые слова: схема Франк–Каменецкого, схема Вольтерры–Лотки, уравнения Колмогорова, Master Equation, кумулянтные разложения.*

## ВВЕДЕНИЕ

В 1910 г А. Лотка [1] рассмотрел схему последовательных реакций:



в которой вторая реакция  $X \rightarrow Y$  является автотокаталитической. Если обозначить через  $A$ ,  $x$ ,  $y$  концентрации компонентов  $A$ ,  $X$  и  $Y$  соответственно, то для схемы (1) следует записать следующую систему дифференциальных уравнений (ДУ):

$$\frac{dx}{dt} = k_1 A - k_2 xy, \quad \frac{dy}{dt} = k_3 xy - k_4 y \quad (2)$$

Лотка рассматривал *открытую систему*, то есть пренебрегал расходом  $A$  и не учитывал продукты превращения компонента  $Y$ . Если ввести безразмерные величины:

$$U = \frac{k_3}{k_4} x, \quad V = \frac{k_2 k_4}{k_1 k_3 A} y, \quad \tau = k_4 t, \quad \alpha = \frac{k_1 k_3 A}{k_4} \quad (3)$$

то уравнения (2) упрощаются:

$$\frac{dU}{d\tau} = \alpha(1 - UV), \quad \frac{dV}{d\tau} = UV - V \quad (4)$$

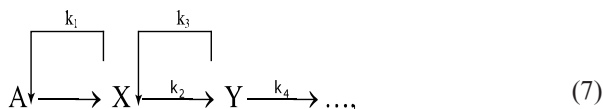
Вблизи положения равновесия ( $U_0 = V_0 = 1$ ) соответствующая линейная система ДУ имеет характеристическое уравнение с корнями

$$\lambda_{1,2} = \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \alpha} \quad (5)$$

Отсюда видно, что при  $\alpha < 4$  концентрации  $U$  и  $V$  испытывают затухающие гармонические колебания около положения равновесия ( $U_0, V_0$ ). При  $\alpha \rightarrow 0$  затухание становится сколь угодно малым, а частота колебаний приближается к величине

$$\omega = \sqrt{k_1 k_3 A} \quad (6)$$

Работы А. Лотка [1, 2] были развиты В. Вольтерра [3], который рассмотрел кинетическую схему, содержащую две последовательные автокаталитические реакции:



Для этой схемы вместо (2) получаются следующие ДУ:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 Ax - k_2 xy, \quad \frac{dy}{dt} = k_3 xy - k_4 y \quad (2^*)$$

Если ввести безразмерные величины:

$$U = \frac{k_3}{k_4} x, \quad V = \frac{k_2}{k_1 A} y, \quad \tau = k_4 t, \quad \alpha = \frac{k_1 A}{k_4} \quad (3^*)$$

то уравнения (2\*) можно переписать в более компактном виде:

$$\frac{dU}{d\tau} = \alpha(U - UV), \quad \frac{dV}{d\tau} = UV - V \quad (4^*)$$

Система уравнений (4\*) сводится к одному ДУ:

$$\frac{dU}{dV} = \alpha \frac{U(1-V)}{V(U-1)}, \quad (8)$$

которое интегрируется в конечном виде:

$$UV^\alpha e^{-(U+\alpha V)} = \text{const} \quad (9)$$

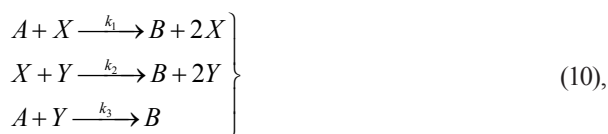
В. Вольтерра применил кинетическую схему (7) для моделирования простейшей экологической системы жертва–хищник [3]. В этой модели А — концентрация пищевых ресурсов (*субстрата*) для особей типа X (*продуцентов*),  $k_1$  — константа скорости нарастания биомассы продуцентов,  $k_2$  — константа скорости гибели особей X в результате “контактов” с особями хищника Y (*консументов*),  $k_3$  — константа скорости нарастания биомассы консументов за счет уменьшения биомассы продуцентов,  $k_4$  — константа скорости естественной гибели особей Y. В таком случае, все величины (3\*) являются неотрицательными, а тогда производные  $dU/dt$  и  $dV/dt$  никогда не обращаются в нуль одновременно. Отсюда следует, что в кинетической схеме (7) устанавливаются *незатухающие* концентрационные колебания.

Работа Вольтерры [3] произвела большое впечатление на математиков и явилась толчком к развитию нового научного направления в теории ДУ. Стало ясно, что даже простейшие системы с *отрицательной обратной связью* обладают

чрезвычайно сложным поведением, неожиданным и непредсказуемым с позиций повседневного опыта. Математическое исследование систем с обратными связями способствовало возникновению *кибернетики* — науки об управлении и саморегуляции сложных динамических систем [4].

Однако, на биологов изыскания Вольтерры произвели меньшее впечатление, поскольку кинетические уравнения (2\*) никогда не давали точного описания конкретных ситуаций (стр. 250 в [3]). Часть биологов обвинила Вольтерру в лженаучном *редукционизме*, то есть в сведении сложных биологических явлений к упрощенным механическим схемам [5]. В итоге, к концу 50-х годов XX века поиски колебательных гомогенных химических реакций в замкнутых системах приравнивались или к попыткам опровергнуть II начало термодинамики, или к попыткам «протащить» через химию «лженаучные» представления кибернетики о системах с обратными связями.

Д. А. Франк-Каменецкий [6] при создании математической модели колебательного горения углеводородов абстрагировался от десятков химических реакций, в которых участвуют многочисленные промежуточные высокореакционные молекулы и свободные радикалы. Действительно, высокореакционные частицы (перекиси, перекисные радикалы) находятся в квазистационарных концентрациях и не они определяют общий характер процесса горения. Последний определяется *макростадиями*, число и кинетика которых в свою очередь определяются *квазистабильными продуктами*, которыми в случае окисления углеводородов являются гидроперекиси и альдегиды. В таком приближении схема окисления высших углеводородов может быть представлена всего тремя химическими реакциями [6, 7]:



где А — исходные вещества, В — конечные продукты реакции, X и Y — совокупность промежуточных компонентов, играющих одинаковую кинетическую роль (X — радикалы перекисного характера, Y — молекулы альдегидного характера).

Кинетической схеме (10) соответствуют следующие ДУ

$$\left. \begin{aligned} \frac{d[X]}{dt} &= k_1[A][X] - k_2[X][Y] \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_2[X][Y] - k_3[A][Y] \end{aligned} \right\} \quad (11),$$

которые в точности совпадают с уравнениями (2\*), полученными В. Вольтеррой на 10 лет раньше в модели экосистемы жертва–хищник. Поэтому Франк-Каменецкому оставалось лишь перенести на химическую почву богатые математические результаты, полученные ранее [1–3]. Из этих работ следовало, что процесс окисления углеводородов при определенном значении концентрации [A] с неизбежностью приобретает колебательный характер. Согласно (6), в области небольших отклонений от квазистационарного режима (когда  $[X]_{\text{ст.}} = (k_3/k_2)[A]$ ,  $[Y]_{\text{ст.}} = (k_1/k_2)[A]$ ) частота вышеуказанных концентрационных колебаний равна

$$\omega = [A] \sqrt{k_1 k_3} \quad (12).$$

Математические «упражнения» А. Лотки и В. Вольтерры оказались полезными не только для фундаментальной химии, но приобрели прикладное значение с началом Космической Эры, поскольку, если в уравнениях (11) принять концентрацию исходного реагента А постоянной ( $[A] = [A]_0$ ), то эти уравнения моделируют функционирование *проточного реактора с полным перемешиванием*, которым является камера сгорания реактивного двигателя. Те же уравнения (11), (2\*) или их некоторые обобщения пригодны для моделирования глобальных социально-экономических процессов [8, 9].

#### ДЕТЕРМИНИСТСКАЯ СХЕМА ВОЛЬТЕРРЫ-ЛОТКИ ДЛЯ ОГРОМНОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ (ОСОБЕЙ)

Рассматриваем кинетическую схему



Если число частиц (особей) очень велико, то с большой точностью можно ввести непрерывные величины [A], [X], [Y], описывающие концентрации частиц (в химии) или биомассу особей (в популяционной динамике), или стоимости ресурсов и производственных мощностей (в экономике). Схеме (13) соответствуют следующие кинетические ДУ:

$$\begin{aligned} \frac{d[A]}{d\tau} &= k_2^*[Y] - k_3^*[A][X] + k_0^*[X], \\ \frac{d[X]}{d\tau} &= k_3^*[A][X] - k_1^*[X][Y] - k_0^*[X], \\ \frac{d[Y]}{d\tau} &= k_1^*[X][Y] - k_2^*[Y] \end{aligned} \quad (14)$$

с начальными условиями

$$[X] = [X]_0, \quad [Y] = [Y]_0, \quad [A] = [A]_0, \quad \tau = 0 \quad (15).$$

Перейдем к относительным константам скорости и «приведенному» времени:

$$t = k_3^* \cdot \tau, \quad k_1 = \frac{k_1^*}{k_3^*}, \quad k_2 = \frac{k_2^*}{k_3^*}, \quad k_0 = \frac{k_0^*}{k_3^*}. \quad (16).$$

Кроме того, примем  $k_0 = 0$ . Тогда вместо (14) получаем более простые ДУ

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= k_2 y - ax, \\ \frac{dx}{dt} &= ax - k_1 xy, \\ \frac{dy}{dt} &= k_1 xy - k_2 y. \end{aligned} \quad (14^*)$$

Кинетическим уравнениям (14\*) соответствует более простая кинетическая схема:



Легко проверить, что система ДУ (14\*) обладает первым интегралом

$$x + y + a = \text{const} = m \quad (17),$$

который выражает закон сохранения «материи» в кинетической схеме (13\*).

С помощью интеграла (17) систему трех ДУ (14\*) можно свести к системе двух ДУ:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= (m - x - y)x - k_1 xy, \\ \frac{dy}{dt} &= k_1 xy - k_2 y. \end{aligned} \quad (18)$$

Введем обозначения:

$$dx/dt = P(x,y), \quad dy/dt = Q(x,y)$$

В особых точках, в которых одновременно  $P(x,y)=0$ ,  $Q(x,y)=0$ , система переходит в стационарное состояние. Найдем стационарные значения  $x_\infty$ ,  $y_\infty$ , а (асимптотические значения), к которым стремятся искомые функции системы ДУ (14\*) при  $t \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} x_\infty &= \frac{k_2}{k_1}, \\ y_\infty &= \frac{mk_1 - k_2}{k_1(1+k_1)}, \\ a_\infty &= k_1 y_\infty = \frac{k_1 m - k_2}{1+k_1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Чтобы выявить качественное поведение решений системы ДУ (18), используем теорию устойчивости Ляпунова [10]. Запишем матрицу Якоби для линеаризованных ДУ (18), описывающих поведение системы вблизи положения равновесия:

$$J(x,y) = \begin{vmatrix} m-2x-(1+k_1)y & -(1+k_1)x \\ k_1 y & k_1 x - k_2 \end{vmatrix} \quad (20)$$

Поведение решения ДУ (18) вблизи особой точки  $(x, y)$  определяется собственными значениями  $(\lambda_1, \lambda_2)$  матрицы (20), которые вычисляются путем решения алгебраического уравнения

$$\det(J(x,y) - \lambda \cdot I) = 0 \quad (21)$$

где  $I$  — единичная матрица.

В районе 1-й особой точки ( $x=y=0$ ) уравнение (21) приобретает вид  $(s-\lambda)(k_2+\lambda)=0$ , откуда получаются два действительных значения противоположных знаков (*седловая точка*)

$$\lambda_1 = m, \lambda_2 = -k_2 \quad (22)$$

означающие неустойчивость (уход на бесконечность) решения

$$x(t) = x(0) \cdot \exp(\lambda_1 t), \quad y(t) = y(0) \cdot \exp(\lambda_2 t).$$

В районе 2-й особой точки ( $x=y=0$ ) уравнение (21) приобретает вид

$$-(m+\lambda)(k_1 m - k_2 - \lambda) = 0,$$

из которого вытекают действительные собственные значения

$$\lambda_1 = -m, \lambda_2 = k_1 m - k_2 \quad (23)$$

Это — *седловая точка* или *устойчивый узел* (в зависимости от значений параметров).

Наконец, в 3-й особой точке ( $x_\infty = \frac{k_2}{k_1}$ ,  $y_\infty = \frac{k_1 m - k_2}{k_1(1+k_2)}$ ) уравнение (21) приобретает вид

$$\lambda^2 + \frac{k_2}{k_1} \lambda + \frac{k_2}{k_1} (mk_1 - k_2) = 0,$$

из которого вытекают собственные значения

$$\lambda_{1,2} = -\frac{k_2}{2k_1} \pm \frac{1}{2k_1} \sqrt{k_2 [k_2 + 4k_1(k_2 - k_1 m)]} \quad (24)$$

Из (24) видно, что при условии

$$\frac{k_1}{k_2} \cdot m > 1 + \frac{1}{4k_1} \quad (25)$$

собственные значения матрицы Якоби оказываются комплексными, то есть решения ДУ (18) и (14\*) имеют осцилляционный характер. Скорость спада амплитуды осцилляций с ростом времени определяется величиной действительной (отрицательной) части в формуле (24).

На рис. 1–4 представлены типичные картины интегрирования ДУ (14\*) или (18). К примеру, для набора исходных параметров рис. 1 неравенство (25) соблюдается ( $8.4 > 1.178$ ), что и объясняет колебательный характер релаксации всех трех переменных к их асимптотическим значениям (19). Из рис. 1 видно, что непосредственное интегрирование ДУ (14\*) приводит к тем же асимптотическим значениям переменных, которые вытекают из формул (19):  $x_\infty = 3.575$ ;  $y_\infty = 11.02$ ;  $a_\infty = 15.42$ .

На рис. 2 комбинация исходных параметров такова, что выполняется более сильное неравенство (25), а именно,  $600 > 1.25$ . В результате, колебания переменных имеют более широкую амплитуду и спадают медленнее, чем на рис. 1. Из рис. 2 видно, что непосредственное интегрирование ДУ (14\*) приводит к тем же асимптотическим значениям переменных, которые найдены из формул (19):  $x_\infty = 0.1$ ;  $y_\infty = 28.95$ ;  $a_\infty = 28.95$ .

Из рис. 3 видно, что непосредственное интегрирование ДУ (14\*) приводит к тем же асимптотическим значениям переменных, какие найдены из формул (19):  $x_\infty = 0.6667$ ;  $y_\infty = 399.73333$ ;  $a_\infty = 599.6$ .

Наконец, на рис. 4 показаны чрезвычайно слабо спадающие со временем колебания компонента  $X$  в условиях очень сильного неравенства (25):  $1200000 > 1.25$ . Концентрации макрокомпонентов  $A$  и  $Y$  слабо (но с той же частотой) осциллируют вблизи их начальных концентраций.

Рис. 3 и 4 интересны с точки зрения химизма колебательных реакций. Так, на рис. 3 сильно осциллирующая концентрация промежуточного

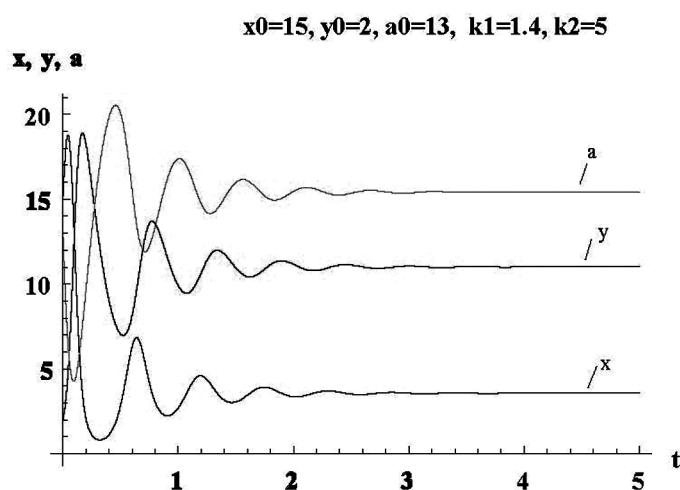


Рис. 1. Результат интегрирования детерминистской системы ДУ (14\*) или (18) для набора параметров  $x_0=15; y_0=2; a_0=13; m=30; k_1=1.4; k_2=5$ . На этом рисунке и далее везде  $y$  означает консументы,  $x$  – продуценты,  $a$  – ресурс.

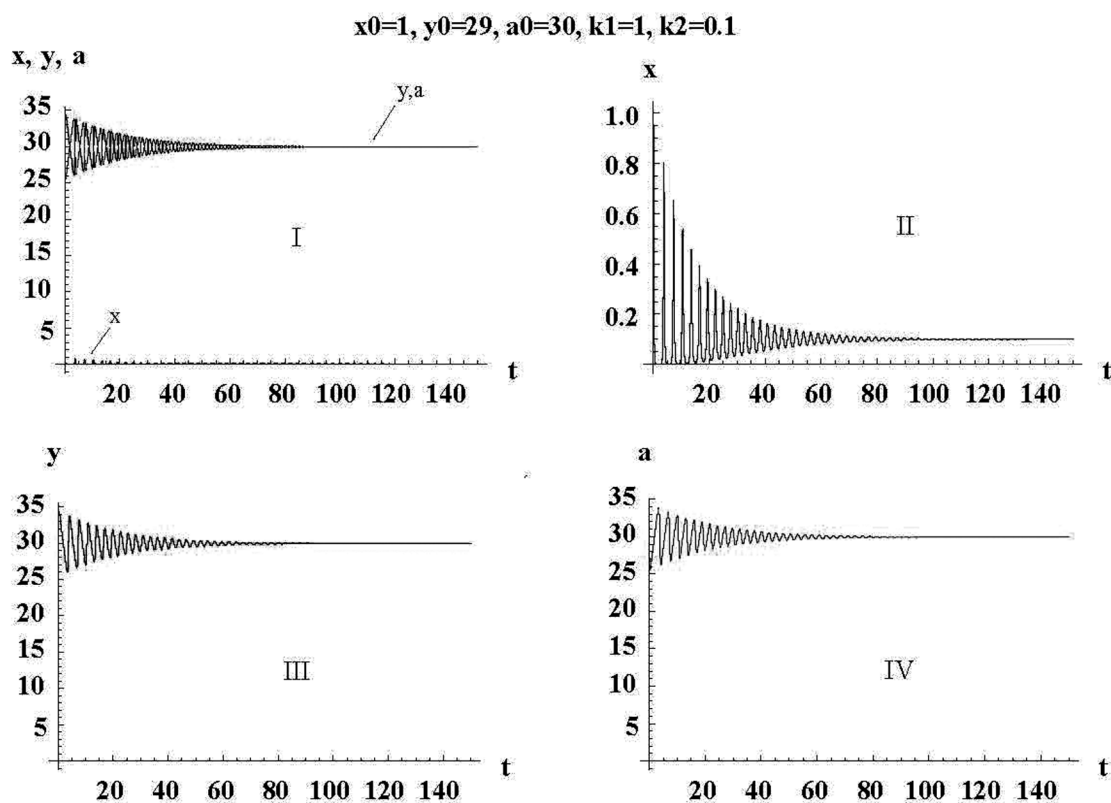


Рис. 2. Результат интегрирования детерминистской системы ДУ (14\*) или (18) для набора параметров  $x_0=1; y_0=29; a_0=30; m=60; k_1=1; k_2=0.1$ . I – график переменной  $y$  (консументы, окислитель) и  $a$  (ресурс, горючее); II – график величины  $x$  (продуценты, травоядные жертвы, катализатор); III – график величины  $y$  (консументы, хищники, окислитель); IV – график величины  $a$  (ресурс, трава, горючее).

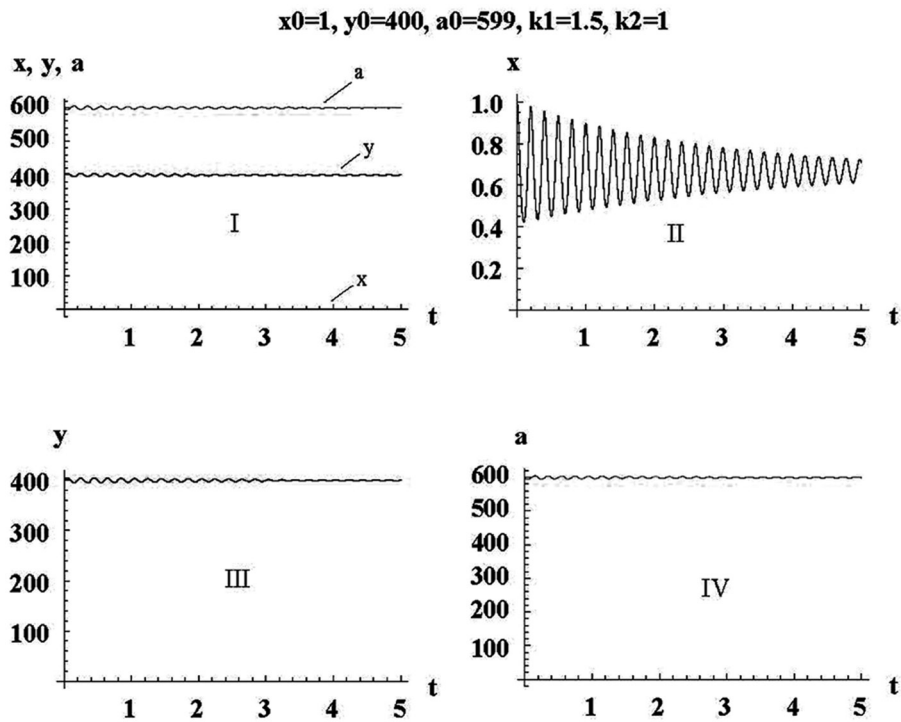


Рис. 3. Результат интегрирования детерминистской системы ДУ (14\*) или (18) для набора параметров  $x_0=1; y_0=400; a_0=599; m=1000; k_1=1.5; k_2=1$ . I – график переменной  $y$  (консументы) и  $a$  (субстрат); II – график величины  $x$  (продуценты); III – график величины  $y$  (консументы); IV – график величины  $a$  (субстрат).

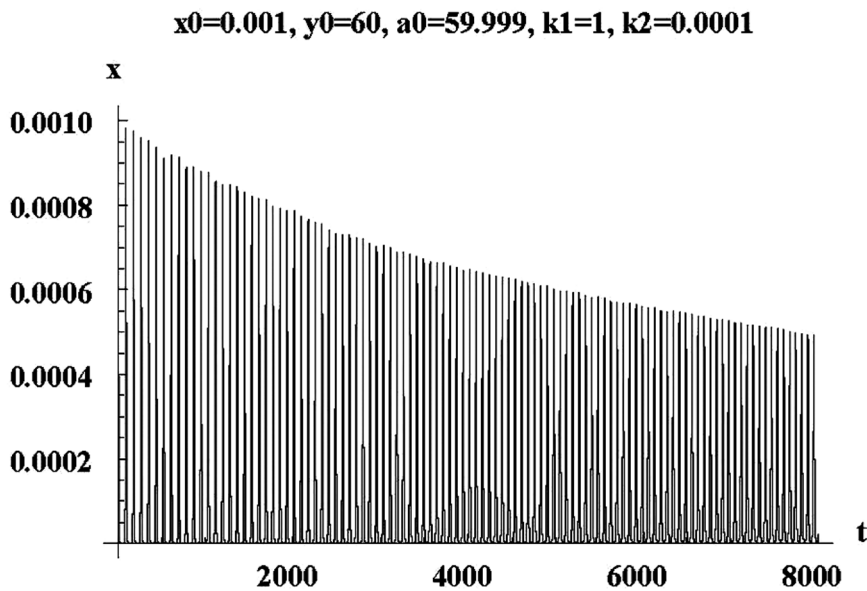


Рис. 4. Результат интегрирования детерминистской системы ДУ (14\*) или (18) для набора параметров  $x_0=0.001; y_0=60; a_0=59.999; m=120; k_1=1; k_2=0.0001$ . Из формул (19):  $x_\infty=0.0001; y_\infty=59.99995; a_\infty=59.99995$ .



компонента X на три порядка меньше (но с той же частотой) слабо осциллирующих концентраций «горючего» A и «окислителя» Y. А на рис. 4 концентрация промежуточного компонента X в среднем уже на пять порядков ниже концентраций макрокомпонентов A и Y. При таких соотношениях экспериментатор вполне может не заметить существования промежуточного лабильного компонента X, без которого не удастся построить теоретическую модель колебательного взаимодействия между макрокомпонентами A и Y. Здесь компонент X можно рассматривать как катализатор процесса взаимодействия компонента Y с исходным субстратом A. Такая ситуация также реализуется в атмосферных процессах типа истощения озонового слоя, где ничтожные концентрации промежуточных хлорсодержащих соединений катализируют быстрый расход макрокомпонента — озона.

Аналогично, в экосистеме океана роль лабильного компонента играет планктон, абсолютная концентрация которого невелика, но который катализирует огромный поток солнечного света и неорганического вещества в биомассу рыбной и прочей морской фауны. Будет ли процесс истощения озона или процесс нарастания (уменьшения) биомассы морской фауны носить осцилляционный характер, зависит от того, выполняется ли для них соотношение (25).

#### СТОХАСТИЧЕСКАЯ СХЕМА ВОЛЬТЕРРЫ-ЛОТКИ ДЛЯ КОНЕЧНОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ (ОСОБЕЙ)

Кинетической схеме (13\*) соответствует следующее управляющее уравнение Колмогорова (*Master Equation*) [11]:

$$\begin{aligned} \frac{dP(x, y, a; t)}{dt} = & k_1(x+1)(y-1) \times \\ & \times P(x+1, y-1, a; t) + \\ & + k_2(y+1)P(x, y+1, a-1; t) + \\ & + k_0(x+1)P(x+1, y, a-1; t) + \\ & + (x-1)(a+1)P(x-1, y, a+1; t) - \\ & [k_1xy + k_2y + k_0x + ax] \cdot P(x, y, a; t) \end{aligned} \quad (26)$$

с начальными условиями:

$$\begin{aligned} P(x_0, y_0, a_0; 0) &= 1, \\ P(x, y, a; 0) &= 0 \text{ для } x \neq x_0, y \neq y_0, a \neq a_0 \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь  $P(x, y, a; t)$  — вероятность иметь в момент времени  $t$  целочисленное количество  $x$ ,  $y$  и  $a$  объектов X, Y, A, соответственно. *Master Equation* (26) — это на самом деле система линейных уравнений для всех  $P(x, y, a; t)$ , индексы которых

имеют значения от 0 до  $m = x_0 + y_0 + a_0$ .

Если вероятности  $P(x, y, a; t)$  найдены, то интересующие нас математические ожидания величин  $x$ ,  $y$ ,  $a$ , а также их дисперсии, ковариации и более высокие моменты могут быть вычислены по стандартным формулам [11]:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_t &= \sum_{x, y, a=0}^s x \cdot P(x, y, a; t), \\ \langle Y \rangle_t &= \sum_{x, y, a=0}^s y \cdot P(x, y, a; t), \\ \langle A \rangle_t &= \sum_{x, y, a=0}^s a \cdot P(x, y, a; t), \end{aligned} \quad (28)$$

$$D^2\{X\}_t = \sum_{x, y, a=0}^m (x - \langle X \rangle)^2 \cdot P(x, y, a; t), \quad (29)$$

$$D^2\{Y\}_t = \sum_{x, y, a=0}^m (y - \langle Y \rangle)^2 \cdot P(x, y, a; t),$$

$$D^2\{A\}_t = \sum_{x, y, a=0}^m (a - \langle A \rangle)^2 \cdot P(x, y, a; t),$$

$$\text{cov}(X, Y)_t = \sum_{x, y, a=0}^m (x - \langle X \rangle)(y - \langle Y \rangle) \cdot P(x, y, a; t), \quad (30)$$

$$\text{cov}(X, A)_t = \sum_{x, y, a=0}^m (x - \langle X \rangle)(a - \langle A \rangle) \cdot P(x, y, a; t),$$

$$\text{cov}(Y, A)_t = \sum_{x, y, a=0}^m (y - \langle Y \rangle)(a - \langle A \rangle) \cdot P(x, y, a; t),$$

На рис. 5–9 для нескольких вариантов начальных данных и констант скорости представлены результаты интегрирования управляющего уравнения (26) и соответствующих детерминистских уравнений (14\*). На графиках везде вместо дисперсии даны неотрицательные стандартные отклонения

$$\begin{aligned} \sigma_x(t) &= \sqrt{D^2\{X\}_t}, \\ \sigma_y(t) &= \sqrt{D^2\{Y\}_t}, \\ \sigma_A(t) &= \sqrt{D^2\{A\}_t}. \end{aligned} \quad (31)$$

Показательно, что ни на одном из графиков математические ожидания  $\langle X \rangle$ ,  $\langle Y \rangle$  и  $\langle A \rangle$ , полученные интегрированием управляющего уравнения (26), не носят осцилляционного характера в отличие от картин, вытекающих из детерминистских уравнений (14\*) при тех же значениях начальных данных и констант скорости. На рис. 5 после первого же минимума,

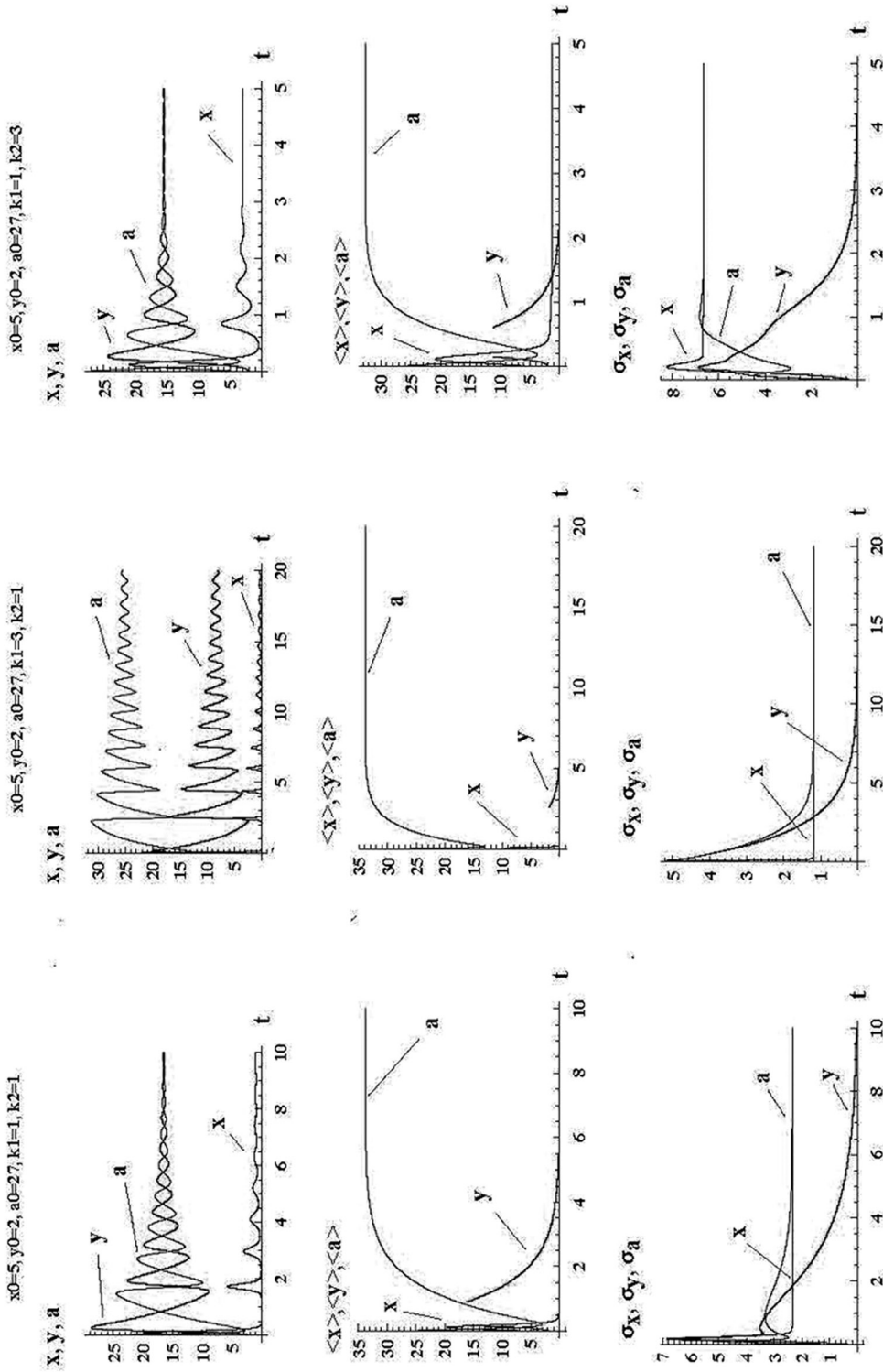


Рис. 5. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle a \rangle$  из детерминистских уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Начальные значения везде одинаковы ( $x_0=5, y_0=2, a_0=27$ ), константы скорости таковы:  $k_1=k_2=1$  (левый столбец),  $k_1=1, k_2=3$  (средний столбец),  $k_1=3, k_2=1$  (правый столбец).



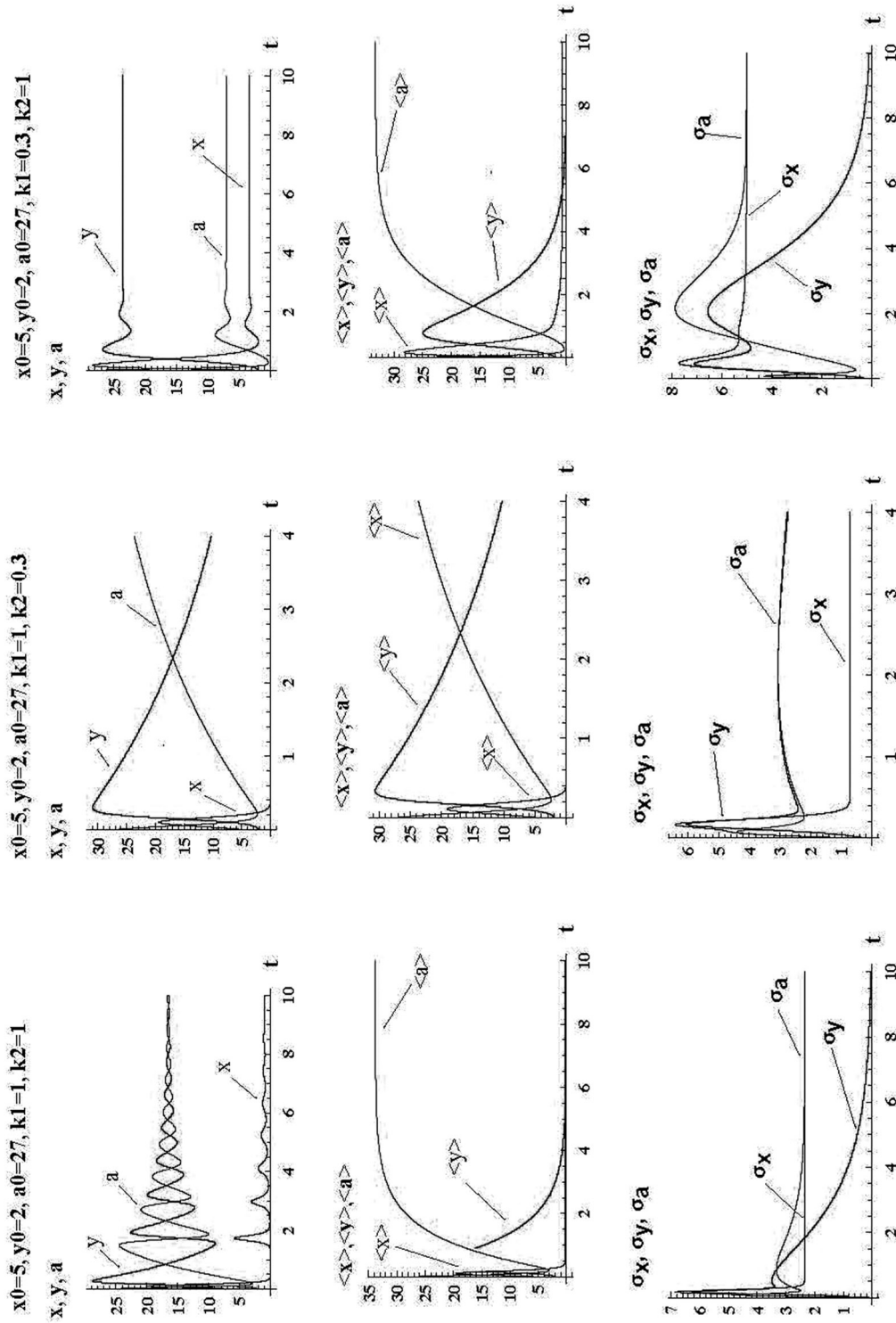


Рис. 6. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle a \rangle$  из детерминистских уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Начальные значения везде одинаковы ( $x_0=5, y_0=2, a_0=27$ ), а константы скорости таковы:  $k_1=k_2=1$  (левый столбец),  $k_1=1, k_2=0.3$  (средний столбец),  $k_1=0.3, k_2=1$  (правый столбец).

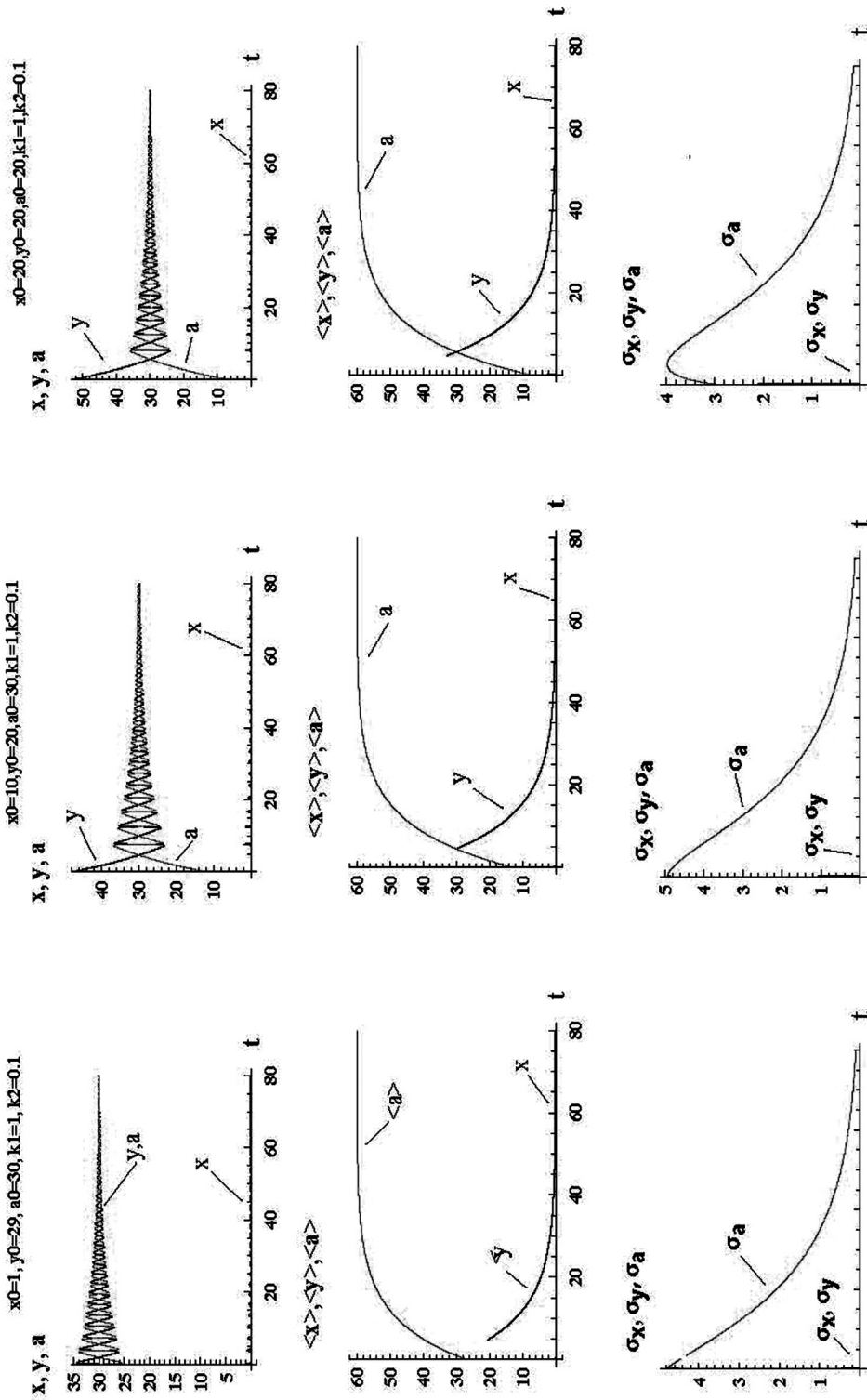


Рис. 7. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle a \rangle$  из детерминистических уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Константы скорости везде одинаковы ( $k_1 = 1, k_2 = 0.1$ ), а начальные значения таковы:  $x_0 = 1, y_0 = 29, a_0 = 30$  в левом столбце,  $x_0 = 10, y_0 = 20, a_0 = 30$  в среднем столбце,  $x_0 = 20, y_0 = 20, a_0 = 20$  в правом столбце.

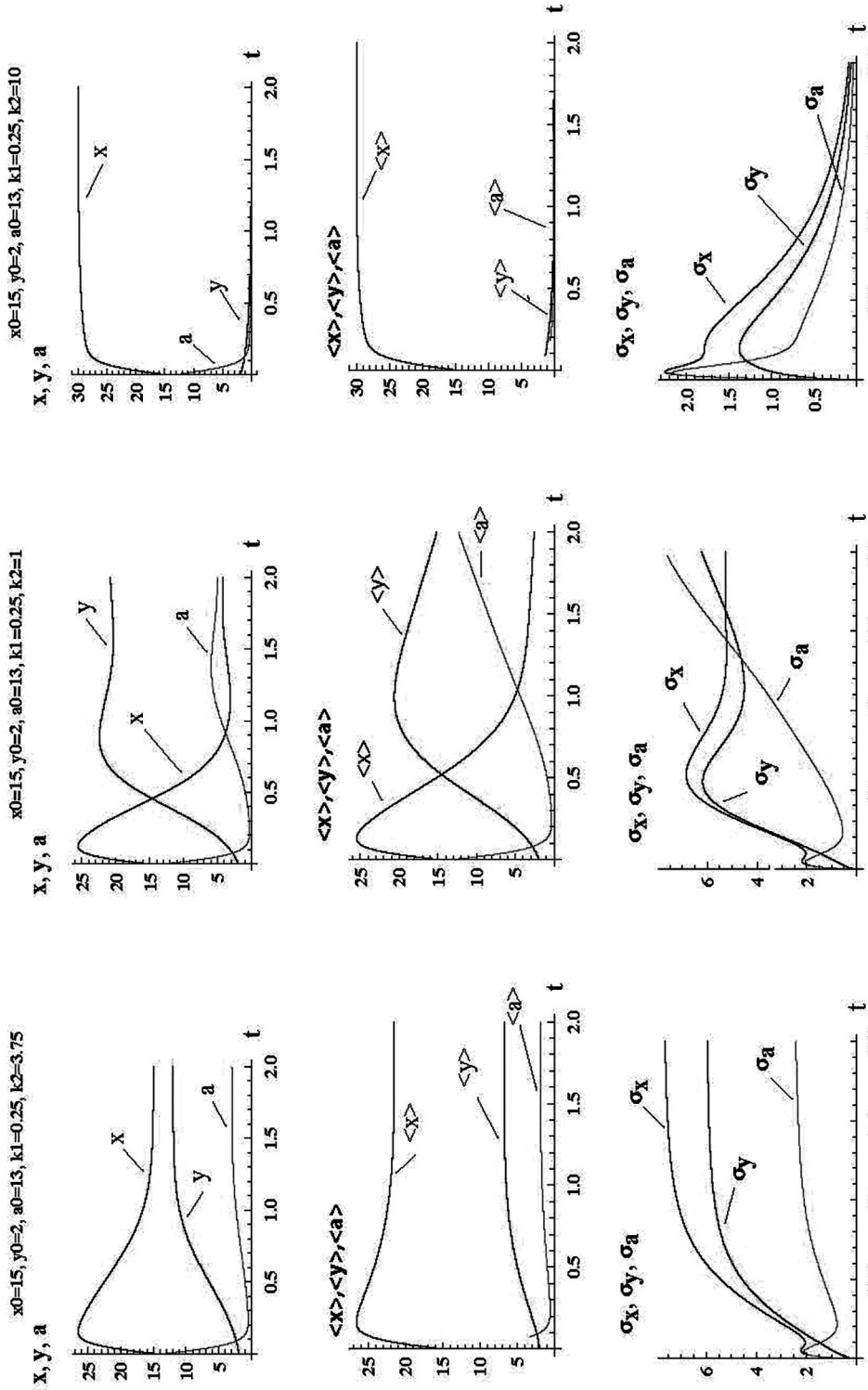


Рис. 8. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle X \rangle$ ,  $\langle Y \rangle$ ,  $\langle a \rangle$  из детерминистских уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Начальные значения везде одинаковы ( $x_0=15, y_0=2, a_0=13$ ), а константы скорости таковы:  $k_1=0.25; k_2=3.75$  (левый столбец),  $k_1=0.25, k_2=1$  (средний столбец),  $k_1=0.25, k_2=10$  (правый столбец)

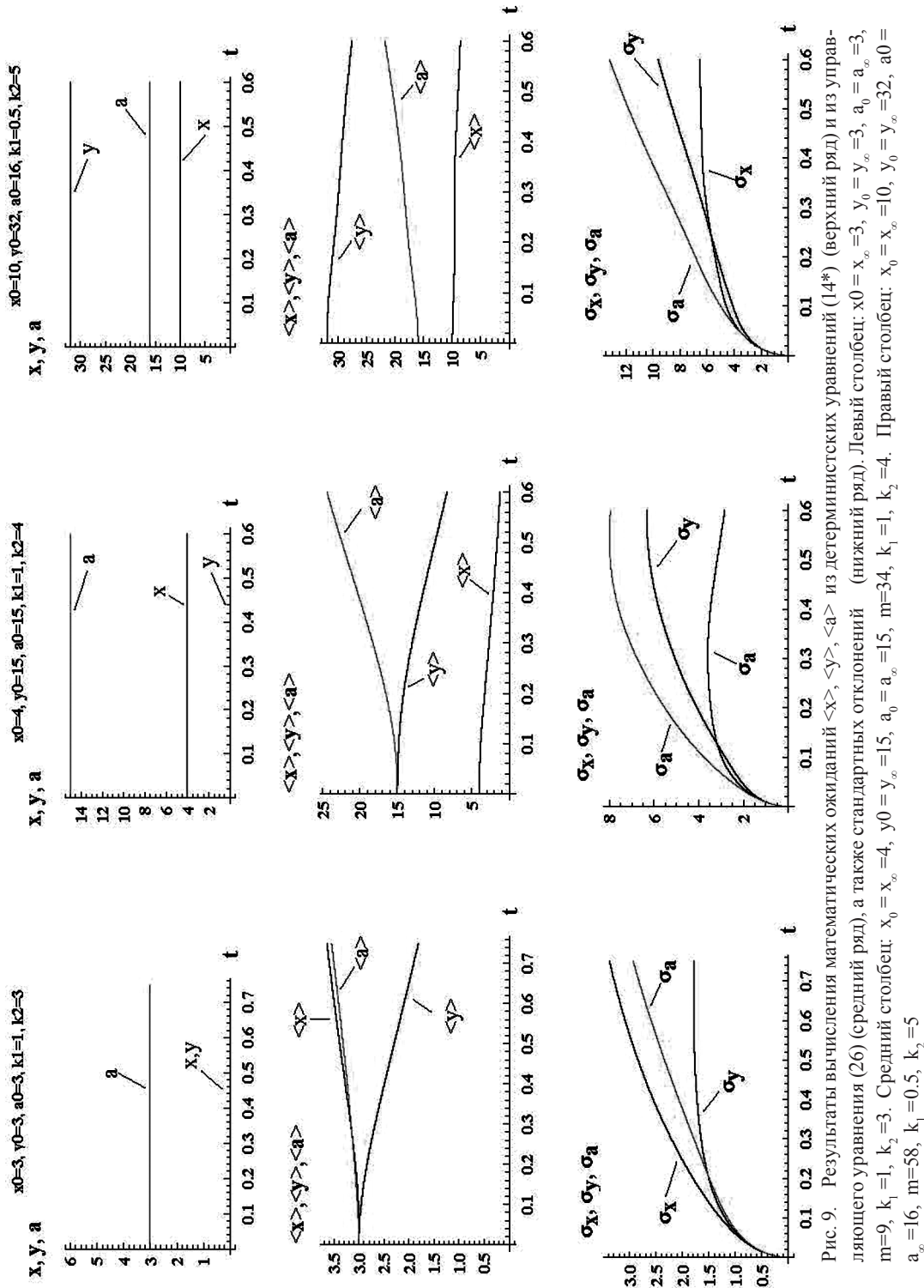


Рис. 9. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle a \rangle$  из детерминистических уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Левый столбец:  $x_0 = x_o = 3, y_0 = y_o = 3, a_0 = a_o = 3, m = 9, k_1 = 1, k_2 = 3$ . Средний столбец:  $x_0 = x_o = 4, y_0 = y_o = 15, a_0 = a_o = 15, m = 34, k_1 = 1, k_2 = 4$ . Правый столбец:  $x_0 = x_o = 10, y_0 = y_o = 32, a_0 = a_o = 16, m = 58, k_1 = 0.5, k_2 = 5$



предсказываемого детерминистской моделью для числа  $x$ , стохастическая модель предсказывает со 100%-й вероятностью переход величины  $X$  в состояние  $\langle X \rangle = 0$ . С некоторым запаздыванием и величина  $Y$  с вероятностью 100% переходит в состояние  $\langle Y \rangle = 0$ . При этом вся «материя» переходит в состояние исходного ресурса  $\langle A \rangle = 100\%$ . В экологии это соответствует полному вымиранию вида продуцентов  $X$  (зайцы, мыши и т.д.) с последующим вымиранием и вида консументов (волки, кошки и т.д.) и «расцвету» ресурса  $A$  (трава, зерно и т.д.). Из этого результата следует, что в экологии любая экосистема ресурс+продуценты+консументы рано или поздно с вероятностью 100% освобождается от надстройки продуцентов с консументами, после чего остается «чистый» ресурс. Освободившуюся экологическую нишу очень быстро заселяет новая надстройка продуцентов-консументов. В реальности новая надстройка продуцентов-консументов начинает вытеснять старую надстройку еще до того, как она самостоятельно сойдет к нулю. Чтобы математически промоделировать такой процесс конкуренции надстроек, необходимо вместо кинетической схемы (13\*) рассматривать более общую схему с двумя конкурирующими продуцентами и двумя консументами. В таком случае вместо (14\*) придется интегрировать систему пяти ДУ. Соответственно, усложнится и управляющее уравнение (26).

Интересна ситуация, представленная в 3 столбце рис. 5, когда полностью вымирает вид консументов, а вид продуцентов сохраняется. При этом продуценты и ресурс сосуществуют в некотором гармоничном равновесии. В реальных экосистемах такая ситуация реализуется редко, т. к. после исчезновения консументов-хищников (скажем, тигров), продуценты (скажем, кабаны) начинают страдать от новых еще более опасных «консументов» (скажем, гельминтов, энцефалитных клещей и т.п.).

На рис. 6 и 7 ситуация с вымиранием одного только вида консументов не реализуется, но «закон» 100%-й вероятности освобождения ресурса от надстройки продуценты+консументы не отменяется. Кроме того, в реальности самоэлиминацию надстройки продуценты-консументы подталкивает «биологическое давление» конкурирующей надстройки новых продуцентов-консументов. Данные рис. 6 показывают, что предсказания стохастической модели совпадают с предсказаниями детерминистской модели только в случае отсутствия в последней колебательных режимов.

Сказанное выше справедливо и для экономических систем, поскольку число конкурирующих предприятий или фирм выражается конечным и часто не слишком большим числом. Что же касается химических реакций, то в них число молекул в реакционных объемах даже в разреженных газах исчисляется миллиардами и триллионами, так что действуют законы детерминистской кинетики. Но в биохимических системах, когда в отдельной клетке функционирует буквально один-другой десяток молекул некоторого фермента, вероятность события «зануления» некоторого компонента оказывается большой, что должно приводить к патологическим изменениям в клетке.

Рис. 8 иллюстрирует различия в предсказаниях детерминистской и стохастической моделей для трех ситуаций: левый столбец тогда, когда в формуле (24) оба корня равны ( $\lambda_1 = \lambda_2$ ), средний столбец — когда корни комплексны, то есть имеется осцилляционное детерминистское решение, правый столбец — когда оба корня действительны и осцилляционных решений нет. Данные рис. 8, как и рис. 6, показывают, что предсказания стохастической модели и качественно и количественно совпадают с предсказаниями детерминистской модели только при отсутствии в последней осцилляционных режимов. Конечно, при громадном суммарном числе объектов ( $m$ ) детерминистская модель должна вытекать из стохастической модели, но сколь велико должно быть это число, можно установить лишь после специального исследования. Так, из рис. 2 и 4 видно, что амплитуда осцилляций переменной  $x$  составляет 3–4 порядка. В стохастической модели эта переменная с высокой вероятностью необратимо принимает нулевое значение, если математическое ожидание  $\langle x \rangle$  в минимуме приближается к единице. На всех рис. 5–9 сумма объектов ( $m$ ) не превышает 50, так что в минимуме величина  $\langle x \rangle$  оказывается значительно меньше единицы, в результате чего почти с вероятностью 1 необратимо принимает нулевое значение. В результате, стохастическая модель при  $m < 50$  неизменно предсказывает отсутствие осцилляций во временной зависимости переменных  $\langle x \rangle$ ,  $\langle y \rangle$ ,  $\langle a \rangle$ . Чтобы осцилляции появились в стохастической модели, сумма объектов ( $m$ ) должна быть увеличена по крайней мере на три порядка.

Данные рис. 9 интересны тем, что показывают качественное различие предсказаний детерминистской и стохастической моделей. Именно, если начальные условия задачи взять точно асимптотическими, то в детерминистской картине такое состояние равновесия сохраняется бесконечно долго (см. верхний ряд графиков на рис. 9). В стохастической



ческой же картине детерминистское равновесие скорее рано, чем поздно начинает нарушаться, так что система приходит к другому равновесию, когда одна из переменных (либо продуценты, либо консументы) оказывается тождественно равной нулю. По аналогии с физикой это можно назвать *спонтанным нарушением симметрии*. То есть стохастические модели неизменно предсказывают освобождение ресурса от экологической надстройки продуценты+консументы. Очевидно, при наличии конкуренции со стороны другого набора продуценты+консументы такое «вымирание» исходной экосистемы будет происходить быстрее.

### СТОХАСТИЧЕСКАЯ СХЕМА В ПРИБЛИЖЕНИИ КУМУЛЯНТНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ

Введем производящую функцию

$$G(p, q, r, t) = \sum_{x=0, y=0, a=0}^m p^x q^y r^a P(x, y, a; t) \quad (32)$$

После подстановки (32) в (26) получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} = & k_1(q^2 - pq) \frac{\partial^2 G}{\partial p \partial q} + k_2(r - q) \frac{\partial G}{\partial q} + \\ & + (p^2 - pr) \frac{\partial^2 G}{\partial p \partial r} + k_0(r - p) \frac{\partial G}{\partial p} \end{aligned} \quad (33)$$

Введем производящую функцию кумулянтов

$$K(u, v, w, t) = \ln G(e^u, e^v, e^w, t) \quad (34)$$

Подстановка (34) в (33) дает

$$\begin{aligned} \frac{\partial K}{\partial t} = & k_1(e^{v-u} - 1) \left( \frac{\partial K}{\partial u} \cdot \frac{\partial K}{\partial v} + \frac{\partial^2 K}{\partial u \partial v} \right) + \\ & + k_2(e^{w-v} - 1) \frac{\partial K}{\partial v} + (e^{w-u} - 1) \left( \frac{\partial K}{\partial u} \cdot \frac{\partial K}{\partial w} + \frac{\partial^2 K}{\partial u \partial w} \right) + \\ & + k_0(e^{w-u} - 1) \frac{\partial K}{\partial u}. \end{aligned} \quad (35)$$

Используем разложение по кумулянтам:

$$\begin{aligned} K(u, v, w, t) = & u \langle X \rangle + v \langle Y \rangle + w \langle A \rangle + \\ & + \frac{1}{2} u^2 \langle X^2 \rangle + \frac{1}{2} v^2 \langle Y^2 \rangle + \frac{1}{2} w^2 \langle A^2 \rangle \\ & + uv \langle XY \rangle + uw \langle XA \rangle + vw \langle YA \rangle + \\ & + \frac{1}{6} u^3 \langle X^3 \rangle + \frac{1}{6} v^3 \langle Y^3 \rangle + \frac{1}{6} w^3 \langle A^3 \rangle + \\ & + \frac{1}{2} u^2 v \langle X^2 Y \rangle + \frac{1}{2} u^2 w \langle X^2 A \rangle + \\ & + \frac{1}{2} v^2 w \langle Y^2 A \rangle + \frac{1}{2} uv^2 \langle XY^2 \rangle + \\ & + \frac{1}{2} uw^2 \langle XA^2 \rangle + \frac{1}{2} vw^2 \langle YA^2 \rangle + uvw \langle XYA \rangle + \dots \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь:  $\langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle A \rangle$  — математические ожидания,  $\langle X^2 \rangle, \langle Y^2 \rangle, \langle A^2 \rangle$  — дисперсии,  $\langle XY \rangle, \langle XA \rangle, \langle YA \rangle$  — ковариации.

Подставляя (36) в (35) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях  $u, v, w$ , получаем систему зацепляющихся уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d \langle X \rangle}{dt} = & \langle A \rangle \langle X \rangle - k_1 \langle X \rangle \langle Y \rangle - k_0 \langle X \rangle - \\ & - k_1 \langle XY \rangle + \langle XA \rangle, \\ \frac{d \langle Y \rangle}{dt} = & k_1 \langle X \rangle \langle Y \rangle - k_2 \langle Y \rangle + k_1 \langle XY \rangle \\ \frac{d \langle A \rangle}{dt} = & k_2 \langle Y \rangle - \langle A \rangle \langle X \rangle + k_0 \langle X \rangle - \langle XA \rangle, \\ \frac{d \langle X^2 \rangle}{dt} = & k_1 \langle X \rangle \langle Y \rangle + k_1 \langle XY \rangle - 4k_1 \langle Y \rangle \langle X^2 \rangle - \\ & - 2k_1 \langle X \rangle \langle XY \rangle + 2 \langle X \rangle \langle XA \rangle + 4 \langle A \rangle \langle X^2 \rangle - \\ & + \langle A \rangle \langle X \rangle + \langle XA \rangle - 2k_0 \langle X^2 \rangle + k_0 \langle X \rangle, \\ \frac{d \langle Y^2 \rangle}{dt} = & k_1 \langle X \rangle \langle Y \rangle + k_1 \langle XY \rangle + 2k_1 \langle Y \rangle \langle XY \rangle + \\ & + 2k_1 \langle X \rangle \langle Y^2 \rangle + k_2 \langle Y \rangle - 2k_2 \langle Y^2 \rangle + 2k_1 \langle XY^2 \rangle, \\ \frac{d \langle A^2 \rangle}{dt} = & k_2 \langle Y \rangle + 2k_2 \langle YA \rangle - 2 \langle X \rangle \langle A^2 \rangle - \\ & - 2 \langle A \rangle \langle XA \rangle + \langle A \rangle \langle X \rangle + \langle XA \rangle + 2k_0 \langle XA \rangle + \\ & + k_0 \langle X \rangle - 2 \langle XA^2 \rangle, \\ \frac{d \langle XY \rangle}{dt} = & 2k_1 \langle Y \rangle \langle X^2 \rangle - k_1 \langle Y \rangle \langle XY \rangle - k_1 \langle X \rangle \langle Y^2 \rangle - \\ & - k_1 \langle X \rangle \langle Y \rangle - k_1 \langle XY \rangle - k_1 \langle XY^2 \rangle + \langle A \rangle \langle XY \rangle - \\ & - k_0 \langle XY \rangle - k_2 \langle XY \rangle + \langle XYA \rangle + k_1 \langle X \rangle \langle XY \rangle \\ & + \langle X \rangle \langle YA \rangle, \\ \frac{d \langle XA \rangle}{dt} = & \langle X \rangle \langle A^2 \rangle - \langle X \rangle \langle XA \rangle - 2 \langle A \rangle \langle X^2 \rangle - \\ & - \langle A \rangle \langle X \rangle - \langle XA \rangle - k_0 \langle X \rangle + k_0 \langle X^2 \rangle - \\ & - k_0 \langle XA \rangle + \langle XA^2 \rangle \\ & + \langle A \rangle \langle XA \rangle + k_2 \langle XY \rangle - k_1 \langle XYA \rangle - \\ & - k_1 \langle XA \rangle \langle Y \rangle - k_1 \langle X \rangle \langle YA \rangle, \\ \frac{d \langle YA \rangle}{dt} = & k_2 \langle Y^2 \rangle - k_2 \langle YA \rangle - k_2 \langle Y \rangle - \\ & - \langle A \rangle \langle XY \rangle + k_0 \langle XY \rangle - \langle XYA \rangle - \langle X \rangle \langle YA \rangle + \\ & + k_1 (\langle XYA \rangle + \langle XA \rangle \langle Y \rangle + \langle X \rangle \langle YA \rangle) \end{aligned} \quad (37)$$

В разложении (36)  $\langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle A \rangle$  — это в точности моменты (28),  $\langle X^2 \rangle, \langle Y^2 \rangle, \langle A^2 \rangle$  — дисперсии (29),

кумулянты  $\langle XY \rangle, \langle XA \rangle, \langle YA \rangle$  — это ковариации (30).

Рис. 10 показывает, что ДУ (37) кумулянтного разложения довольно адекватно описывают поведение переменных в стохастической модели. Однако, это соблюдается лишь для небольшого начального отрезка времени эволюции рассматриваемой эко-химической системы. Уже при временах  $t > 0.7$  все переменные, вычисляемые из кумулянтного разложения, уходят на бесконечность, что не соответствует сути рассматриваемой задачи, в которой заложен принцип сохранения суммы всех компонентов (закон сохранения «материи»).

Рис. 11 демонстрирует такие же свойства кумулянтных разложений. Причем, как и на рис. 10, переход от кумулянтного разложения  $n=2$  к более точному кумулянтному разложению  $n=3$  неизменно уменьшает отрезок времени, на котором получают физически допустимые значения искомым переменных.

Рис. 12 интересно сравнить со средним столбцом графиков рис. 8. Как было показано в предыдущей главе, стохастическая модель не предсказывает тех колебаний, которые получают в детерминистской модели. Использование кумулянтного разложения также «не помогает» получить осцилляции на коротком отрезке времени ( $t < 1.0$ ). На больших отрезках времени кумулянтное разложение вообще расходится. Такая же картина наблюдается и на рис. 13, который поучительно сравнить с графиками среднего столбца на рис. 14. Во всех случаях диапазон времени, в котором кумулянтное разложение дает физически осмысленную картину, оказывается весьма небольшим [12]. Причем по мере уточнения кумулянтного разложения (т. е. при переходе от  $n=2$  к  $n=3$  и далее к  $n=5$ ) диапазон времени, в котором кумулянтное разложение корректно «работает», становится все уже. Для описания осцилляционных процессов кумулянтные разложения оказываются совсем непригодными.

## ВЫВОДЫ

Выполненное исследование экологической модели Вольтерры–Лотки (или эквивалентной

ей кинетической схемы Франк-Каменецкого) показывает, что учет конечности числа частиц (особей), то есть переход от детерминистской модели к стохастической приводит к качественному и количественному изменению всей предсказываемой картины явления. В этом смысле правы были биологи, которые в 30-х годах прошлого столетия критиковали математиков за упрощенческий подход к биологическим явлениям.

Вместе с тем ясно, что просто переход к стохастическому описанию в рамках все той же модели Вольтерры–Лотки отнюдь не завершает теоретическое описание популяционных процессов. Может быть, численное описание популяций простейших или саранчи, или морских рыб, число которых исчисляется миллионами и миллиардами, иногда хорошо достигается с помощью ДУ Вольтерры–Лотки. Но при математическом описании популяций более крупных организмов даже переход к стохастическому описанию является необходимым, но отнюдь не достаточным.

Действительно, крупные животные существуют в форме популяций с численностью в несколько сотен или тысяч особей. При этом, как видно из нашей работы, переход к стохастическому моделированию оказывается обязательным. Но, сами популяции, число которых исчисляется лишь десятками или сотнями, уже должны рассматриваться как некие единицы, конкурирующие за территорию и ресурсы. То есть вся математическая модель должна быть, как минимум, двухуровневой, и, кроме того, пространственно распределенной. Это относится и к математическим моделям социально-экономических процессов. В них, помимо привлечения стохастического аппарата моделирования, необходимо учитывать разные уровни организации (человек–предприятие–государство).

Что касается химических процессов «в колбе» или «в реакторе», то для них детерминистские ДУ формальной кинетики являются вполне адекватным теоретическим аппаратом. Но уже для химических процессов в живой клетке стохастическое описание, скорее всего, является необходимым.

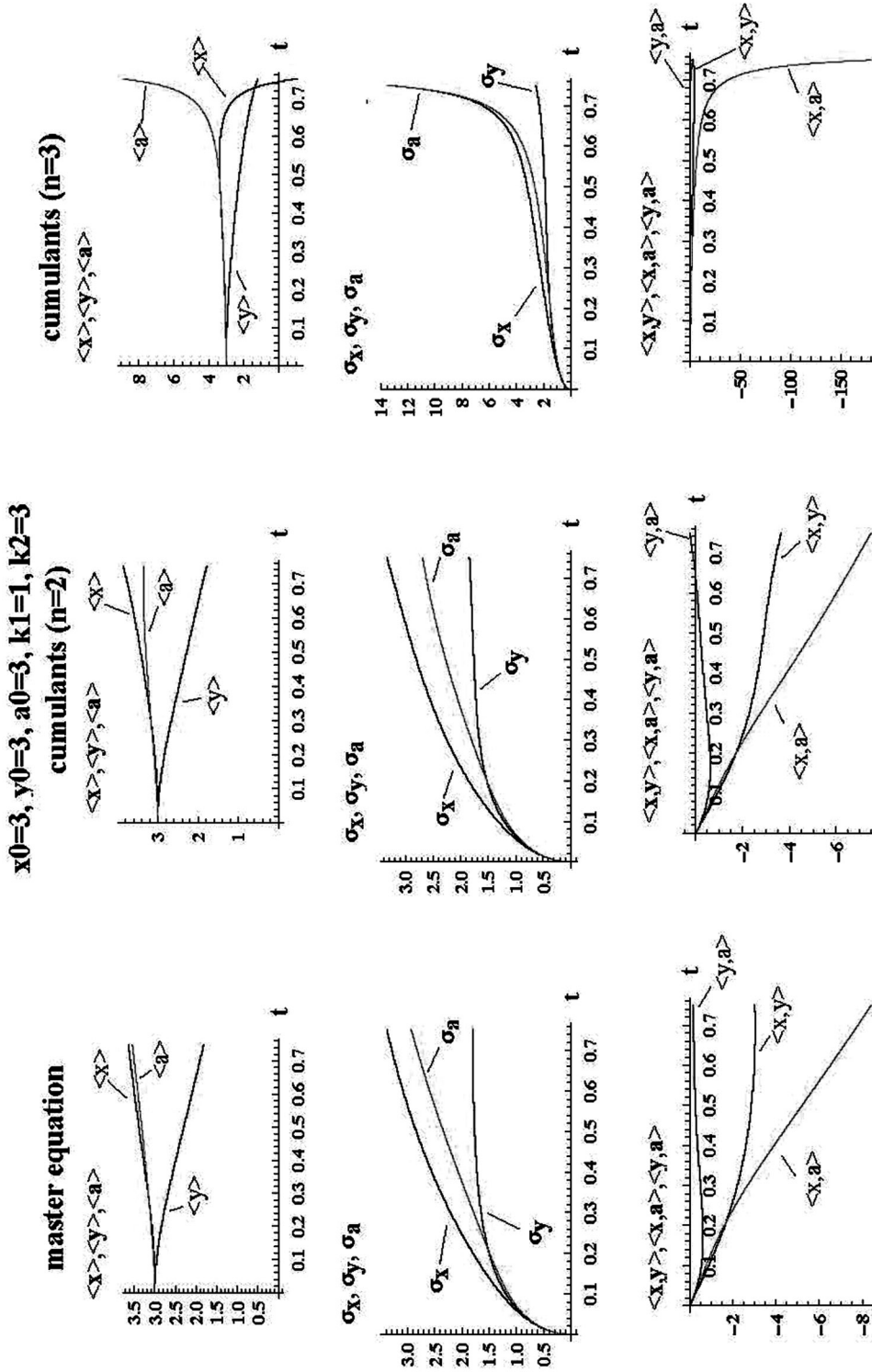


Рис. 10. Результат интегрирования управляющего уравнения (26) (левый столбец) и цепочки уравнений для кумулянтов (37) (средний столбец –  $n=2$ , правый столбец –  $n=3$ ). Везде  $x_0 = 3, y_0 = 3, a_0 = 3, m=9, k_1 = 1, k_2 = 3$

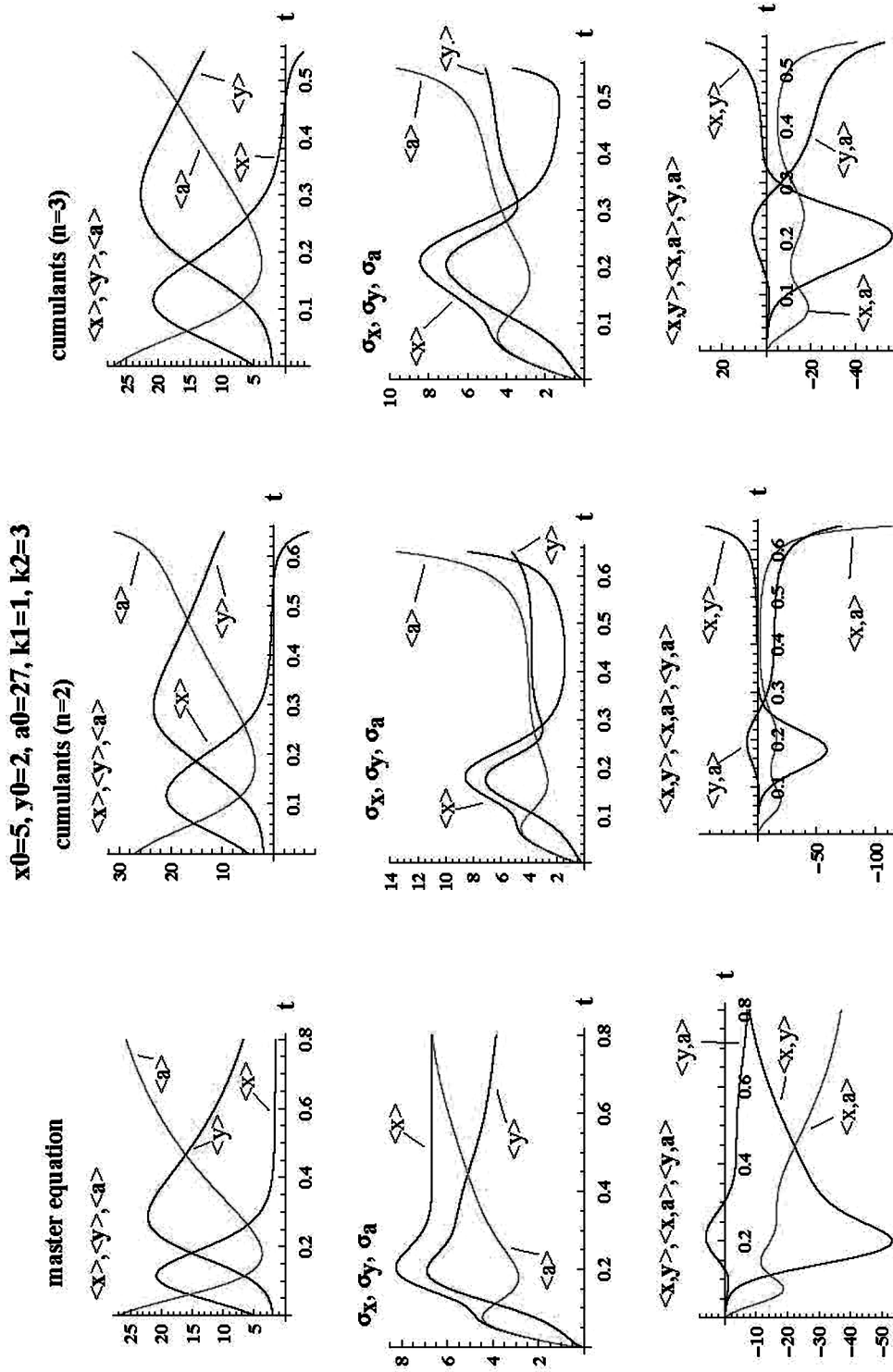


Рис. 11. Результат интегрирования управляющего уравнения (26) (левый столбец) и цепочки уравнений для кумулянтов (37) (средний столбец -  $n=2$ , правый столбец -  $n=3$ ). Везде  $x_0 = 5, y_0 = 2, a_0 = 27, m=34, k_1 = 1, k_2 = 3$ .

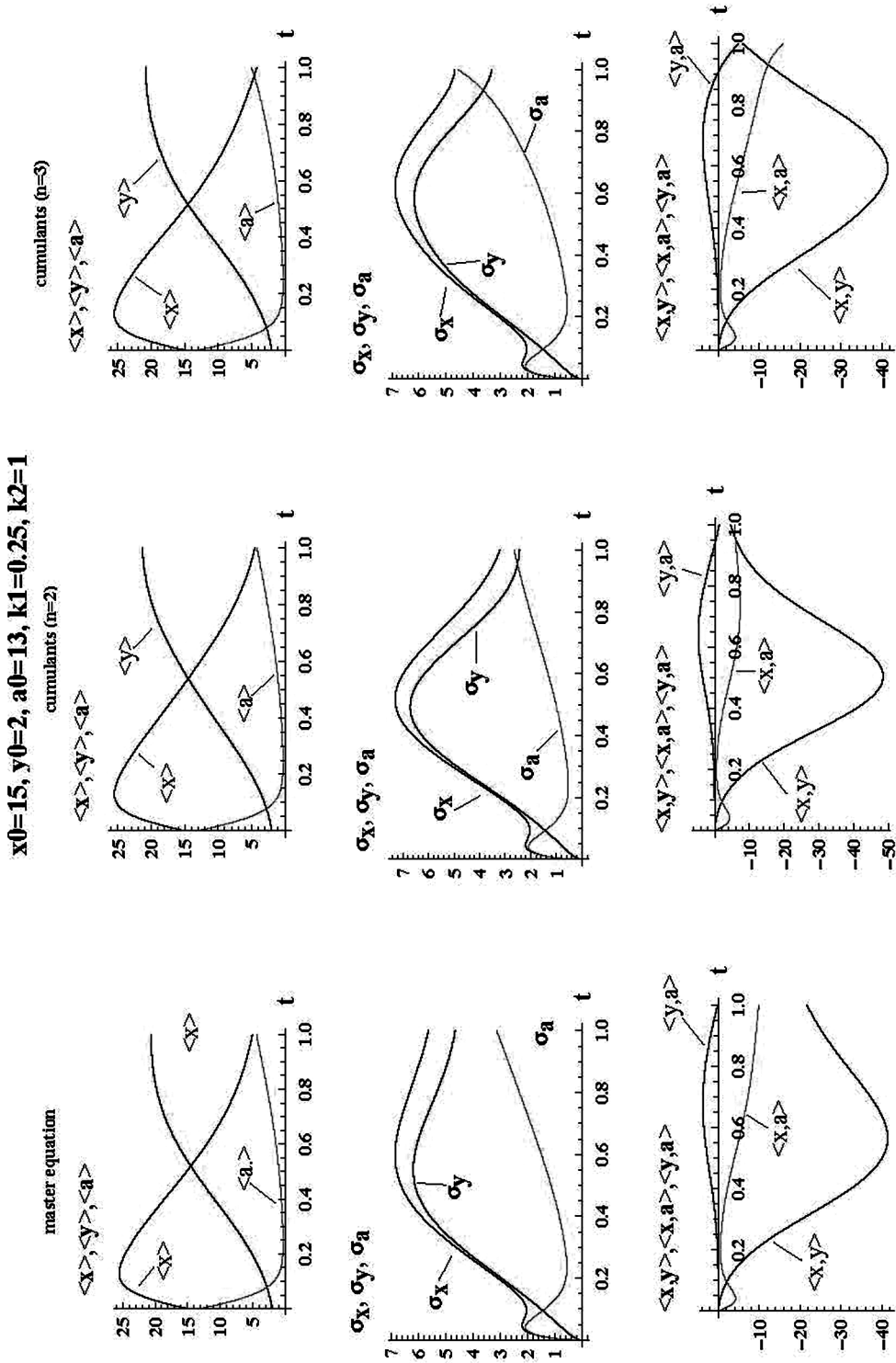


Рис. 12. Результат интегрирования управляющего уравнения (26) (левый столбец) и цепочки уравнений для кумулянтов (37) (средний столбец –  $n=2$ , правый столбец –  $n=3$ ). Везде  $x_0 = 15, y_0 = 2, a_0 = 13, m=30, k_1 = 0.25, k_2 = 1$



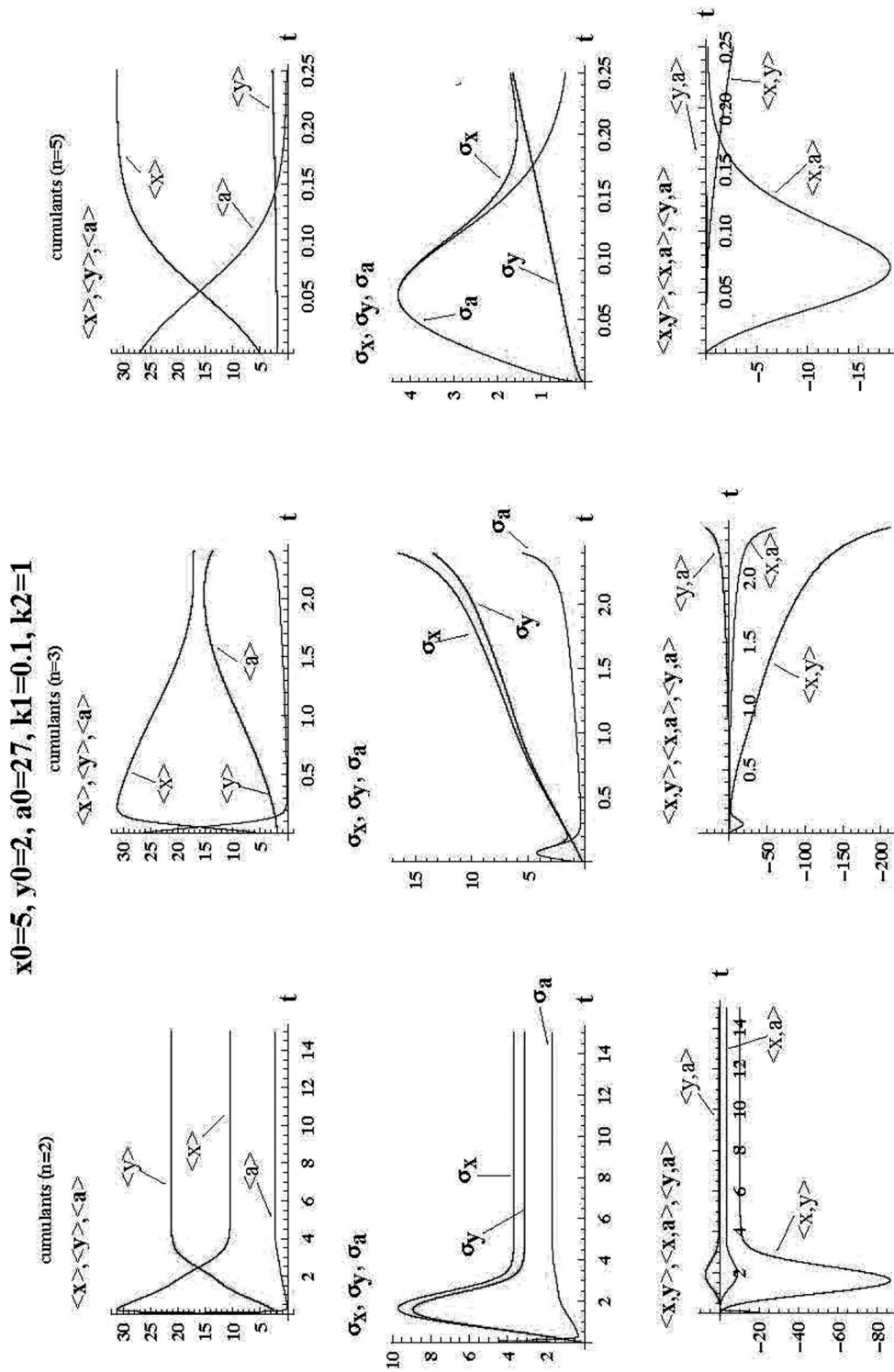
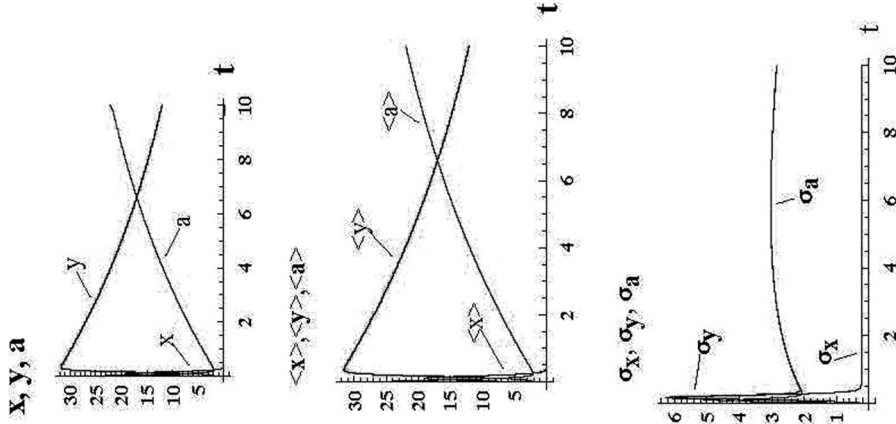
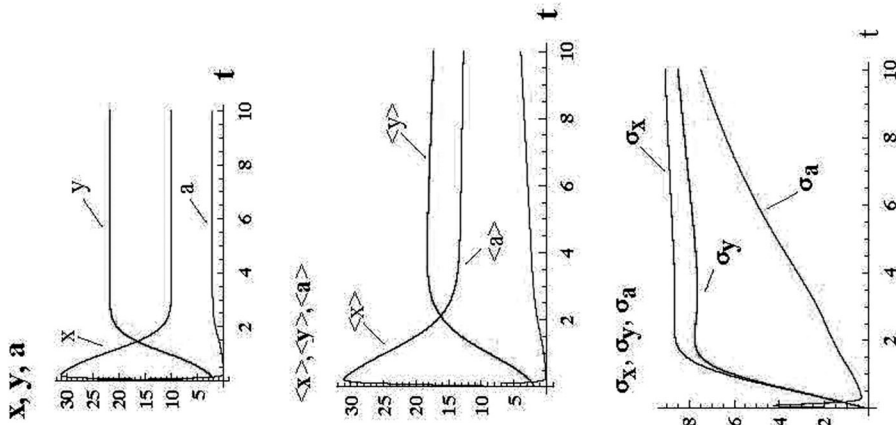


Рис. 13. Результат интегрирования цепочки уравнений (37). Левый столбец –  $n=2$ , средний столбец –  $n=3$ , правый столбец –  $n=5$ . Везде  $x_0 = 5, y_0 = 2, a_0 = 27, m=34, k_1 = 0.1, k_2 = 1$

$x_0=5, y_0=2, a_0=27, k_1=1, k_2=0.1$



$x_0=5, y_0=2, a_0=27, k_1=0.1, k_2=1$



$x_0=5, y_0=2, a_0=27, k_1=1, k_2=1$

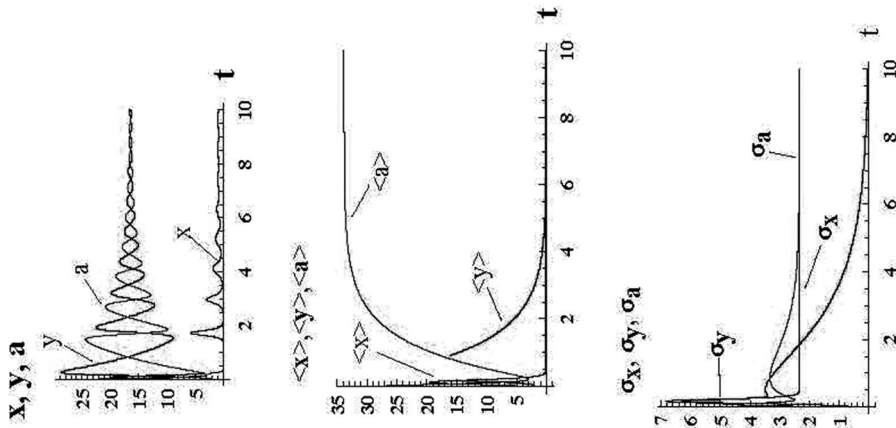


Рис. 14. Результаты вычисления математических ожиданий  $\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle a \rangle$  из детерминистских уравнений (14\*) (верхний ряд) и из управляющего уравнения (26) (средний ряд), а также стандартных отклонений (нижний ряд). Начальные значения везде одинаковы:  $x_0 = 5, y_0 = 2, a_0 = 27$ . В левом столбце  $k_1 = 1, k_2 = 1$ , в среднем столбце  $k_1 = 1, k_2 = 0.1$ , в правом столбце  $k_1 = 0.1, k_2 = 1$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Lotka A. J., Für Theorie der periodischen Reaktionen, *Z. Physik. Chem.*, 1910, 72, 508–511.
2. Lotka A. J., Undamped Oscillations Derived from the Law of Mass Action, *J. Amer. Chem. Soc.*, 1920, 42, 1595–1599.
3. Вольтерра В. *Математическая теория борьбы за существование*, М.: Наука, 1976, 287 с.
4. Винер Н., *Кибернетика или управление и связь в животном и машине*, М.: Советское радио, 1968, 328 с.
5. *БСЭ*, 2-е изд., М.: ГНИ «БСЭ», 1951, т. 9, с. 61.
6. Франк-Каменецкий Д. А., Сальников И.Е., О возможности автоколебаний в гомогенной химической системе при квадратичном автокатализе, *Ж. физ. хим.*, 1943, 17, 79–83.
7. Франк-Каменецкий Д. А., *Диффузия и теплопередача в химической кинетике*, М.: Наука, 1967, 450 с.
8. Медоуз Д., Рандерс Й., Медоуз Д., *Пределы роста. 30 лет спустя*. М.: ИКЦ «Академкнига», 2008, 342 с.
9. Скоробогатов Г. А., Математическое моделирование глобальных социально-экономических процессов, *Доклады Методологического семинара ФИАН*, ФИАН, 2005, вып. 16, 61 с.
10. Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б., *Современные проблемы нелинейной динамики*, М.: Эдиториал УРСС, 2000, 336 с.
11. Баруча-Рид А. Т., *Элементы теории марковских процессов и их приложения*, М.: Наука, 1969, 512 с.
12. Малахов А. Н., *Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований*, М.: Советское радио, 1978, 376 с.

## Deterministic and stochastic modelling of the ecosystem (predator–prey), chemical system (fuel–oxidizer), economical system (resources–industry)

Yu.A. Romashev and G.A. Skorobogatov

*Saint-Petersburg State University, Department of Chemistry, Saint-Petersburg 198504, Russia*

The birth-death process for a system of resources–producers–consumers (RPC), to which Frank-Kamenetsky model to the burning hydrocarbons in chemistry and the Lotka–Volterra predator–prey model in ecology correspond, was studied. Kolmogorov’s theory of random processes gives an adequate mathematical description of time evolution of RPC system for a finite (small) number of objects (individuals). The deterministic equations of the law of acting masses (in chemical kinetics) only for a large number of objects (individuals) follow from this description. The equations from the Lotka–Volterra model (in population dynamics) are also suitable. The validity limits of cumulant series were shown.

*Keywords: Frank-Kamenetsky model, Lotka–Volterra model, Kolmogorov’s equations, master equation, cumulant series.*

Ромашев Юрий Александрович, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информатики математико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного университета (СПбГУ). Область научных интересов: асимптотические методы механики сплошных сред, основания квантовой механики, математическое моделирование.

Герман Александрович Скоробогатов, доктор физ.-мат. наук, профессор химического факультета Санкт-Петербургского государственного университета, руководитель Лаборатории газофазной кинетики и фотохимии. Область научных интересов: основания квантовой механики, кинетические уравнения, газофазная химическая кинетика и фотохимия, радиохимия, геронтология, химическое загрязнение окружающей среды, моделирование глобальной экономики.