MSC 80A30

МОМЕНТЫ СТАЦИОНАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ В СТОХАСТИЧЕСКОЙ ГЕНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Фам Минь Туан, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Вычисляется асимптотика статистических моментов стационарного распределения вероятностей стохастической модели бинарной циклической химической реакции при неограниченном увеличении их порядка. Показывается согласованность вычисленной асимптотики со стационарным состоянием цепочки эволюционных уравнения для моментов распределения.

Ключевые слова: стохастическая модель, уравнение Фоккера-Планка, стационарная плотность распределения, статистические моменты.

1. Введение. Существует целый ряд моделей теоретической физики, которые связаны со стохастическими динамическими системами. Математическое исследование таких моделей и получение физических следствий из результатов такого исследования обычно является объектом статистической физики. Одной из таких стохастических моделей является т.н. *генетическая модель*, которая, в частности, имеет отношение к описанию кинетики бинарных циклических химических реакций при наличии катализаторов [1]. Потребность введения стохастических возмущений в рамках этой модели связана с учетом влияния тепловых флуктуаций среды на протекание реакции, что предопределяет использования именно стохастической модели для теоретического описания ее эволюции во времени t в виде семейства марковских диффузионных процессов для относительной концентрации $x \in [0,1]$ двух участвующих в реакции реагентов. Это семейство параметризуется физическими параметрами $\alpha \in (0,1)$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $\sigma^2 > 0$ и каждый процесс определяется математически посредством соответствующего уравнения Колмогорова (см. [1])

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \big(\hat{H}p\big)(x,t)\,, \tag{1}$$

$$\big(\hat{H}p\big)(x,t) \equiv -\frac{\partial}{\partial x}\Big(\Big[\alpha - x + \lambda x(1-x) + \frac{\sigma^2}{2}x(1-x)(1-2x)\Big]p(x,t)\Big) + \frac{\sigma^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[x^2(1-x)^2 p(x,t)\right] \tag{2}$$

для плотности распределения $p(x,t)$ частного одноточечного распределения вероятностей или плотности условных вероятностей перехода. В физической терминологии такое уравнение, обычно, называют уравнением Фоккера-Планка. Стохастическая система в виде указанного диффузионного процесса обладает стационарным состоянием, то есть уравнение (1) имеет стационарное решение $p(x)$ при граничных условиях отсутствия потока через границы пространства концентраций – отрезка $[0,1]$. Известно, что это стационарное состояние обладает бифуркацией при изменении параметров $\alpha, \lambda, \sigma^2$, которая состоит в том, что плотность $p(x)$ из унимодальной перестраивается в бимодальную. Довольно полное исследование этого перехода дано нами в работах [2], [3]. Однако, до настоящего времени неизвестно: является ли это состояние равновесным, т.е. финальным для марковского процесса. Иными словами, вопрос состоит в том, является ли плотность $p(x)$ предельной при $t \to \infty$ для решений $p(x,t)$ уравнения (1) с произвольными начальными условиями, представляющими собой плотности распределения на отрезке $[0,1]$ и подчиненных указанным граничным условиям. Одним из мыслимых подходов к решению этой математической проблемы является изучение системы эволюционных уравнений для моментов

$$\varphi_n(t) = \int_0^1 x^n p(x,t)dx\,, \quad n \in \mathbb{N} \tag{3}$$

плотности распределения, которая, в случае, если $p(x)$ является равновесным решением уравнения (1), с необходимостью, должна обладать равновесным решением φ_n, $n \in \mathbb{N}$.

Настоящая работа посвящена доказательству того, что моменты φ_n, вычисленные на основе $p(x)$,

$$\varphi_n = \int_0^1 x^n p(x)dx \tag{4}$$

как раз, представляют такое равновесное решение, и вычислению асимптотики значений этих моментов при $n \to \infty$.

2. Уравнения для моментов $\varphi_n(t)$. Найдем уравнения для моментов $\varphi_n(t)$ исходя из уравнения (1). Запишем действие оператора $(\hat{H}p)(x,t)$ в виде

$$(\hat{H}p)(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} J[p](x,t)\,,$$

где $J[p](x,t)$ – поток вероятности,

$$J[p](x,t) = \Big[\alpha - x + \lambda x(1-x) + \frac{\sigma^2}{2}x(1-x)(1-2x)\Big]p(x,t) - \frac{\sigma^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[x^2(1-x)^2 p(x,t)\right]. \tag{5}$$

Исследуемый случайный процесс хорошо определен в том случае, если поток $J[p](x,t)$ равен нулю при $x = 0, 1$.

Умножая обе части уравнения на x^n и интегрируя от 0 до 1 по частям, получим, используя явное выражение для действия оператора $\hat{H}$ и пользуясь граничными условиями для потока $J[p](x,t)$:

$$\dot{\varphi}_n(t) = n\left[\frac{\sigma^2}{2}(n+1)\varphi_{n+2}(t) - \left(\frac{\sigma^2}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) + \lambda\right)\varphi_{n+1}(t) + \right.$$

$$\left. + \left(n\frac{\sigma^2}{2} + \lambda - 1\right)\varphi_n(t) + \alpha\varphi_{n-1}(t)\right]\,, \quad n \in \mathbb{N}\,. \tag{6}$$

В уравнении при $n = 1$ нужно положить $\varphi_0(1) \equiv 1$, согласно свойству плотности $p(x,t)$.

Согласно своему определению, моменты $\varphi_n(t)$ образуют монотонно убывающую, стремящуюся к нулю и сосредоточенную на $(0,1)$ последовательность при любой интегрируемой плотности $p(x,t)$. Более того, для них справедливы неравенства Ляпунова $\varphi^{1/(n+1)} < \varphi^{1/n}$ (см., например, [4]).

Равновесные статистические моменты φ_n плотности распределения обязаны, соответственно, удовлетворять системе уравнений

$$\frac{\sigma^2}{2}(n+1)\varphi_{n+2} - \left(\frac{\sigma^2}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\lambda\right)\varphi_{n+1} +$$

$$+ \left(n\frac{\sigma^2}{2}+\lambda-1\right)\varphi_n + \alpha\varphi_{n-1} = 0\,, \quad n \in \mathbb{N}\,. \tag{7}$$

Исходя из этой системы, можно вычислить все равновесные моменты φ_n, если задать значения первых двух моментов φ_1 и φ_2.

Замечательно, что только для фиксированных значений φ_1, φ_2 разностное уравнение, определяемое системой уравнений (7), определяет последовательность моментов какой-либо плотности распределения. В противном случае, существовали бы две различные стационарные плотности распределения, удовлетворяющие уравнению (7) и граничным условиям $J[p](x) = 0$ при $x = 0, 1$.

Так как плотность распределения $p(x)$ является стационарной, то моменты φ_n, вычисленные на ее основе, должны удовлетворять этой системе уравнений. Если, кроме того, она является равновесной, то решения системы уравнений (6) в том случае, когда они соответствуют начальным условиям $\varphi_n(0)$, вычисленным на основе какой-либо начальной плотности распределения $p(x,0)$, должны стремится к моментам φ_n. Обратно, если последнее имеет место, то говорят, что соответствующее решение уравнения (1) – плотность $p(x,t)$ слабо стремится к плотности $p(x)$. Это связано с тем, что, одновременно со стремлением $\varphi_n(t)$ к φ_n при $t \to \infty$, выполняется также предельное соотношение для характеристических функций плотностей $p(x,t)$ и $p(x)$ (это связано с тем, что эти плотности определены на компактном отрезке).

3. Вычисление асимптотики моментов распределения. Плотность распределения вероятностей $p(x)$, которая удовлетворяет уравнению $\hat{H}p(x) = 0$ и граничным условиям $J[p](x) =$ при $x = 0, 1$, определяется явной формулой (см. [2])

$$p(x) = \frac{A}{x(1-x)}\left(\frac{x}{1-x}\right)^{\beta} \exp\left\{-\frac{2}{\sigma^2}\left(\frac{1-\alpha}{1-x}+\frac{\alpha}{x}\right)\right\}, \tag{8}$$

$$A = \frac{1}{2}\exp\left\{\frac{2}{\sigma^2}+\beta\ln\sqrt{\frac{1-\alpha}{\alpha}}\right\}\left[K_{-\beta}\left(-\frac{4}{\sigma^2}\sqrt{\alpha(1-\alpha)}\right)\right]^{-1},$$

где $K_{-\beta}(\cdot)$ – модифицированная функция Бесселя второго рода с показателем $(-\beta)$ и $\beta = 2(2\alpha+\lambda-1)/\sigma^2$.

В интеграле (4), определяющем моменты φ_n совершим замену переменной интегрирования $x = 1 - y/\sqrt{n}$. В результате, получим

$$\varphi_n = An^{\beta/2} \int_0^{\sqrt{n}} \left(1 - \frac{y}{\sqrt{n}}\right)^{\beta+n-1} \exp\left[-\frac{2}{\sigma^2}\left(\frac{\alpha}{1 - y/\sqrt{n}} + \frac{1-\alpha}{y}\right)\right] \frac{dy}{y^{\beta+1}} .$$

Для вычисления асимптотики этого интеграла при $n \to \infty$ применим метод Лапласа (см., например, [5]). Во-первых, воспользуемся предельным соотношением $(1 - y/\sqrt{n})^{\sqrt{n}} \to e^{-y}$ при $n \to \infty$, что допустимо при вычислении главного члена асимптотики, а затем определим функцию

$$S(y) = \frac{2}{\sigma^2}\frac{1-\alpha}{y} + y .$$

Тогда, для вычисления главного члена асимптотики, представим последний интеграл в виде

$$\varphi_n = A\exp\Big(-\frac{2\alpha}{\sigma^2}\Big) n^{\beta/2}(1 + o(1)) \int_0^{\sqrt{n}} \exp\left[-\sqrt{n}S(y)\right] \frac{dy}{y^{\beta+1}} ,$$

Согласно методу Лапласа вычислим стационарную точку показателя экспоненты. Так как $S'(y) = 1 - 2(1-\alpha)/\sigma^2 y^2$, то стационарная точка y_*, удовлетворяющая $S'(y_*) = 0$ единственна. Она равна

$$y_* = \sqrt{\frac{2(1-\alpha)}{\sigma^2}} , \qquad S(y_*) = 2y_* .$$

При этом

$$S''(y) = \frac{4}{\sigma^2}\frac{(1-\alpha)}{y^3} , \quad S''(y_*) = \sqrt{\frac{2\sigma^2}{1-\alpha}} > 0 ,$$

что дает возможность применить для вычисления асимптотики интеграла основную теорему метода Лаплса (см. [5]). Единственным препятствием для ее непосредственного применения, является наличие особенности на левом конце интервала интегрирования, из-за чего невозможна замена в подинтегральном выражении функции $S(y)$ на ее разложение в окрестности стационарной точки. Это связано с тем, что $S(y)$ обеспечивает сходимость интеграла в окрестности этой особенности и замена ее на квадратичную функцию приведет к расходимости интеграла. Поэтому применим основную формулу метода Лапласа к интегралу

$$\int_\varepsilon^{\sqrt{n}} \exp\left[-\sqrt{n}S(y)\right] \frac{dy}{y^{\beta+1}} = \left(\frac{2\pi}{S''(y_*)}\right)^{1/2} \frac{\exp\big(-\sqrt{n}\,S(y_*)\big)}{n^{1/4}y_*^{(\beta+1)}} (1 + o(1)) , \tag{9}$$

где $0 < \varepsilon < y_*$. После этого оценим остаточный интеграл

$$\int_0^{\varepsilon} \exp\left[-\sqrt{n}S(y)\right] \frac{dy}{y^{\beta+1}} < \int_0^{\varepsilon} \exp\left[-\frac{2\sqrt{n}}{\sigma^2 y}\right] \frac{dy}{y^{\beta+1}} = n^{-\beta/2} \int_0^{\varepsilon/\sqrt{n}} \exp\Big(-\frac{2}{\sigma^2 y}\Big) \frac{dy}{y^{\beta+1}} <$$

$$< n^{1/2}\varepsilon^{-(\beta+1)}\exp\Big(-\frac{2\sqrt{n}}{\varepsilon\sigma^2}\Big),$$

что, при достаточно малом ε, асимптотически более высокого порядка, чем выражение в правой части в (9). Таким образом, окончательно, получаем, что

$$\int_0^{\sqrt{n}}\exp\big[-\sqrt{n}S(y)\big]\frac{dy}{y^{\beta+1}} = \left(\frac{2\pi}{S''(y_*)}\right)^{1/2}\frac{\exp\big(-\sqrt{n}\,S(y_*)\big)}{n^{1/4}y_*^{(\beta+1)}}(1+o(1))$$

и, следовательно,

$$\varphi_n = A\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\frac{\sigma^2}{2(1-\alpha)}\right)^{\beta/2}\exp\Big(-\frac{2\alpha}{\sigma^2}\Big)n^{\beta/2-1/4}\exp\left(-2\Big(\frac{2n(1-\alpha)}{\sigma^2}\Big)^{1/2}\right)(1+o(1))\,. \quad (10)$$

Легко показать, что это асимптотическое выражение удовлетворяет уравнению (7) с точностью до $O(n^{-1})$. С этой целью, исходя из полученного выражения (10), вычисляется асимптотика отношения

$$\frac{\varphi_{n+1}}{\varphi_n} = \left(1+\frac{1}{n}\right)^{\beta/2-1/4}\exp\left(-\Big(\frac{2(1-\alpha)}{\sigma^2}\Big)^{1/2}(\sqrt{n+1}-\sqrt{n})\right) =$$
$$= \left(1+\frac{\beta-1/2}{2n}+O(n^{-2})\right)\left(1-\Big(\frac{2(1-\alpha)}{n\sigma^2}\Big)^{1/2}+\frac{1-\alpha}{n\sigma^2}+O(n^{-3/2})\right) =$$
$$= 1-\Big(\frac{2(1-\alpha)}{n\sigma^2}\Big)^{1/2}+\frac{\alpha+\lambda}{n\sigma^2}+O(n^{-3/2})\,,$$

подстановкой которой в (7) получаем требуемое тождественное равенство.

Литература

1. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы: Теория и применение в физике, химии и биологии / Пер. с англ. /М.: Мир, 1987. – 400 с.
2. Фам Минь Туан, Вирченко Ю.П. Анализ стохастической модели химической кинетики бинарной автокаталитической реакции // Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics. – 2013. – 11(154);31. – С.130-146.
3. Фам Минь Туан, Вирченко Ю.П. Анализ критической поверхности стохастической модели бинарной циклической реакции с фазовым переходом // Belgorod State University Scientific. Bulletin Mathematics & Physics. – 2014. – №25(196); 37. – С.108-118.
4. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей / М.: Эдиториал, УРСС, 2005. – 448 с.
5. Федорюк М.В. Метод перевала / М: Наука, 1977. – 368 с.

STATISTICAL MOMENTS OF STATIONARY PROBABILITY DISTRIBUTION DENSITY IN STOCHASTIC GENETIC MODEL

Pham Minh Tuan, Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru,

Abstract. Asymptotic dependence of statistical moments of stationary probability distribution density in the stochastic model of binary cyclic chemical reaction proposed by Horsthemke W. and Lefever R. is calculated when order of the later tends to infinity. It is shown that such a calculated asymptotic corresponds to stationary state of the evolution equation system of the moments.

Key words: stochastic model, Fokker-Plank's equation, stationary distribution density, statistical moments.