

И. Н. Цымлов (Волгоград, ВолГУ). **Стохастическая модель биофизической зависимости «концентрация-доза»: численное моделирование и оценивание неизвестных параметров.**

Работа, представленная данным сообщением, посвящена созданию алгоритмов численного моделирования и оценивания неизвестных параметров для стохастической модели зависимости дозы вещества в организме от концентрации этого вещества в окружающей среде. В работе исследована предложенная А.М.Колодий стохастическая модель зависимости «концентрация-доза», определяемая системой стохастических дифференциальных уравнений Ито

$$dX_\ell(t) = \theta_\ell F_\ell(t) dt - \left(\sum_{k=1}^L \lambda_{k,\ell} \right) X_\ell(t) dt + \sum_{k=1, k \neq \ell}^L \lambda_{\ell,k} X_k(t) dt + \sigma_\ell X_\ell(t) dW_\ell(t), \quad (1)$$

$$X_\ell(0) \geq 0, \quad \ell = 1, \dots, L.$$

Согласно этой модели, векторная случайная функция $X(t) = (X_1(t), \dots, X_L(t))$ описывает дозу вещества в организме с L органами. Коэффициент $\theta_\ell F_\ell(t)$ в уравнении (1) характеризует интенсивность поступления вещества в ℓ -й орган. Коэффициент $\lambda_{j,k}$ при $j \neq k$ характеризует интенсивность перемещения вещества из j -го органа в k -й, а при $j = k$ — интенсивность выведение вредного вещества из j -го органа во внешнюю среду. Естественным условием для коэффициентов $\theta_\ell F_\ell(t)$ и $\lambda_{j,k}$ является их неотрицательность.

В докладе рассматривается следующая схема численного моделирования исследуемой биофизической зависимости:

$$X_\ell^{(i+1)} = \exp \left\{ - \left(\sum_{k=1}^L \lambda_{k,\ell} + \frac{\sigma_\ell^2}{2} \right) \Delta + \sigma_\ell \sqrt{\Delta} \varepsilon_\ell^i \right\} \left(X_\ell^{(i)} + \theta_\ell F_\ell(i\Delta) \left(1 - \frac{\sigma_\ell}{2} \sqrt{\Delta} \varepsilon_\ell^i \right) \Delta \right. \\ \left. + \sum_{k=1, k \neq \ell}^L \lambda_{\ell,k} X_k^{(i)} \left(1 - \frac{\sigma_\ell}{2} \sqrt{\Delta} \varepsilon_\ell^i - \frac{\sigma_k}{2} \sqrt{\Delta} \varepsilon_k^i \right) \Delta \right), \quad (3)$$

где ε_k^i — независимые при различных (i, k) нормально распределенные случайные величины с нулевым средним и единичной дисперсией.

Теорема. Если функции $F_1(t, C), \dots, F_L(t, C)$ непрерывно дифференцируемы по t , то схема (2) сходится к решению уравнения (1) сильно с порядком $3/2$, а именно,

$$\max_{\ell=1, \dots, L} \max_{i=1, \dots, I} \mathbf{M} |X_\ell^{(i)} - X_\ell(i\Delta)|^2 \leq C_{L,I} \Delta^{3/2}.$$

Для оценивания параметров данной модели применяется комбинация метода моментов и метода наименьших квадратов. Для вычисления моментов решений стохастических дифференциальных уравнений (1) получена следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений (по всевозможным наборам $\{s_k\}_{k=1}^m$ при $s_k \in \{1, \dots, L\}$):

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} \prod_{k=1}^m X_{s_k}(t) = \sum_{j=1}^m \theta_{s_j} F_{s_j}(t) \mathbf{M} \prod_{k=1, k \neq j}^m X_{s_k}(t) - \left(\sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^L \lambda_{k,s_j} \right) \mathbf{M} \prod_{k=1}^m X_{s_k}(t) \\ + \sum_{j=1}^m \sum_{r=1, r \neq s_j}^L \lambda_{s_j,r} \mathbf{M} X_r(t) \prod_{k=1, k \neq j}^m X_{s_k}(t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m (\bar{s}_j - 1) \sigma_{s_i} \sigma_{s_j} \prod_{k=1}^m \mathbf{M} X_{s_k}(t) \delta_{i,j},$$

где $\bar{s}_j$ равно количеству $s_j = s_k$ в наборе $\{s_k\}_{k=1}^m$.