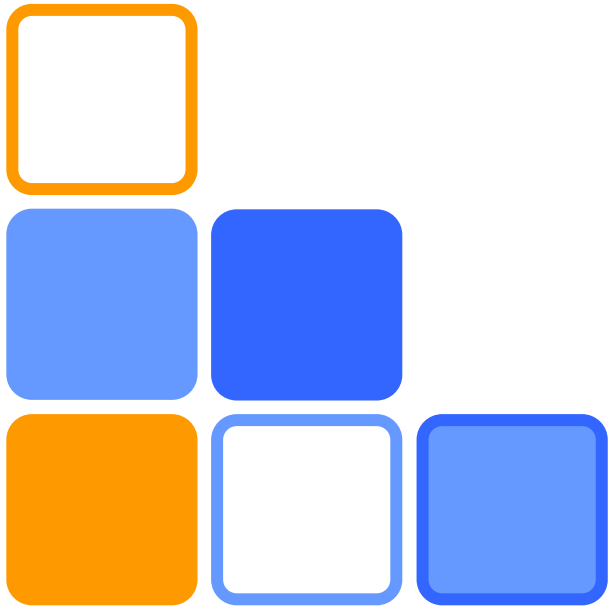


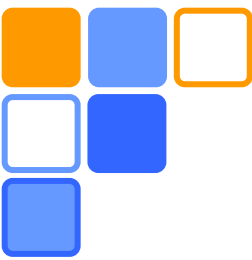
薬学情報処理演習 第5回

常微分方程式の応用： 感染症流行のモデルと 非線形化学振動反応の シミュレーション

奥菌 透

コロイド・高分子物性学





感染症流行のモデル

□ SIRモデル

人口 N の集団における未感染者の数 S 、感染者の数 I 、回復者(死者も含める)の数 R は、

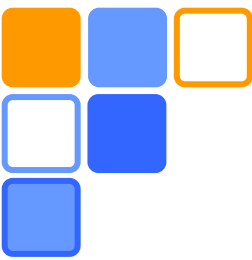
$$S + I + R = N$$

を満たし、時刻 t に関する常微分方程式に従う:

$$\frac{dI}{dt} = \beta SI - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

ここで、 N, β, γ は正の定数である。ただし、 $\beta \propto 1/N$ であり、 $\beta = \beta_0/N$ とする。 β_0 は一人から単位時間に感染する人の数(定数)。



モデル方程式

前頁の式から S を消去すると、 I と R の時間発展方程式が得られる:

$$\frac{dI}{dt} = \beta(N - I - R)I - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$

変数を N で規格化し、 $u = I/N$, $v = R/N$ とする。また、 $1/\gamma$ で時間を規格化し、 $\tau = \gamma t$ とすると、上の方程式は、

$$\frac{du}{d\tau} = R_0(1 - u - v)u - u$$

$$\frac{dv}{d\tau} = u$$

となる。 $R_0 = \beta_0/\gamma$ は基本再生産数と呼ばれ、モデルを特徴付ける唯一のパラメータである。

数値計算

u, v の時間発展方程式の初期値問題を単純なオイラー差分法によって数値的に解く。時刻を $\tau_n = n\Delta\tau$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) とし、 τ_n における (u, v) の近似値を (u_n, v_n) とすると、以下の式が得られる。

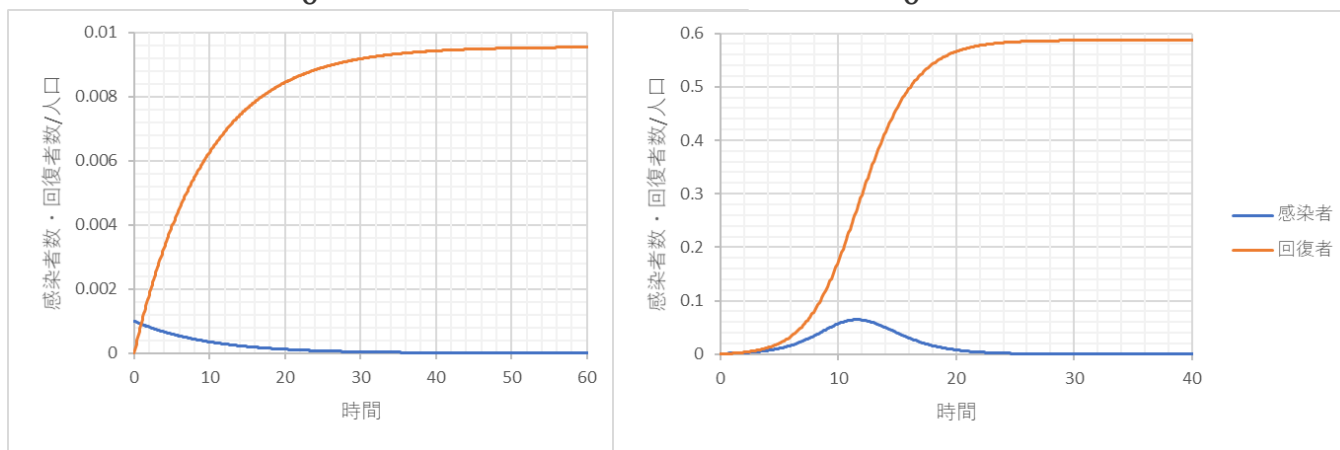
$$u_{n+1} = u_n + \Delta\tau [R_0(1 - u_n - v_n)u_n - u_n]$$

$$v_{n+1} = v_n + \Delta\tau u_n$$

計算例: $R_0 < 1$ のとき、感染者は減少するが、 $R_0 > 1$ のときには、感染者は急激に増加することがわかる。

$R_0 = 0.9$

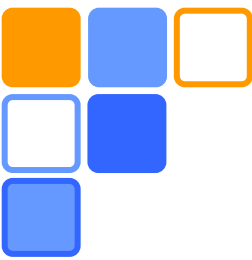
$R_0 = 1.5$



初期値:

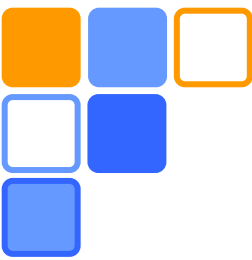
$$u_0 = 0.001$$

$$v_0 = 0$$



演習課題1

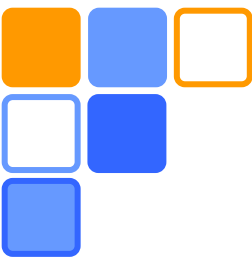
- 一定の割合で人の交流がある2つの集団(集団1と集団2)を考える。これらの集団の片方(あるいは両方)で感染症が発生したときの感染者数の時間変化を表すモデルを構築し、それに基づき、いくつかのパラメータの値に対して数値計算を行い、これらの集団における感染症流行の特徴を議論せよ。
- 例えば、次頁に示すモデルを参考にしてもよい。ただし、このモデルは非常に単純化したもので、改良を加えていただいてもかまわない。



2集団SIRモデル

- それぞれの人口が N_1, N_2 の2つの集団間で、単位時間あたり、 $\alpha_1 N_1$ と $\alpha_2 N_2$ の人が相互に入れ替わるとする。これらの人はそれぞれの集団から任意に選ばれるとする。したがって、集団1では $\alpha_1 I_1$ の感染者が出て行き、 $\alpha_2 I_2$ の感染者が入ってくる。 R_1 についても同様である。集団2では、対応した(逆の)移動がある。
- 簡単のため、 $\alpha_1 N_1 = \alpha_2 N_2$ とする。即ち、 N_1, N_2 は時間変化しない。

(次頁のモデル方程式では、 $\frac{\alpha_1}{\gamma}, \frac{\alpha_2}{\gamma}$ を α_1, α_2 と書く)



モデル方程式系

□ 集団1

$$\frac{du_1}{d\tau} = R_0(1 - u_1 - v_1)u_1 - u_1 + \alpha_1(u_2 - u_1)$$

$$\frac{dv_1}{d\tau} = u_1 + \alpha_1(v_2 - v_1)$$

□ 集団2

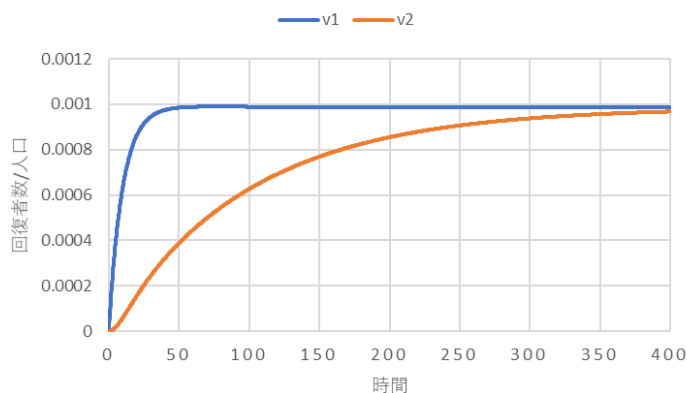
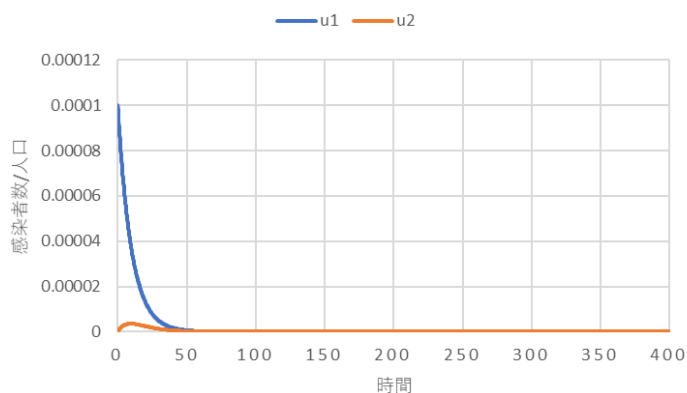
$$\frac{du_2}{d\tau} = R_0(1 - u_2 - v_2)u_2 - u_2 + \alpha_2(u_1 - u_2)$$

$$\frac{dv_2}{d\tau} = u_2 + \alpha_2(v_1 - v_2)$$

□ パラメータ

$$R_0, \quad \alpha_1, \quad N_1/N_2 \quad (\alpha_2 = \alpha_1 N_1/N_2)$$

計算結果(例)



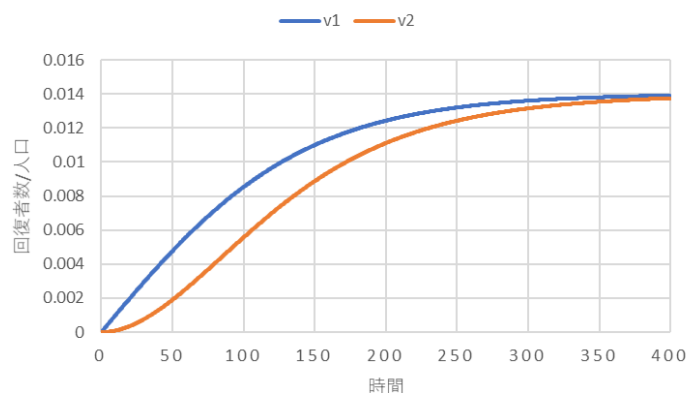
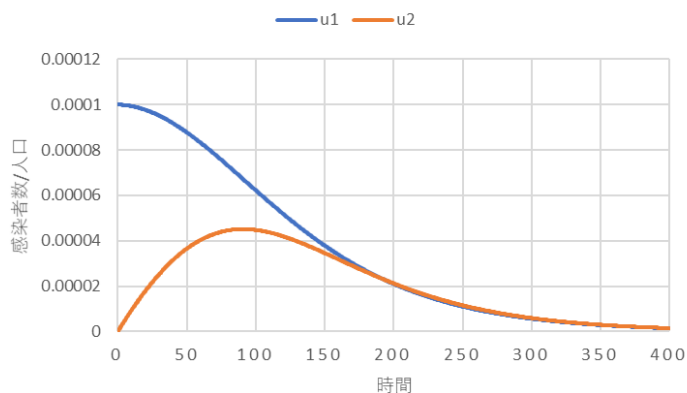
パラメータ

$$R_0 = 0.9,$$
$$\alpha_1 = 0.0001,$$
$$N_1/N_2 = 100$$

初期値

$$u_1 = 0.0001$$

$$v_1 = u_2 = v_2 = 0$$



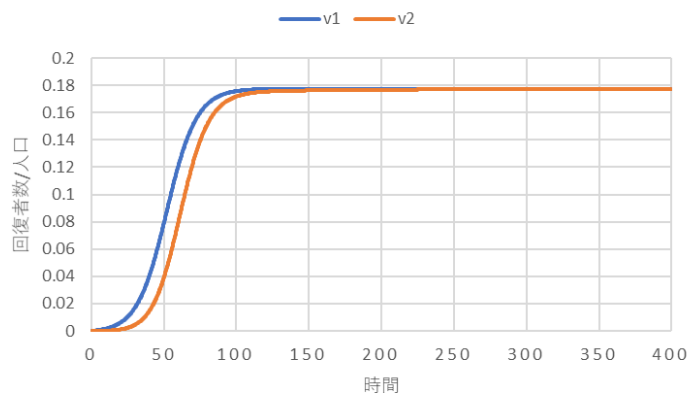
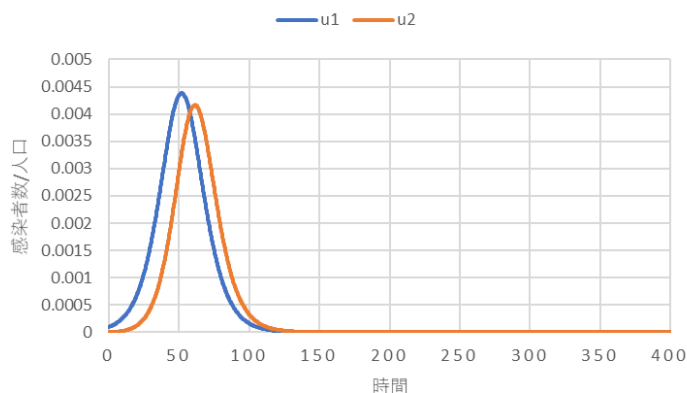
パラメータ

$$R_0 = 1.0,$$
$$\alpha_1 = 0.0001,$$
$$N_1/N_2 = 100$$

初期値

$$u_1 = 0.0001$$

$$v_1 = u_2 = v_2 = 0$$



パラメータ

$$R_0 = 1.1,$$
$$\alpha_1 = 0.0001,$$
$$N_1/N_2 = 100$$

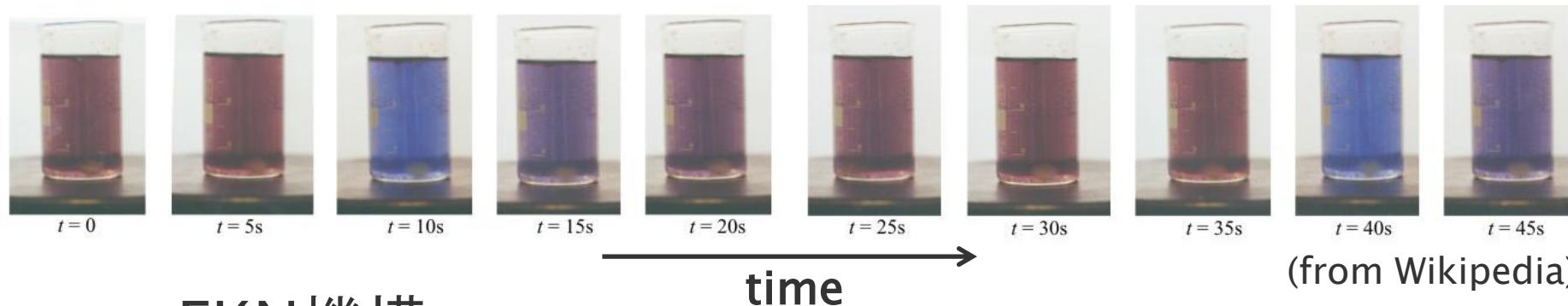
初期値

$$u_1 = 0.0001$$

$$v_1 = u_2 = v_2 = 0$$

化学振動反応

ベローゾフ・ジャボチンスキー反応 (BZ反応)



FKN機構

振動に関する反応



10個の反応式

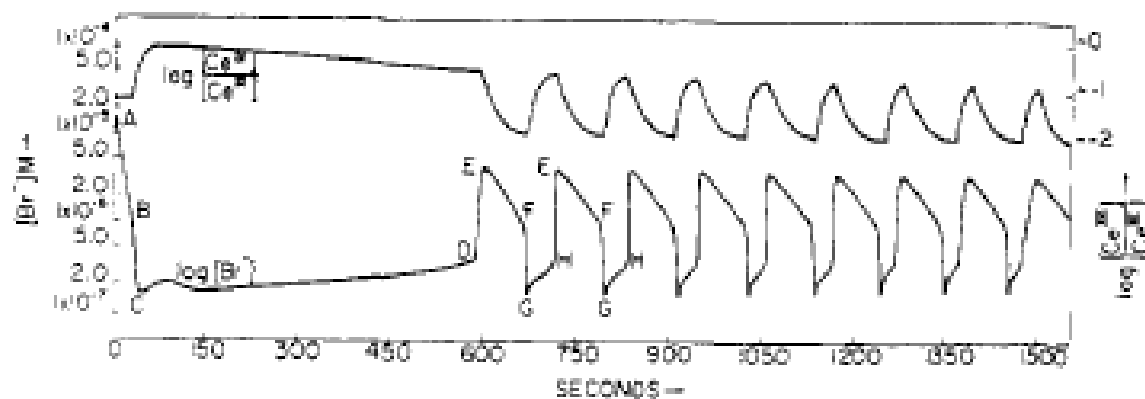
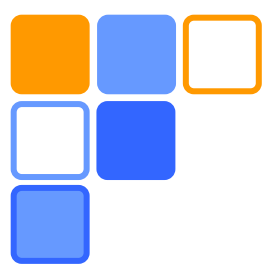


Figure 1. Potentiometric traces of $\log [\text{Br}^-]$ and $\log [\text{Ce(IV)}]/[\text{Ce(III)}]$ for a representative reaction exhibiting all six periods. Initial concentrations were $[\text{CH}_2(\text{COOH})_2]_0 = 0.032 \text{ M}$, $[\text{KBrO}_3]_0 = 0.063 \text{ M}$, $[\text{KBr}]_0 = 1.5 \times 10^{-3} \text{ M}$, $[\text{Ce}(\text{NH}_4)_2(\text{NO}_3)_6]_0 = 0.001 \text{ M}$, $[\text{H}_2\text{SO}_4]_0 = 0.8 \text{ M}$.

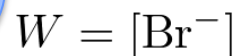
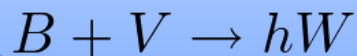
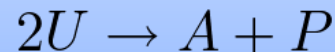
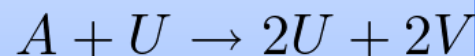
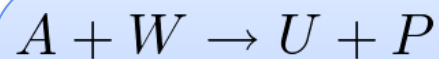


BZ反応のモデル

□ オレゴネーター

- 10以上の反応式
- ➡ 5つの反応式

□ 2変数モデル(タイソン)



$$\epsilon \frac{du}{dt} = u(1 - u) - \frac{bv(u - c)}{u + c}$$

$$\frac{dv}{dt} = u - v$$

$$\epsilon \simeq 10^{-2}$$

$$b \simeq 1$$

$$c \simeq 8 \times 10^{-4}$$

- u, v はそれぞれ $\text{HBrO}_2, \text{Ce}^{4+}$ の濃度に対応
- t は無次元化された時間、 ϵ, b, c は定数
(時間スケール ~ 50 sec)

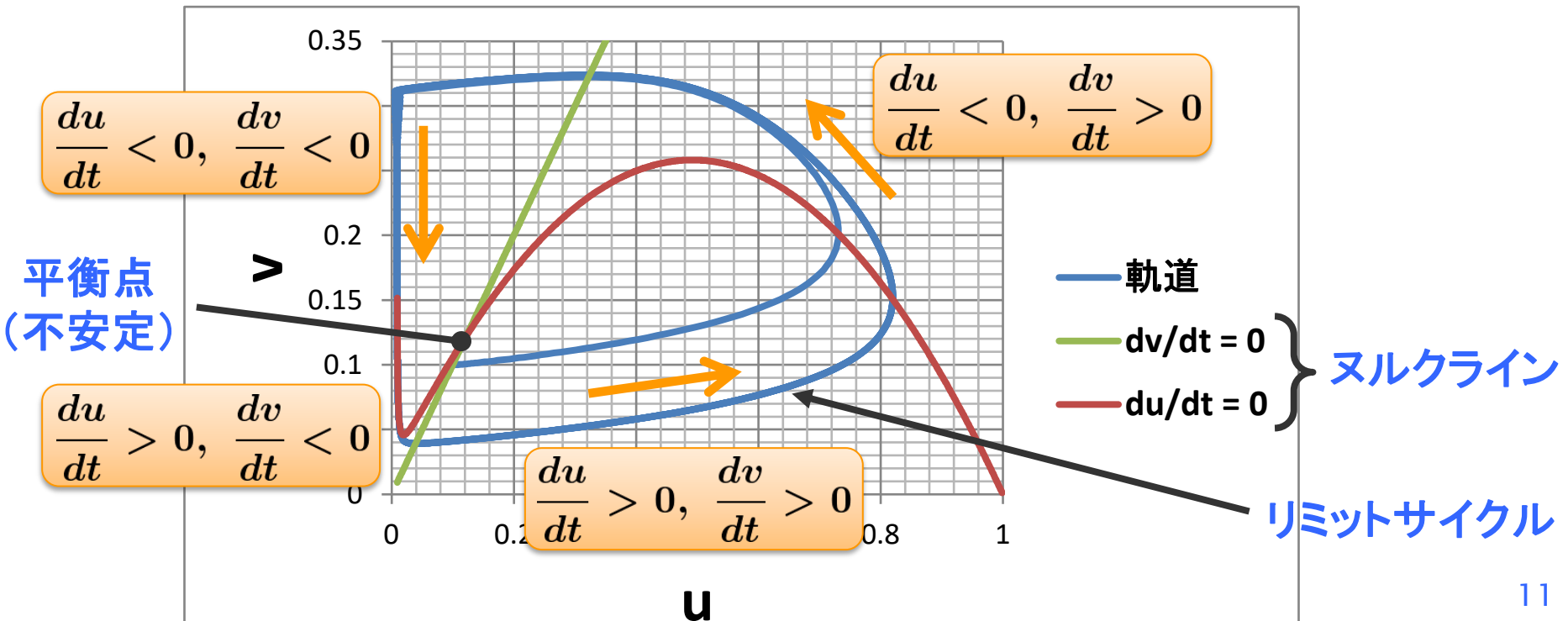
振動(力学系)の特徴

□ 平衡点の安定性

- 平衡点: $du/dt = dv/dt = 0$ となる (u, v)
- 時間とともに平衡点に近づく: **安定**、遠ざかる: **不安定**

□ リミットサイクル振動

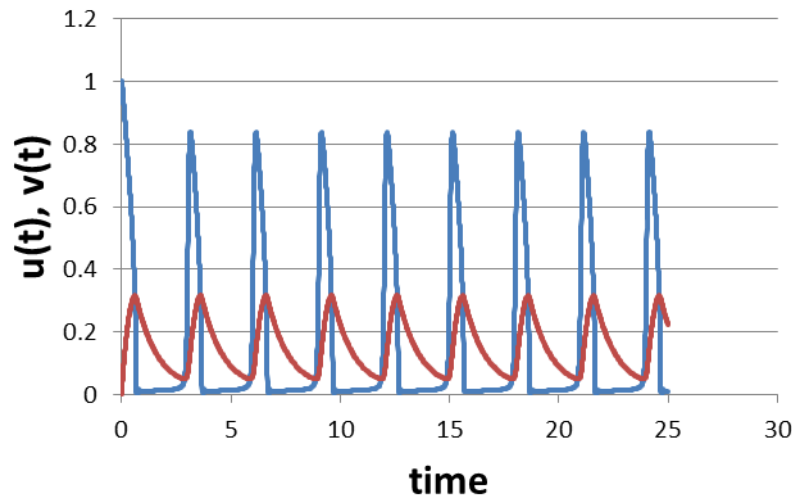
- 初期値によらず閉じた軌道(**リミットサイクル**)に近づく



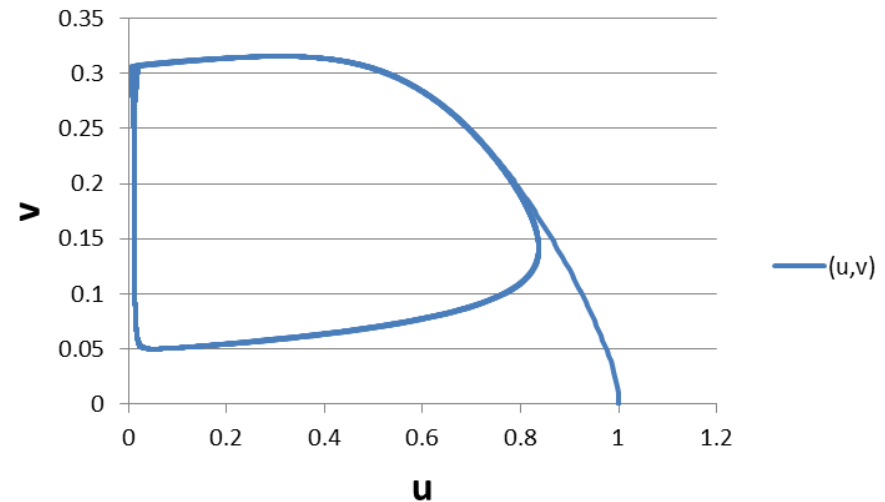
数値シミュレーション

- 前回と同様の手法でシミュレーションを行う。
- いろいろなパラメータや初期値に対して計算する。

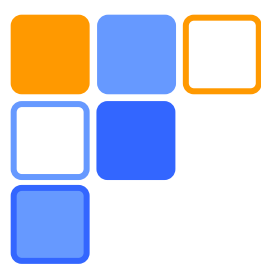
u, v の時間変化



軌道図



パラメータ: $\epsilon=0.03$, $b=1$, $c=0.01$, $\Delta t=0.005$
初期値: $u=1$, $v=0$



数値スキーム

□ モデル方程式

$$\frac{du}{dt} = f(u, v)$$

$$\frac{dv}{dt} = g(u, v)$$

$$f(u, v) = \frac{1}{\epsilon} \left[u(1 - u) - \frac{bv(u - c)}{u + c} \right]$$

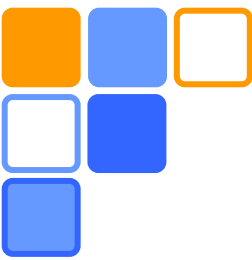
$$g(u, v) = u - v$$

□ オイラー差分法

$$(u_n, v_n) = (u(t_n), v(t_n)) \quad t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

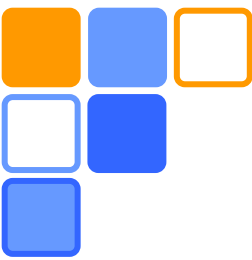
$$u_{n+1} = u_n + f(u_n, v_n)\Delta t$$

$$v_{n+1} = v_n + g(u_n, v_n)\Delta t$$



演習課題2

- オレゴネーター(2変数モデル)によるシミュレーションを行い、リミットサイクル振動するばあいについて $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフと軌道図を描く。初期値を変えて行い、同じリミットサイクルに近づくことを確かめる。
- リミットサイクル振動でない場合の $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフおよび軌道図を描く。用いたパラメータの値も記す。



参考文献

- W. O. Kermack and A. G. McKendrik, Proc. Royal Society A, Vol.115 (1927).
<https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0118>
- 牧野淳一郎, 科学 Vol.90 No.5 (岩波書店, 2020)
- 小田垣孝, 物性研究 Vol.8 No.2, 082101 (2020)
- 吉川研一「非線形科学—分子集合体のリズムとカタチ—」(学会出版センター, 1992)
- 太田隆夫「非平衡系の物理学」(裳華房, 2000)
- Shuichi Kinoshita, “Pattern Formations and Oscillatory Phenomena,” (Elsevier, 2013)