薬学情報処理演習　第4回

常微分方程式の簡単な解き方

奥薗　透

コロイド・高分子物性学

微分方程式とは？

- 例えば、化学反応 $\mathrm{A} \xrightarrow{k} \mathrm{P}$ が速度定数 k で進行するとき、A の濃度 [A] は、

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{d}t} = -k[A]$$

を満たすように変化する（t は時間）。この式は微分方程式の1つの例である。

- このように微分を含んだ関係式がいつでも成り立つとき、この関係式を微分方程式という。
  - 特に、微分する変数（上の例では t ）が1個のものを常微分方程式という。
  - 式に現れる微分の階数によって、1階の微分方程式、2階の微分方程式、・・・などという。

微分方程式によるモデル化

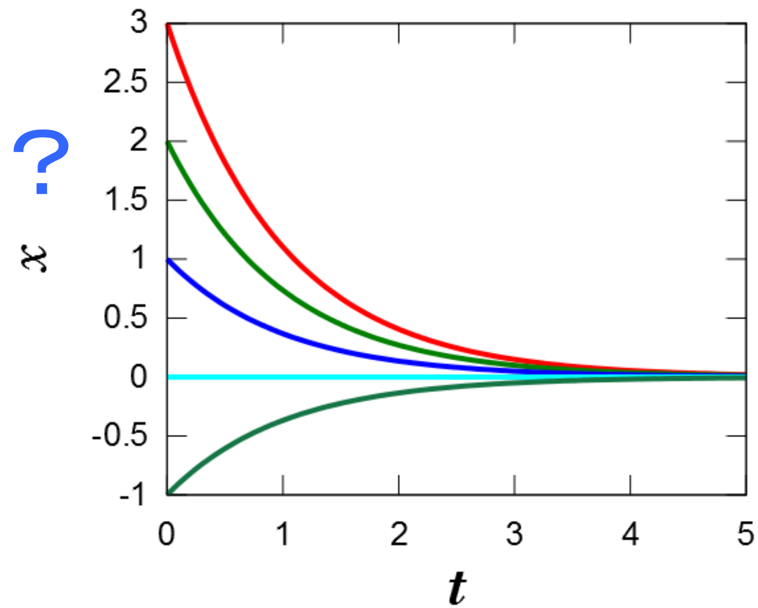
- 自然現象や工学の問題では、微分方程式によってモデル化できるものが多い。
  - 力学の問題
    - 惑星の運動、分子の運動など
  - 化学反応系
    - 濃度の時間変化など
  - 数理生物
    - 生物の個体数変化など
  - 薬学
    - 薬物速度論、DDSなど

ニュートンの運動方程式：
（質量×加速度＝力）

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = \boldsymbol{f}$$

- 「微分方程式を解く」ことにより、
  - 定量的な予測ができる。
  - パラメータによる挙動の変化がわかる（制御）。

「微分方程式を解く」とは？



- 例えば、微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -kx \quad （k \text{ は定数}）$$

を解くことは、この式を満たす t の関数 $x(t)$ を見つけること（$x(t)$ のグラフを描くこととほぼ同じ）である。

- $x = C\mathrm{e}^{-kt}$ は上の式を満たす。ただし、C は任意の定数。 ⇨ 解はたくさんある。

- $t = 0$ での x の値を決めると解は1つに決まる。
  - $t = 0$ で $x = x_0$ とすると $C = x_0$ なので、解は $x = x_0\mathrm{e}^{-kt}$ となる。

  このように初期の値を決めて解く問題を**初期値問題**という。

微分方程式を数値的に解くには

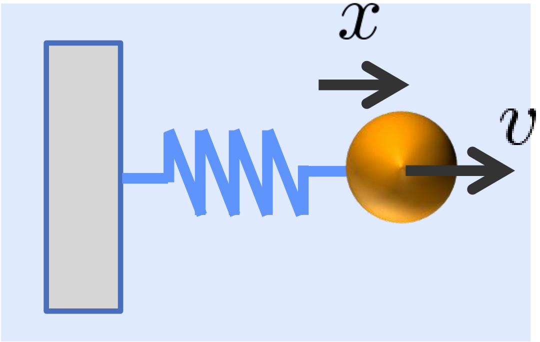
- 微分方程式: $$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = f(x)$$ （$f(x)$ は与えられた関数）
- 時刻をとびとびの値にとる:
$$t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \ldots, N)$$
- とびとびの時刻における解の近似値: x_n
- 微分を“差分”で置き換える:
$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \to \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t}$$
- 初期値 x_0 を与えて、x_n の値を次々に計算する
$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t$$ （オイラー差分法）

減衰振動の微分方程式

- 変位 x に比例した力と速度 $v = \frac{dx}{dt}$ に比例した摩擦力（抵抗力）を受けながら運動する物体の運動は以下のような微分方程式で記述される。

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -2K\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - x$$

（K は正の定数）



- この微分方程式の解析解は
  - $K < 1$ のとき
    $x = \mathrm{e}^{-Kt}(C_1 \cos\omega t + C_2 \sin\omega t)$ ただし $\omega = \sqrt{1-K^2}$
  - $K > 1$ のとき
    $x = \mathrm{e}^{-Kt}(C_1 \mathrm{e}^{\sqrt{K^2-1}\,t} + C_2 \mathrm{e}^{-\sqrt{K^2-1}\,t})$
  - $K = 1$ のとき $x = \mathrm{e}^{-t}(C_1 + C_2 t)$
  - 定数 C_1, C_2 は初期の x と v の値から決められる。

数値解法

- 2階の微分方程式を、変位 x と速度 v に関する1階の微分方程式に書きかえる。

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -2Kv - x$$

- 差分化してオイラー法で解く。

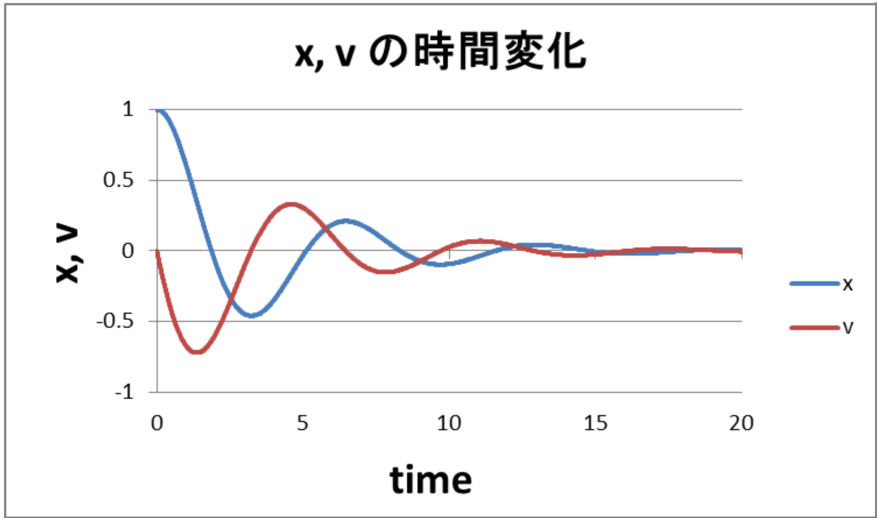
$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$$

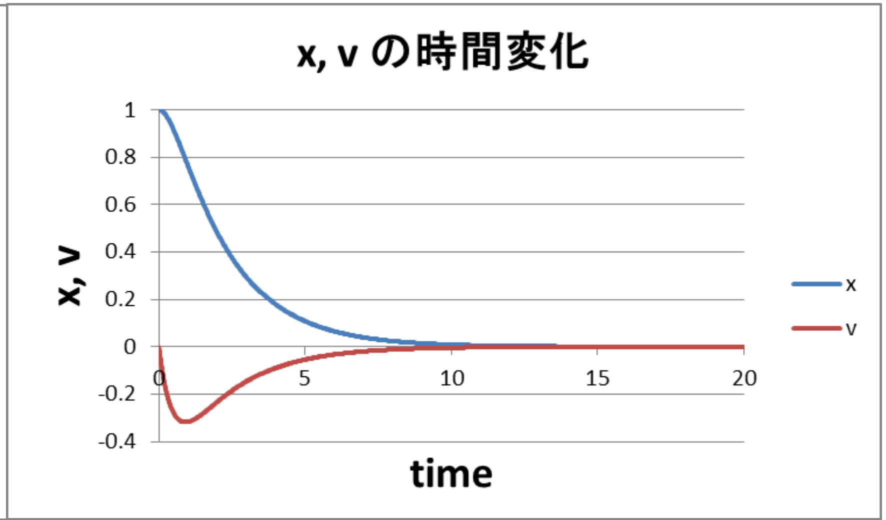
$$v_{n+1} = v_n - (2Kv_n + x_n)\Delta t$$

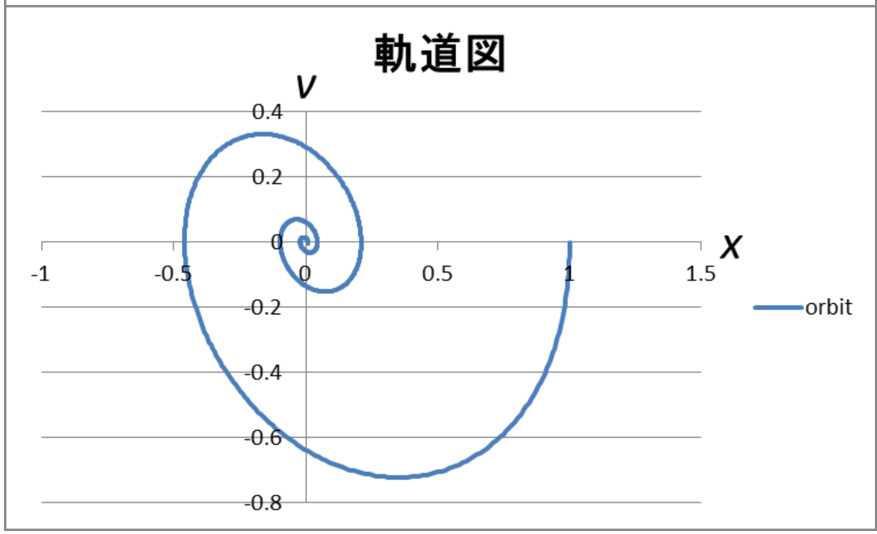
（$K = 0$ の場合にはオイラー法では解けないので別の数値解法を用いる必要がある）

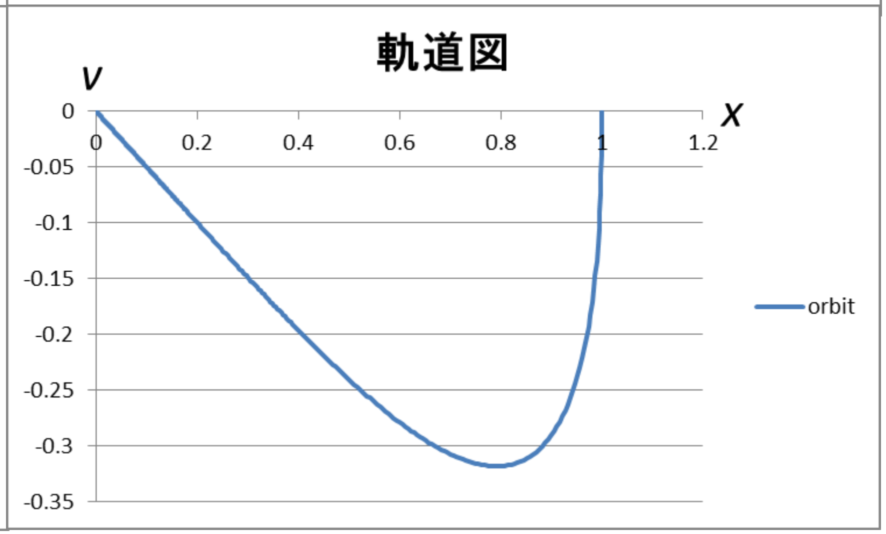
計算結果をグラフにする

減衰振動$(K = 0.25, \Delta t = 0.02)$　過減衰$(K = 1.25, \Delta t = 0.02)$









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:

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

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

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

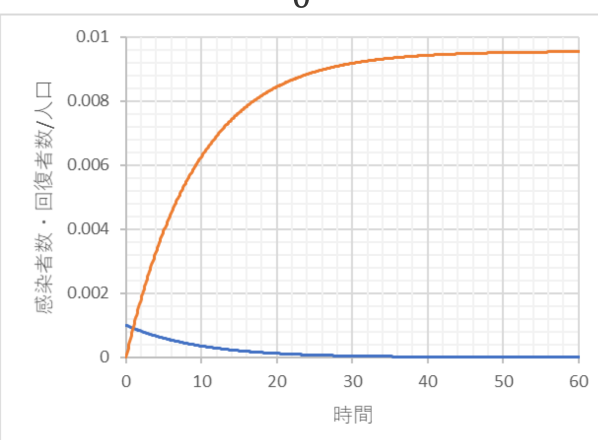
u, v の時間発展方程式の初期値問題を単純なオイラー差分法によって数値的に解く。時刻を $\tau_n = n\Delta\tau$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ とし、τ_nにおける(u, v)の近似値を(u_n, v_n)とすると、以下の式が得られる。

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

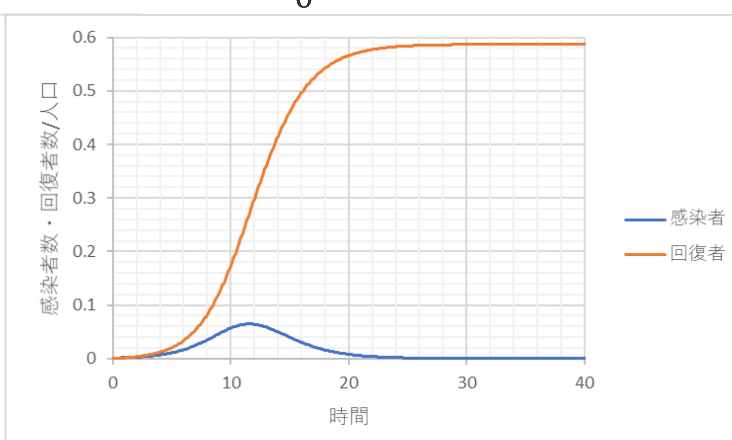
$$v_{n+1} = v_n + \Delta\tau u_n$$

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

- 減衰振動の微分方程式を数値的に解く。
  - 初期値（例えば $x(0) = 1, v(0) = 0$）を与えて解く。
  - いくつかのパラメータ K の値に対して計算し、K の値により系の挙動が変わることを確認する。
  - x, v の時間変化のグラフと軌道図を描く。軌道図とは横軸に x 縦軸に v をとった平面上で、点$(x(t), v(t))$が時間 t とともにどのように動くかを図示したものである。
- SIRモデルの微分方程式を数値的に解く。
  - いくつかのパラメータ R_0 の値に対して、u, v の時間変化のグラフと軌道図を描く。
  - 計算結果に基づいて、R_0 の値と感染者数、回復者数の関係について考察せよ。