

SIR モデルと数値計算の初歩

酒井高良

概要

本稿では，感染症ダイナミクスを記述した SIR モデルを題材に，数値計算の初歩について簡単な解説を行う。

目次

1	はじめに	2
2	連続時間系 SIR モデル	2
2.1	記号の定義	2
2.2	ダイナミクス (微分方程式)	2
2.3	変数間の関係	2
3	離散時間系 SIR モデル	3
3.1	記号の定義	3
3.2	ダイナミクス (差分方程式)	3
4	常微分方程式の初期値問題の数値解法	5
4.1	Euler 法	5
4.2	Heun 法	5
4.3	Runge-Kutta 法	5
5	数値計算例	6
5.1	実験条件	6
5.2	感染者数の軌跡の比較	6
5.3	ピーク時感染者数の比較	6

1 はじめに

本稿では、感染症ダイナミクスを記述した SIR モデルを題材に、数値計算の初歩について簡単な解説を行う。まず、連続時間系における SIR モデルの定式化および基本的な解析を示す。その後、数値計算法との比較のために、連続モデルと対応する離散時間系における SIR モデルおよびその解析解 (?) を示す。次に、SIR モデルが分類される常微分方程式の初期値問題に対する一般的な数値計算アルゴリズムをいくつか整理する。最後に、これら数値計算アルゴリズムと離散モデルの解析解の精度比較を行い、数値計算ならではの注意点等について簡単にまとめる。

2 連続時間系 SIR モデル

2.1 記号の定義

- $S(t)$: 時点 t における未感染者数
- $I(t)$: 時点 t における感染者数
- $R(t)$: 時点 t における感染済かつ回復者数 (免疫保持者数)
- $S(t) + I(t) + R(t) = 1$: 総人口 (死亡者数を含め保存されるものとする)
- β : 感染確率
- γ : 回復確率
- $R_0 = \beta / \gamma$: 基本再生産数

2.2 ダイナミクス (微分方程式)

連続時間系 SIR ダイナミクス

$$\begin{cases} \frac{dS(t)}{dt} = -\beta S(t)I(t) \\ \frac{dI(t)}{dt} = (\beta S(t) - \gamma)I(t) \\ \frac{dR(t)}{dt} = \gamma I(t) \end{cases} \quad (1)$$

単位時間を平均回復期間 $\tau = 1/\gamma$ をとした無限次元 SIR モデルについては稲葉 [1] を参照のこと。

2.3 変数間の関係

稲葉 [1] の論文に基づき、 $S(t)$ と $I(t)$ の関係を整理する。ここでシステムの規模 $S(t) + I(t) + R(t) = 1$ は常に満足されるので、 $S(t)$ と $I(t)$ の関係さえわかれば、それらと $R(t)$ の関係性も自ずと導出することができる。まず、 $S(t)$ と $I(t)$ のダイナミクスを表す微分方程式 (1) から、次の関係式を導出する。

$$\frac{dI(t)}{dt} \left(\frac{dS(t)}{dt} \right)^{-1} = \frac{(\beta S(t) - \gamma)I(t)}{-\beta S(t)I(t)} \quad (2)$$

$$= -1 + \frac{\gamma}{\beta} \cdot \frac{1}{S(t)} \quad (3)$$

これは変数分離形の微分方程式であるので、次に示す積分アプローチによって、 $I(t)$ について解くことができる：

$$dI = \left(-1 + \frac{\gamma}{\beta} \cdot \frac{1}{S}\right) dS \quad (4)$$

$$\Rightarrow \int_0^t dI = \int_0^t \left(-1 + \frac{\gamma}{\beta} \cdot \frac{1}{S}\right) dS \quad (5)$$

$$\Rightarrow I(t) - I(0) = -S(t) + S(0) + \frac{\gamma}{\beta} (\log S(t) - \log S(0)) \quad (6)$$

$$\Leftrightarrow I(t) = I(0) + S(0) - S(t) + \frac{\gamma}{\beta} \log \frac{S(t)}{S(0)} \quad (7)$$

ここで、ピーク時感染者数 $I(t^*)$ を導出する．ピーク時 t^* において $I(t^*)$ の勾配は 0 となるため、

$$\frac{dI(t^*)}{dt} = (\beta S(t^*) - \gamma) I(t^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad S(t^*) = \frac{\gamma}{\beta} \quad (8)$$

を得る．これをさきほどの関係式 (7) に代入すると次に示すピーク時感染者数を得る：

$$I(t^*) = 1 - \frac{\gamma}{\beta} \left\{ 1 - \log \frac{\gamma}{\beta S(0)} \right\} \quad (9)$$

ここで $S(0) + I(0) = 1$ としている．

3 離散時間系 SIR モデル

本章では、ここまでで扱ってきた連続時間系 SIR モデルに対応する離散時間系 SIR モデルを示す．ただし、ここで注意すべき点として、このような離散時間モデルは連続時間モデルの「離散化操作」によってもたらされるものではない (瀬野 [2]) ことを断っておく．言い換えると、これまで扱った連続モデルは、後述する離散モデルの時間連続近似として、時間ステップ長 0 の極限操作によって導出される．本稿では、瀬野 [2] に倣い、まず適当な仮定のもとで離散モデルを定式化したのち、その微小時間の極限をとることで連続モデルを導出し、両者の対応関係を示す．

3.1 記号の定義

- $S(t)$: 時点 t における未感染者数
- $I(t)$: 時点 t における感染者数
- $R(t)$: 時点 t における感染済かつ回復者数 (免疫保持者数)
- $S(t) + I(t) + R(t) = 1$: 総人口 (死亡者数を含め保存されるものとする)
- $\hat{\beta}$: 未感染者が感染者と 1 回の接触で感染する確率
- $\hat{\gamma}$: 感染者が 1 日の内に回復し感染力を失う確率

3.2 ダイナミクス (差分方程式)

差分方程式を用いて感染ダイナミクスを表現する．時点 t において、未感染者 1 人がのべ j 人と接触したときに、感染から免れる確率は以下で与えられる：

$$\left(1 - \frac{\hat{\beta} I(t)}{1}\right)^j \quad (10)$$

ここで、ある 1 人が 1 日にのべ j 人と接触する確率を $P(j)$ と定義すると、時点 t から時点 $t+1$ の間に増加する感染者数の期待値は次のように書ける：

$$S(t+1) - S(t) = S(t) \times \sum_{j=0}^{\infty} \left[1 - \left(1 - \frac{\hat{\beta}I(t)}{1} \right)^j \right] P(j) \quad (11)$$

この感染者数の増分期待値および回復率 $\hat{\gamma}$ を用いて、SIR ダイナミクスは次の差分方程式で表される：

$$\begin{cases} S(t+1) &= S(t) - S(t) \sum_{j=0}^{\infty} \left[1 - \left(1 - \hat{\beta}I(t) \right)^j \right] P(j) \\ I(t+1) &= I(t) + S(t) \sum_{j=0}^{\infty} \left[1 - \left(1 - \hat{\beta}I(t) \right)^j \right] P(j) - \hat{\gamma}I(t) \\ R(t+1) &= R(t) + \hat{\gamma}I(t) \end{cases} \quad (12)$$

ここで、ある一人が 1 日に接触する人数の分布 $P(j)$ が期待値 λ のポアソン分布に従う状況を考える：

$$P(j) \equiv \frac{\lambda^j e^{-\lambda}}{j!} \quad (13)$$

このとき、SIR ダイナミクスは次の差分方程式で表される：

離散時間系 SIR ダイナミクス

$$\begin{cases} S(t+1) &= S(t) - S(t)(1 - e^{-\hat{\beta}\lambda I(t)}) = S(t)e^{-\hat{\beta}\lambda I(t)} \\ I(t+1) &= I(t) + S(t)(1 - e^{-\hat{\beta}\lambda I(t)}) - \hat{\gamma}I(t) \\ R(t+1) &= R(t) + \hat{\gamma}I(t) \end{cases} \quad (14)$$

時間ステップ長を $\Delta t > 0$ とすると、先の差分方程式に基づき、連続時間における一般化差分方程式系を導出できる：

$$\begin{cases} S(t+\Delta t) &= S(t) - S(t)(1 - e^{-\hat{\beta}\lambda\Delta t I(t)}) = S(t)e^{-\hat{\beta}\lambda\Delta t I(t)} \\ I(t+\Delta t) &= I(t) + S(t)(1 - e^{-\hat{\beta}\lambda\Delta t I(t)}) - \hat{\gamma}\Delta t I(t) \\ R(t+\Delta t) &= R(t) + \hat{\gamma}\Delta t I(t) \end{cases} \quad (15)$$

時間ステップ長 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとると、以下の微分方程式系が導出される：

$$\begin{cases} \frac{dS(t)}{dt} &= -\lambda\hat{\beta}S(t)I(t) \\ \frac{dI(t)}{dt} &= \lambda\hat{\beta}S(t)I(t) - \hat{\gamma}I(t) \\ \frac{dR(t)}{dt} &= \hat{\gamma}I(t) \end{cases} \quad (16)$$

この微分方程式系は、 $\beta = \lambda\hat{\beta}$ としたときの連続時間系における SIR モデルに数学的に同等である。

4 常微分方程式の初期値問題の数値解法

SIR モデルは、数学的に常微分方程式の初期値問題というクラスに分類され、その一般的な表現は次のようになる：

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (17)$$

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (18)$$

つまり、ベクトル関数 \mathbf{f} 、初期値 \mathbf{x}_0 が与えられたときに、関数 $\mathbf{x}(t)$ を求める問題となる。このような常微分方程式の初期値問題に関しては、解の存在や一意性などの基本的なことは十分に分かっていると言って良い^{*1}。しかしながら、その解析解については、特殊な \mathbf{f} の形状においてのみ求解可能であることが知られている。

本章では、SIR モデルへの適用を踏まえて、一般的な常微分方程式の数値解法を菊池・齊藤 [3] をもとに整理する。途中数学的議論や、厳密なアルゴリズムの適用可能性を省略している箇所がある。これらについては、菊池・齊藤 [3]7 章を参照されたい。また、SIR モデルに限らない演習問題付きの解説は桂田 [3] がおすすめである。

常微分方程式の初期値問題に対する代表的数値計算アルゴリズムである Euler 法、Heun 法、Runge-Kutta 法の基本形は次のように表される：

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (19)$$

$$\mathbf{x}(t+1) = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{F}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (20)$$

ここで h は微小時間刻み幅である。 $\mathbf{F}(\cdot)$ の選び方により、各種解法が得られる。

4.1 Euler 法

Euler(オイラー) 法は最も基本的な方法で、 \mathbf{F} を次のように \mathbf{f} 自身に選ぶ。つまり、局所的な線形近似によって、次の時点 $t+1$ の解を定める：

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (21)$$

4.2 Heun 法

Heun(ホイン) 法は次のように、Euler 法で予測された時点における $\mathbf{f}(\cdot)$ の情報を含むように、 \mathbf{F} を定める：

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (22)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t+h, \mathbf{x} + h\mathbf{k}_1) \quad (23)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \quad (24)$$

4.3 Runge-Kutta 法

Runge-Kutta(ルンゲクッタ) 法は、そこそこの効率を持つ方法であるため、常微分方程式の初期値問題の「定番の数値解法」としての地位を得ている。「まずは Runge-Kutta 法でやってみて、それでダメなら考える」というスタンスでもよ

^{*1} 桂田 [3]

いらしい [3]. Runge-Kutta(ルンゲクッタ) 法における \mathbf{F} を次のように 4 点の情報を用いて定められる :

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (25)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(t + \frac{h}{2}, \mathbf{x} + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right) \quad (26)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}\left(t + \frac{h}{2}, \mathbf{x} + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right) \quad (27)$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(t + h, \mathbf{x} + h\mathbf{k}_3) \quad (28)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), t) = \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \quad (29)$$

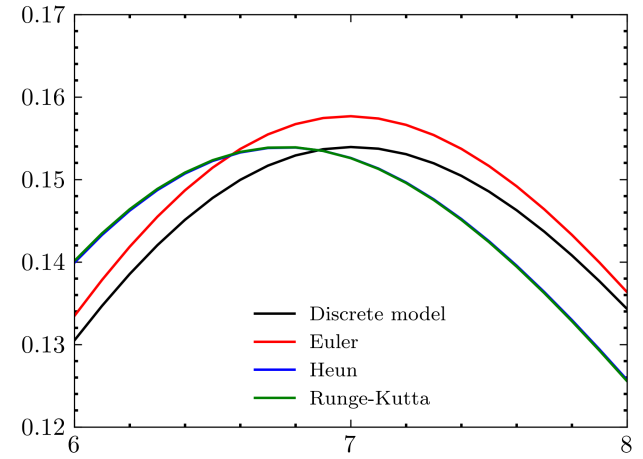
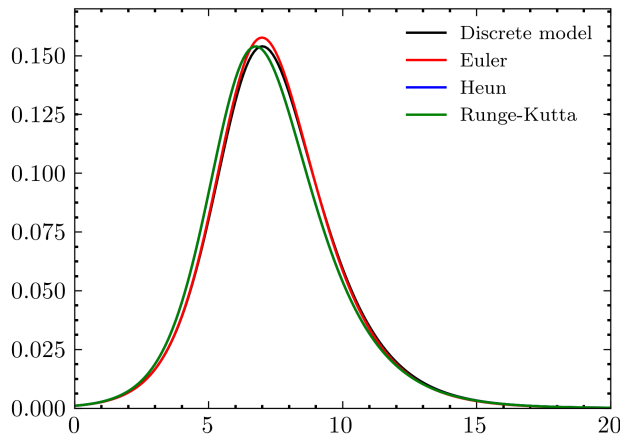
5 数値計算例

5.1 実験条件

- 基本再生産数 : $R_0 = 2.0$
- 回復率, 感染率 $\gamma = 1.0, \beta = 0.5$
- 時間刻み幅 : $h = 0.1$
- 初期感染者数 : $I(0) = 0.001$

本実験では, 各アルゴリズムの精度差をよりわかりやすくするため, あえて時間刻み幅を大きめに設定している.

5.2 感染者数の軌跡の比較



5.3 ピーク時感染者数の比較

各アルゴリズムにおけるピーク時感染者数を示し, 精度の比較をする :

Method	Peak $I(t)$
Analytical (Continue)	<u>0.15392665989</u>
Analytical (Discrete)	<u>0.15392567307</u>
Euler	<u>0.15765906536</u>
Heun	<u>0.15386352398</u>
Runge-Kutta	<u>0.15388340455</u>