Lektion 10
Reaktionshastigheder
Epidemimodeller

- Simpel epidemimodel

- Kermack-McKendric epidemimodel

- Kemiske reaktionshasigheder

Simpel epidemimodel

I en population af N individer er $I(t)$ inficerede og resten $S(t) = N - I(t)$ er modtagelige for infektion.

Går vi ud fra at væksten i antallet af inficerede individer er proportional med antallet af mulige møder $IS = I(N - I)$ mellem et inficeret og et modtageligt individ, så er

$$\frac{dI}{dt} = \alpha I(N - I)$$

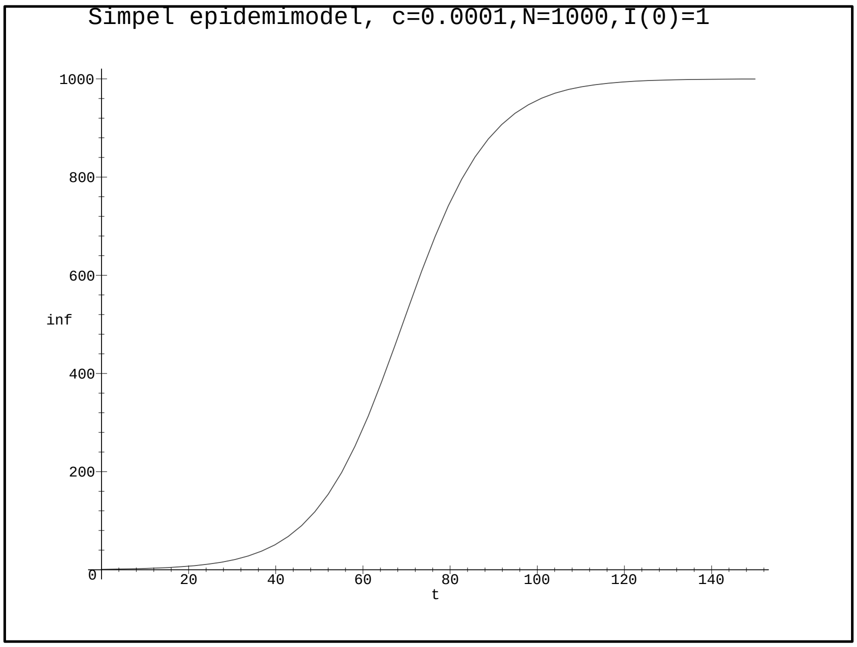
Men dette er lige netop ligningen for logistisk vækst, så vi ved allerede at

$$I = \frac{NI_0}{I_0 + (N - I_0)e^{-N\alpha t}} = \frac{N}{1 + (N/I_0 - 1)e^{-N\alpha t}}$$

hvor I_0 er antallet af inficerede individer til tiden $t = 0$.

$$\boxed{S} \xrightarrow{\alpha SI} \boxed{I}$$

Eksempel 1 *Med* $N = 1000 = 10^3$, $\alpha = 0{,}0001 = 10^{-4}$ *og* $I(0) = 1$ *vil epidemien iflg. den simple model følge en logistisk kurve:*



$$I(t) = \frac{1000}{1 + 999e^{-t/10}}$$

Dette eksempel kan også ses i et Maple worksheet på nettet.

Opgave: En biologistuderende har 100 mus i et bur på kollegiet. Til tiden $t = 0$ får 1 af musene desværre en smitsom sygdom. (De andre mus er raske, men modtagelige for smitte.) Til tiden $t = 1$ er 10 af musene smittede. Hvis der er tale om en simpel epidemimodel, hvor mange af musene er da smittede til tiden $t = 2$? (Eksamen, januar 1998, opg 3)

Løsning: I denne simple epidemimodel er $N = 100$ og $I(0) = 1$ så

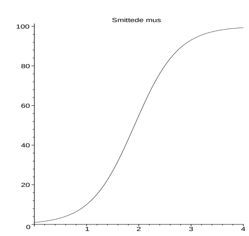
$$I(t) = \frac{100}{1 + 99e^{-100\alpha t}}$$

Vi bestemmer konstanten α (eller rettere $e^{-100\alpha}$) ud fra oplysningen

$$10 = I(1) = \frac{100}{1 + 99e^{-100\alpha}}$$

som giver $e^{-100\alpha} = \frac{1}{11}$. Det indsætter vi i formlen og får

$$I(t) = \frac{100}{1 + \frac{99}{11^t}}$$



som med $t = 2$ giver $I(2) = 55$.

Eksempel 2 *En population af N raske individer får besøg af 1 inficeret individ. Hvordan går det med antallet $I(t)$ af inficerede individer i den oprindelige population?*
Løsning: *Antallet, $1+I$, af inficerede individer ud af populationen på $N+1$ individer er givet ved*

$$1 + I(t) = \frac{(N+1)\cdot 1}{1 + (N+1-1)e^{-(N+1)\alpha t}}$$

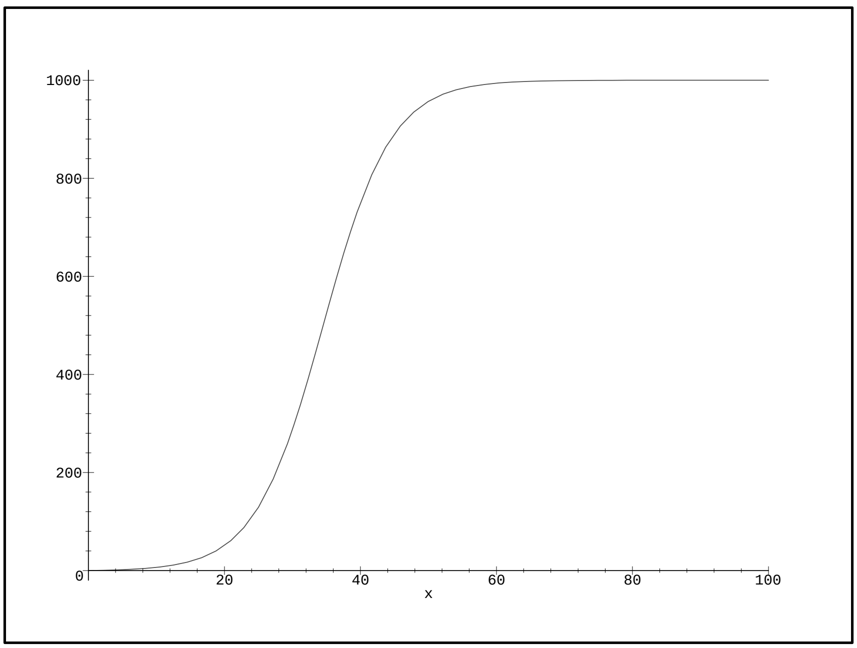
og derfor er

$$\begin{aligned} I &= \frac{(N+1)\cdot 1}{1 + Ne^{-(N+1)\alpha t}} - 1 \\ &= \frac{N+1-1-Ne^{-(N+1)\alpha t}}{1 + Ne^{-(N+1)\alpha t}} \\ &= N\frac{1 - e^{-(N+1)\alpha t}}{1 + Ne^{-(N+1)\alpha t}} = N\frac{e^{(N+1)\alpha t} - 1}{e^{(N+1)\alpha t} + N} \end{aligned}$$

Med $N = 1000$ og $\alpha = 0,0002$ får vi f.eks.

$$I = 1000\frac{e^{1001\cdot 0{,}0002t} - 1}{e^{1001\cdot 0{,}0002t} + 1000}$$

der har grafen:



Epidemimodel med karantæne

I en population med $N = S + I + R$ individer er S (susceptible) individer modtagelige for smitte, I (infected) er inficerede og kan sprede smitten, og R (removed) er i karantæne eller immune, de er inaktive mht smitte. Vi antager at

$$\frac{dS}{dt} = -\alpha SI, \quad \frac{dI}{dt} = \alpha SI - \beta I, \quad \frac{dR}{dt} = \beta I$$

hvor α og β er konstanter.

Den sidste ligning betyder, at væksten i antallet af individer i karantæne er proportional med antallet af fritgående smittede individer.

Den anden ligning udtrykker, at væksten i antallet af smittespredere bliver formindsket med de individer, der sendes i karantæne.

$$\boxed{S} \xrightarrow{\alpha SI} \boxed{I} \xrightarrow{\beta I} \boxed{R}$$

Opfatter vi $S(t) = R(S(t))$ som en funktion af R, så siger kædereglen at

$$\frac{dS}{dR} = \frac{\frac{dS}{dt}}{\frac{dR}{dt}} = \frac{-\alpha SI}{\beta I} = -\frac{\alpha}{\beta}S$$

og derfor afhænger

$$S = S_0 \exp(-\frac{\alpha}{\beta}R)$$

exponentielt af R. Indsat i den sidste ligning giver det

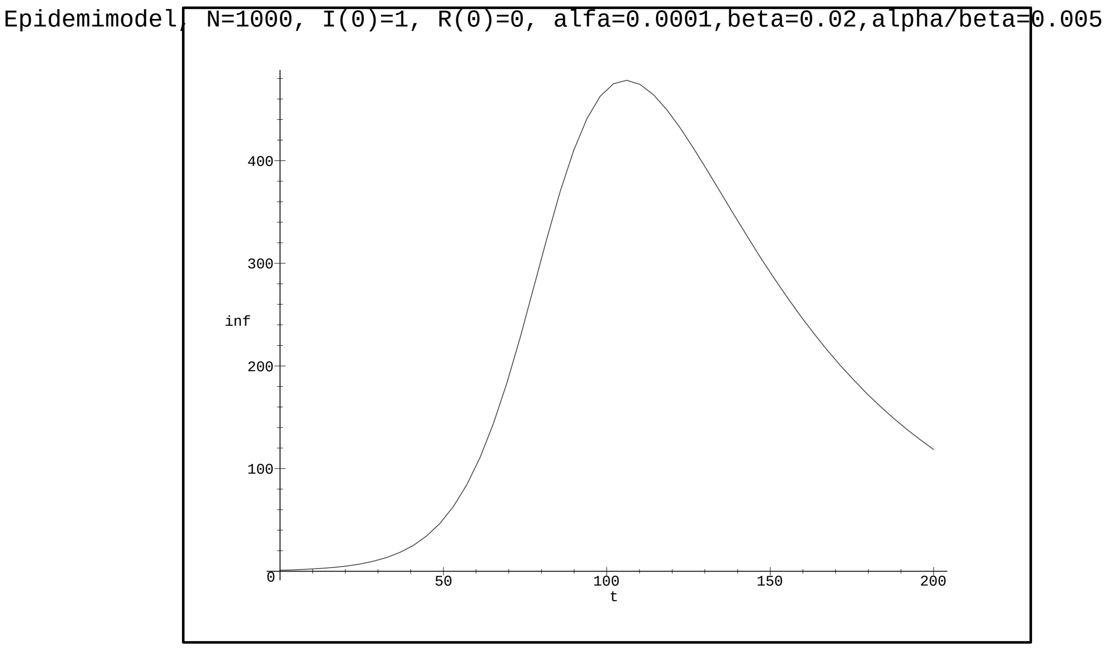
$$\begin{aligned}\frac{dR}{dt} = \beta I = \beta(N - R - S) \\ = \beta\left(N - R - S_0 \exp(-\frac{\alpha}{\beta}R)\right)\end{aligned}$$

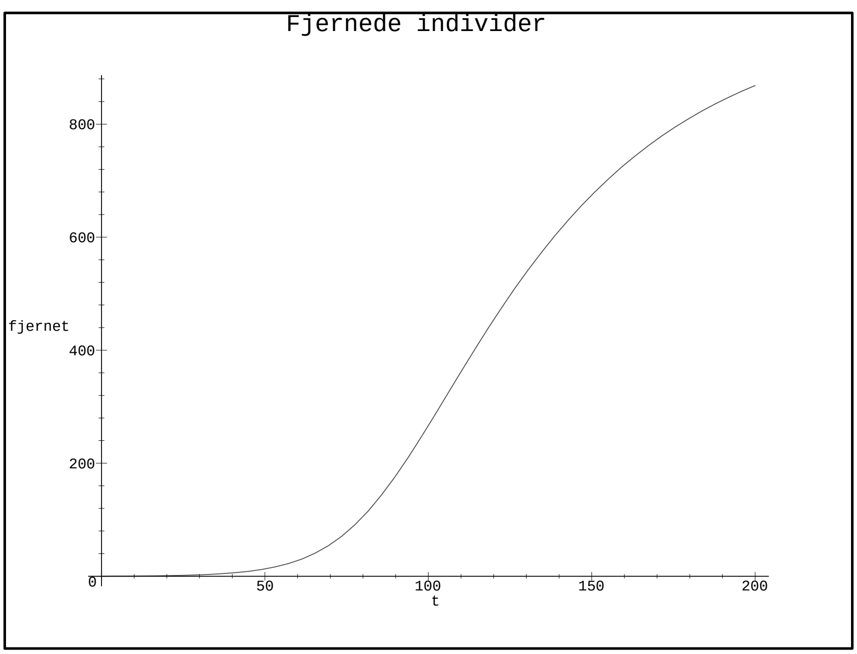
Denne ligning bestemmer (i princippet) R og dermed

$$I = N - R - S = N - R - S_0 \exp(-\frac{\alpha}{\beta}R)$$

i denne (Kermack-McKendrick, ca. 1930) model.

Eksempel 3 *Numerisk gennemregnet eksempel på epidemimodel med karantæne.*





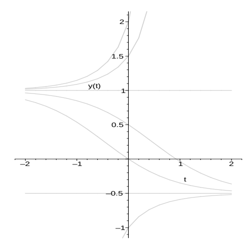
Reaktionshastigheder

Den generelle løsning til den separable differentialligning

$$y' = c(y - A)(y - B), \ A \neq B, c \neq 0, \quad (1)$$

er de konstante funktioner $y = A$, $y = B$ samt

$$\boxed{y = A + \frac{B - A}{1 + Ce^{(B-A)ct}}}$$



Disse løsninger finder vi nemlig ud fra ligningen

$$\int c \, \mathrm{dt} = \frac{1}{B - A} \int \left(\frac{1}{y - B} - \frac{1}{y - A} \right) \mathrm{dy}$$

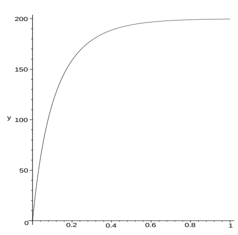
Vælger vi $C = -\frac{B}{A}$ får vi den partikulære løsning

$$y(t) = A \frac{e^{(B-A)ct} - 1}{e^{(B-A)ct} - A/B}$$

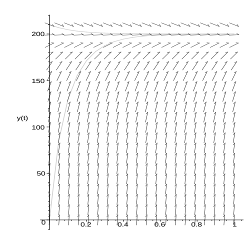
med $y(0) = 0$. Den bruges i kemi til at beregne reaktionshastigheder for den kemiske reaktion $P + Q \to Y$.

Hvis $y(t)$ står for antallet af enheder af stoffet Y til tiden t, så lever de relevante løsninger i området $y(t) < A, B$.

Eksempel 4 *Antag at der er $A = 200$ enheder af stoffet A og $B = 500$ enheder af stoffet B. Konstanten c, som måler reaktionsvilligheden, er eksperimentelt bestemt til $c = 0,02$. Antallet af Y-molekyler til tiden t er da*



$$y(t) = 200\frac{e^{6t} - 1}{e^{6t} - 2/5}$$



Opgaver til Lektion 10

1. I en population på 1000 individer er 5 smittede til tiden $t = 0$. Til tiden $t = 10$ er 100 smittede. Hvornår vil der, iflg. den simple epidemimodel, være 900 smittede?
2. Vis at i Kermack-McKendrick modellen er flg. betingelser ækvivalente:
   1. $\frac{dI}{dt} < 0$
   2. $S < \frac{\beta}{\alpha}$
   3. $R > \frac{\beta}{\alpha} \ln\left(\frac{\alpha}{\beta} S_0\right)$

   Gør rede for at hvis $N = 1000$, $I(0) = 1$, $R(0) = 0$, $\alpha = 0{,}0001$, $\beta = 0{,}02$, så vil epidemien toppe, når der er $S = 200$ der er modtagelige for smitten. Hvad er R og I til det tidspunkt?
3. Løs differentialligningen $\frac{dy}{dt} = (2 - y)(3 - y)$.
4. Lad $y(t)$ være antallet af enheder til tiden t af stoffet Y under reaktionen $P + Q \to Y$. Til tiden $t = 0$ er der $A = 200$ enheder af P og $B = 500$ enheder af Q. Find en differentialligning for $y(t)$. Til tiden $t = 1$ er der 100 enheder af stoffet Y. Bestem $y(t)$. Hvor mange enheder af Y vil der være til tiden $t = 2$.
5. Find en differentialligning som beskriver antallet, $y(t)$, af molekyler til tiden t af stoffet Y under reaktionen $P + 2Q \to Y$.
6. I differentialligningen (1) antager vi at $A \neq B$. Hvad sker der hvis $A = B$?