数値シミュレーション実験

第２回レポート

提出日　2025年６月10日

提出者　今村　優斗

学籍番号　2713240012-7

課題1

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000ステップに分割して，以下の式で決まるGLU 濃度の時間微分を使い，オイラー法でGLU 濃度およびG6P 濃度の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，GLU 濃度の初期値は1.0[mmol/L]，G6P濃度の初期値は0 とし， = 1.0 [/min] とせよ．

解答：

図1にプログラム、図２に結果のグラフを示した。プログラムは、前回の課題と同様にオイラー法を利用し計算するため、微分する関数fを作り、for文にて計算した。図２より、紫色の線がGLU濃度を、G6P濃度を青色の線で表した。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double g){

    double k=1.0;

    return k\*g;

}

int main(void){

    double glu[N+1];

    double dgludt[N+1];

    double g6p[N+1];

    double dt=1/600.0;

    glu[0]=1.0;

    g6p[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,glu[0],g6p[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dgludt[i]=f(glu[i]);

        glu[i+1]=glu[i]-dgludt[i]\*dt;

        g6p[i+1]=g6p[i]+dgludt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),glu[i+1],g6p[i+1]);

    }

    return 0;

}

図１　課題１のプログラム

ダイアグラム

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図２　課題１の結果のグラフ

課題2

上記の物質A とB から物質C が生成される反応に対して，3つの物質の増減をあらわす微分方程式を示せ．

解答：

C の増加速度は、物質A の濃度と物質B濃度の積に速度定数をかけた値となる。それぞれの濃度は以下の式で表すことができる。また、A,Bの濃度は濃度Cが増加した分減少するため濃度Cの符号を変えたもので表すことができる。

課題３

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000 ステップに分割して，オイラー法で物質A, B およびC の濃度の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，物質A, B の濃度の初期値は1.0[mmol/L]，物質C の濃度の初期値は0 とし， = 1.0[L/mmol/min] とせよ．

解答：

図３に課題２のプログラム、図４に課題２の結果のグラフを示した。微分関数fの中身を課題２で考えた微分方程式を利用した。また、for文の中身を濃度C増加した分、A,Bを減らすようにした。図４より、紫色の線が濃度C,緑色の線がA,青色の線が濃度Bを示した。AとBの線が重なっているため、グラフには２本の線しか見えない。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double a,double b){

    double k=1.0;

    return a\*b\*k;

}

int main(void){

    double c[N+1];

    double a[N+1];

    double b[N+1];

    double dcdt[N+1];

    double dt=1/600.0;

    a[0]=1.0;

    b[0]=1.0;

    c[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf %lf\n",dt\*0,c[0],a[0],b[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dcdt[i]=f(a[i],b[i]);

        c[i+1]=c[i]+dcdt[i]\*dt;

        a[i+1]=a[i]-dcdt[i]\*dt;

        b[i+1]=b[i]-dcdt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),c[i+1],a[i+1],b[i+1]);

    }

    return 0;

}

図３　課題２のプログラム

グラフ, 折れ線グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図４　課題２の結果のグラフ

課題4

上記の物質A とB から物質C が生成される可逆反応に対して，3つの物質の増減をあらわす微分方程式を示せ．

解答：

物質Cの増加量は物質Aの濃度と物質Bの濃度の積に速度定数を乗じた値に逆反応による速度、物質Cの濃度に速度定数を乗じた値を引いたものになる。また、物質A,Bは物質Cが増加した分減少するため、３つの物質の増加、減少速度は以下の式で表すことができる。

課題5

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000 ステップに分割して，オイラー法で物質A, B およびC の濃度の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，物質A, B の濃度の初期値は1.0[mmol/L]，物質C の濃度の初期値は0 とし、= 1.0[L/mmol/min], = 0.1 [/min] とせよ．

解答：

図5に課題5のプログラムを、図6に課題5の結果のグラフを示した。

図5より微分を表す関数fの中身を課題４で考えた微分方程式を利用した。図６より、紫色の線が濃度C,緑色の線がA,青色の線が濃度Bを示した。AとBの線が重なっているため、グラフには２本の線しか見えない。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double a,double b,double c){

    double kab=1.0;

    double kc=0.1;

    return a\*b\*kab-(c\*kc);

}

int main(void){

    double c[N+1];

    double a[N+1];

    double b[N+1];

    double dcdt[N+1];

    double dt=1/600.0;

    a[0]=1.0;

    b[0]=1.0;

    c[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf %lf\n",dt\*0,c[0],a[0],b[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dcdt[i]=f(a[i],b[i],c[i]);

        c[i+1]=c[i]+dcdt[i]\*dt;

        a[i+1]=a[i]-dcdt[i]\*dt;

        b[i+1]=b[i]-dcdt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),c[i+1],a[i+1],b[i+1]);

    }

    return 0;

}

図5　課題５のプログラム

グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図６　課題５の結果のグラフ

課題6

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000 ステップに分割して，以下の式で決まる反応速度を使い，オイラー法で基質濃度[S] および反応生成物の濃度[P] の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，基質S の初期濃度は1.0[mmol/L]，反応生成物P の初期濃度は0 とし，Km = 0.75 [mmol/L] , Vmax = 0.02 [mmol/L/sec] とせよ．

解答：

図７に課題６のプログラムを、図８に課題６の結果のグラフを示した。図７より、上記の式関数fの計算で実装した。図８より、紫色の線が濃度P、緑色の線が濃度Sを表す。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double s){

    double km=0.75;

    double vmax=0.02\*60;

    return (vmax\*s/(km+s));

}

int main(void){

    double s[N+1];

    double p[N+1];

    double dpdt[N+1];

    double dt=1/600.0;

    s[0]=1.0;

    p[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,p[0],s[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dpdt[i]=f(s[i]);

        p[i+1]=p[i]+dpdt[i]\*dt;

        s[i+1]=s[i]-dpdt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),p[i+1],s[i+1]);

    }

    return 0;

}

図7　課題６のプログラム

ダイアグラム

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図8　課題６の結果のグラフ

課題7

課題6 の結果のグラフは，なぜそのような形になるのか，以下の式を使って説明せよ．

課題8

以下の式で決まる速度で反応が起こる場合、反応速度のグラフはどのような形になるか，図4 のグラフと比較ができるグラフを示せ．Km とVmax の値は0.5 と1.0 とし，n は3 とせよ．

解答：

図9にプログラム、図10にグラフを示した。図9より、上記の式を微分を表す関数fにて計算しオイラー法のプログラムを組んだ。図10より、得られた結果をgnuplotにてx軸を対数グラフにして示した。レジュメに書かれている図4と比較してより急激に速度が早くなることがわかった。また、図4では時間が0.1付近で急な上昇が見られるが、得られた結果では0.3付近で急な上昇がみられる。

#include <stdio.h>

#define N 1000

double f(double s){

    double km=0.5;

    double kmn=km\*km\*km;

    double vmax=1.0;

    double sn;

    sn=s\*s\*s;

    return (vmax\*sn/(kmn+sn));

}

int main(void){

    double s[N+1];

    double v[N+1];

    double dt=1/100.0;

    printf("%lf %lf\n",s[0],v[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        s[i+1]=s[i]+dt;

        v[i+1]=f(s[i+1]);

        printf("%lf %lf\n",s[i+1],v[i+1]);

    }

    return 0;

}

図9　課題8のプログラム

グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図10　課題6の結果のグラフ

課題9

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000 ステップに分割して，以下の式で決まる反応速度を使い，オイラー法で基質濃度[S] および反応生成物の濃度[P] の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，基質S の初期濃度は1.0[mmol/L]，反応生成物P の初期濃度は0 とし，Km = 0.75 [mmol/L] , Vmax = 0.02 [mmol/L/sec], n = 3 とせよ．

解答：

図11に課題9のプログラムを、図12に結果のグラフを示した。図11より微分を行う関数の中身の計算について上記の式を利用し、オイラー法のプログラムを使用した。図12は紫色が濃度P、緑色が濃度Sを示している。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double s){

    double km=0.75;

    double vmax=0.02\*60;

    double sn;

    double kmn=km\*km\*km;

    sn=s\*s\*s;

    return (vmax\*sn/(kmn+sn));

}

int main(void){

    double s[N+1];

    double p[N+1];

    double dpdt[N+1];

    double dt=1/600.0;

    s[0]=1.0;

    p[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,p[0],s[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dpdt[i]=f(s[i]);

        p[i+1]=p[i]+dpdt[i]\*dt;

        s[i+1]=s[i]-dpdt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),p[i+1],s[i+1]);

    }

    return 0;

}

図11　課題9のプログラム

グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図12　課題９の結果のグラフ

課題10

課題9 の結果のグラフは，課題6 のグラフとどのように異なるか説明し，なぜそのような違いが起こったのかを式を比較することで説明せよ．

解答

図13に課題6と課題9の結果のグラフを示した。図13は、細い紫色の線が課題6の濃度S、細い緑色の線が課題6の濃度P、太い青色の線が課題9の濃度S、太いオレンジ色の線が濃度Pを示している。両者のグラフを比較してみると、初めの1分までは課題9のほうが少し多い濃度が変化しているが、それ以降では課題6の濃度の変化量のほうが多い。また、課題6は5分間でほぼ全て反応したのに対し、課題9では一部しか反応しなかった。この理由として、両者の式を比較すると課題9は分母、分子の濃度Sの項がn乗されているため、反応の初期段階では課題6より課題9のほうが反応速度が速く、中盤から終盤の反応ではより緩やかな反応になると考えられる。

グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図13　課題6と9を表すグラフ

課題11

時刻0[min] から5[min](=300[sec]) までを3000 ステップに分割して，以下の式で決まる反応速度を使い，オイラー法で基質濃度[S1], [S2] および反応生成物の濃度[P] の時間変化を計算するプログラムを作り，結果を横軸が[min] のグラフで表示せよ．ただし，基質S1, S2 の初期濃度は1.0[mmol/L]および1.0[mmol/L]，反応生成物P の初期濃度は0 とし，KmS1 = 0.75 [mmol/L] , KmS2 = 0.25[mmol/L], Vmax = 0.05 [mmol/L/sec] とせよ．

解答：

図14に課題11のプログラムを、図15に課題11の結果のグラフを示した。図14より、微分を行う関数を上記の式により計算してオイラー方のプログラムを組んだ。図15は紫色の線が濃度P,緑色の線がS1,青色の線が濃度S2を示している。S1とS2の線が重なっているため、グラフには２本の線しか見えない。

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double s1,double s2){

    double kms1=0.75;

    double kms2=0.25;

    double vmax=0.02\*60;

    double k1=(vmax\*s1\*s2)/(kms1\*kms2);

    double k2=1.0+(s1/kms1)+(s2/kms2)+((s1\*s2)/(kms1\*kms2));

    return k1/k2;

}

int main(void){

    double s1[N+1];

    double s2[N+2];

    double p[N+1];

    double dpdt[N+1];

    double dt=1/600.0;

    s1[0]=1.0;

    s2[0]=1.0;

    p[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf %lfn",dt\*0,p[0],s1[0],s2[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dpdt[i]=f(s1[i],s2[i]);

        p[i+1]=p[i]+dpdt[i]\*dt;

        s1[i+1]=s1[i]-dpdt[i]\*dt;

        s2[i+1]=s2[i]-dpdt[i]\*dt;

        printf("%lf %lf %lf %lf\n",dt\*(i+1),p[i+1],s1[i+1],s2[i+1]);

    }

    return 0;

}

図14　課題11のプログラム

グラフ

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図15　課題11の結果のグラフ

課題12

ヒトの体内の物質の濃度を一つ選び，その物質の濃度が変化する物理的なメカニズム（物理的に因果関係がはっきりしている仕組み）を説明せよ．

解答：

体内での物質としてグルコースについて調べた。グルコースは細胞内でグルコースが主要なエネルギーの供給源であり、解糖系とクエン酸回路の代謝経路で利用される。具体的には、エネルギーを放出するために、グルコースが酸化され二酸化炭素と水に分解される。