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９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。

#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。

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。

#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;

}

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。

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．

#include <stdio.h>

#define N 3000

double f(double s){

    double km=0.75;

    double vmax=0.02\*60;    //単位がsecでminで計算したいので60倍

    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;

}

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，図4 で示した基質に対する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，図4 に合わせて0.5 と1.0 とし，n は3 とせよ．

#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;

}

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，式(5) 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．

#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;

}

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(4) と式(5) を比較することで説明せよ．

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，式(6) 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．

#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;

}

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．