数値シミュレーション実験

第4回レポート

提出日　2025年６月１８日

提出者　今村　優斗

学籍番号　2713240012-7

課題１

以下の2 次微分を使った式で表現された微分方程式を計算するオイラー法のプログラムを作れ．さ

らに，*t* = 0 [s] から1*.*0 [s] までの*x* の時間変化をグラフで示せ．ただし，*a* = 2*.*0 とし，*x* の初期値は0，*dx/dt* の初期値も0 とせよ．

ダイアグラム が含まれている画像

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

解答：

図1にプログラム、図２に実行結果のグラフを示した。

図1より、xとyの値を同時にオイラー方によって計算した。図2より、得られた結果をグラフにして示した

#include <stdio.h>

#define N 1000

int main(void){

    double x[N+1],y[N+1];

    double dxdt[N],dydt[N];

    double dt=0.001;

    x[0]=0.0;

    dxdt[0]=0.0;

    y[0]=0.0;

    printf("%lf %lf\n",dt\*0,x[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dxdt[i+1]=y[i];

        dydt[i+1]=(-0.2\*x[i]\*x[i]+3.0\*x[i]-4.0)/2.0;

        x[i+1]=x[i]+dxdt[i]\*dt;

        y[i+1]=y[i]+dydt[i]\*dt;

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

    }

    return 0;

}

図１　課題１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２　実行結果のグラフ

課題2

以下のベクトルで表現された式を，スカラーで表現された二つの式に変換せよ．なお，各ベクトル

の成分を表す記号は，各自で定義せよ．

文字が書かれている

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

解答：

図3に変換した式を示した。図3より、rベクトルをrx成分、ry成分、pベクトルをpx成分、py成分、qベクトルをqx成分、qy成分のそれぞれ二つに分けて表した。

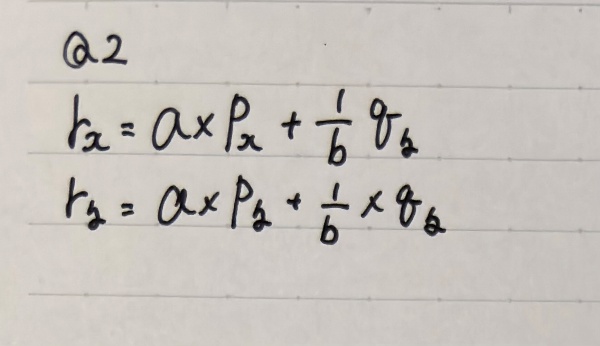


図3　変換した式

課題3

以下のベクトルを使って表現された1 次微分の式を，スカラーを用いて表現された二つの1 次微分

式に変換せよ．ただし，*⃗s* は定数とする．

時計 が含まれている画像

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

解答：

図4に解答を示した。図4より、課題3を参考にそれぞれのベクトルをx,y成分に分解して微分方程式を立式した。

テキスト, 手紙

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図4　変換した式

課題４

上記の課題3 の微分方程式をオイラー法で計算するプログラムを作れ．なお，各ベクトルの成分

は，各自で定義せよ．また，*⃗r* の初期値は，(1,2)とし，定数*⃗s* は，*⃗s* =(3,6)として，*⃗r* の値がほぼ変化しなくなる時刻まで計算した結果をグラフで示せ．

解答：

プログラムを図5に、実行結果を図6に示した。図5より、rベクトルのx成分を表す配列rx、rベクトルのy成分を表す配列ryを作成し、それぞれの微分を表す配列drxdt,drydtを作成した。それらを元に、初期条件で初期化しオイラー方のプログラムを組んだ。図6より、紫の線がrベクトルのx成分を示し、緑の線がrベクトルのy成分を示す。

#include <stdio.h>

#define N 700

double rx[N+1],ry[N+1];

double drxdt[N],drydt[N];

int main(void){

    double sx=3.0;

    double sy=6.0;

    double dt=0.1;

    rx[0]=1.0;

    ry[0]=2.0;

    drxdt[0]=sx-(rx[0]/10.0);

    drydt[0]=sy-(ry[0]/10.0);

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,rx[0],ry[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        drxdt[i+1]=sx-(rx[i]/10.0);

        drydt[i+1]=sy-(ry[i]/10.0);

        rx[i+1]=rx[i]+drxdt[i]\*dt;

        ry[i+1]=ry[i]+drydt[i]\*dt;

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

    }

    return 0;

}

図５　課題4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4の実行結果のグラフ

課題5

以下のベクトルを使って表現された2 次微分の式を，スカラーを用いて表現された二つの2 次微分

式に変換せよ．なお，各ベクトルの成分は，各自で定義せよ．

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。

解答：

解答を図7に示した。課題3.4と同様にそれぞれのベクトルの成分をx,yに分けて立式した。

ホワイトボードに書かれた文字

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図７　2つの微分方程式に変換した図

課題6

上記の課題5 で得られた，スカラーを用いた二つの2 次微分方程式について，1 章の方法を用いて，四つの1 次微分方程式に変換せよ．

解答：

解答を図8に示した。Pxの微分をVx、Pyの微分をVyとして、2次微分方程式を1次微分方程式に変換した。

テキスト, 手紙

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図8　４つの微分方程式に変換した図

課題7

上記の課題6 で得られた，四つの1 次微分方程式をオイラー法で計算するプログラムを作れ．ただ

し，*⃗p* の初期値は，(1,2)とし， *d⃗pdt* の初期値は，(0,0)とせよ．また，時刻*t* = 100 [s] まで計算した*⃗p* の値をグラフとして示せ．

解答：

プログラムを図9、実行結果のグラフを図10に示した。それぞれの成分を表す配列vx,vy,px,pyとそれぞれの微分を表す配列dpxdt,dpydt,dvxdt,dvydtを作成した。その後、与えられた条件で初期化し課題6の微分方程式を元にオイラー方によりプログラムした。図10より、紫色の線がpベクトルのx成分を表し、緑色の線がpベクトルのy成分を表す。

#include <stdio.h>

#define N 1000

double vx[N+1],vy[N+1];

double px[N+1],py[N+1];

double dpxdt[N+1],dpydt[N+1];

double dvxdt[N+1],dvydt[N+1];

double dt=100.0/1000;

int main(void){

    px[0]=1.0;

    py[0]=2.0;

    dpxdt[0]=0.0;

    dpydt[0]=0.0;

    vx[0]=0.0;  //dpxdt[0]=vx[0]=0.0

    vy[0]=0.0;

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,px[0],py[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dpxdt[i]=vx[i];

        dvxdt[i]=0.1\*vx[i]-0.2\*px[i]+0.1;

        dpydt[i]=vy[i];

        dvydt[i]=0.1\*vy[i]-0.2\*py[i]+0.1;

        vx[i+1]=vx[i]+dvxdt[i]\*dt;

        vy[i+1]=vy[i]+dvydt[i]\*dt;

        px[i+1]=px[i]+dpxdt[i]\*dt;

        py[i+1]=py[i]+dpydt[i]\*dt;

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

    }

    return 0;

}

図９　課題7のプログラム

グラフ, 折れ線グラフ, ヒストグラム

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図10　課題7の実行結果のグラフ

課題8

以下の二つの2 次微分を用いた微分方程式を1 次微分を用いた微分方程式に変換し，*t* = 0 [s] か

ら*t* = 100 [s] まで*px, py* を計算し，横軸を*px*，縦軸を*py* とするグラフに示せ．ただし，初期値

として，*px* = 1*.*0*, py* = 0*.*0*, dpxdt* = 0*.*0*, dpydt* = 1*.*0 を用いること．

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。

解答：

図11に1次微分方程式に変換した式を示し、図12にプログラム、図13に実行結果のグラフを示した。図11より、課題6と同様に1次微分方程式に変換した。図12より、図11で求められた式を使用し課題7と同様にオイラー法のプログラムをした。図13より、x軸をpx、y軸をpyとして結果をプロットした。

テキスト, 手紙

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図11　2次微分方程式を1次微分方程式に変換した図

#include <stdio.h>

#define N 100000

double vx[N+1],vy[N+1];

double px[N+1],py[N+1];

double dpxdt[N+1],dpydt[N+1];

double dvxdt[N+1],dvydt[N+1];

double dt=0.001;

int main(void){

    px[0]=1.0;

    py[0]=0.0;

    dpxdt[0]=0.0;

    dpydt[0]=1.0;

    vx[0]=dpxdt[0];  //dpxdt[0]=vx[0]=0.0

    vy[0]=dpydt[0];

    printf("%lf %lf %lf\n",dt\*0,px[0],py[0]);

    for(int i=0;i<N;i++){

        dpxdt[i]=vx[i];

        dvxdt[i]=-0.1\*vx[i]-px[i];

        dpydt[i]=vy[i];

        dvydt[i]=-py[i];

        vx[i+1]=vx[i]+dvxdt[i]\*dt;

        vy[i+1]=vy[i]+dvydt[i]\*dt;

        px[i+1]=px[i]+dpxdt[i]\*dt;

        py[i+1]=py[i]+dpydt[i]\*dt;

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

    }

    return 0;

}

図12　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13　課題8の結果のグラフ

課題9

基質であるp-ニトロフェニルリン酸の濃度を[*S*]，反応生成物であるp-ニトロフェノールの濃度

を[*P*] ，基質と酵素が結合したEScomplex の濃度を[*ES*], 基質と結合していない酵素の濃度を

[*Efree*] , 酵素の総濃度を[*Etot*] という変数で表現し，上記の反応に関する微分方程式を示せ．反

応速度定数は上記の*k*1, *k*2, *k*3 を使用すること．

解答：

解答を図14に示した。図14より、第3回の課題2を参考に、それぞれの物質の濃度の微分方程式を立式した。

テキスト, 手紙

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図14　課題９の解答

課題10

基礎生化学実験で行った実験の結果を使用し，反応時間を変化させた場合の実験結果をうまく再現

するように微分方程式で使用した反応速度定数を調整し，決定した反応速度定数を示せ．また，実

験結果と微分方程式で計算した反応生成物の時間変化をグラフで示せ．

解答：

図15に生化学実験で求めたグラフ、図16に逆数で表したグラフとKm、Vmaxについて表した図を、図17にプログラム、図18に実行結果を示した。手順として、図16から、KmとVmaxの値を求めた。求めたこれら二つの値を、第3回の課題4に記載されているk1、k2、k3、Vmax、Kmの関係式に適用した。そして、図15によって得られたグラフに類似したグラフを生成するため、課題9で導出した微分方程式を用いたプログラムにおいて、最適なk1、k2、k3の値を探索した。図17より、オイラー法を計算する際に必要な変数を作成し、実験時に用意した試薬の量をもとに単位をmMに変換して計算した。図16より、x軸を時間、y軸を濃度としてプロットした。

グラフ, 散布図

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図15　生化学実験で求めたグラフ

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。

テキスト

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。図16　逆数で表したグラフとKm、Vmaxについて表した図

#include <stdio.h>

#define N 1800

double efree[N+1];

double etot;

double s[N+1];

double p[N+1];

double es[N+1];

double dsdt[N+1];

double desdt[N+1];

double dpdt[N+1];

double dt=30.0/N;

double fs(double k1,double efree,double es,double s,double k2){

    double q1=k1\*s\*efree;

    double q2=k2\*es;

    return (-q1+q2);

}

double fes(double k1,double s,double efree,double es,double k2,double k3){

    double q1=k1\*s\*efree;

    double q2=k2\*es;

    double q3=k3\*es;

    return (q1-q2-q3);

}

double fp(double k3,double es){

    double q3=k3\*es;

    return q3;

}

int main(void){

    s[0]=4.0;

    es[0]=0.0;

    p[0]=0.0;

    double k1=10.8147;

    double k2=-10.3587;

    double k3=87.5;

    double etot=0.000016;

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

    for(int i=0;i<N;i++){

        efree[i]=etot-es[i]; //hkfreeの濃度計算

        dsdt[i]=fs(k1,efree[i],es[i],s[i],k2);

        desdt[i]=fes(k1,s[i],efree[i],es[i],k2,k3);

        dpdt[i]=fp(k3,es[i]);

        s[i+1]=s[i]+dsdt[i]\*dt;

        es[i+1]=es[i]+desdt[i]\*dt;

        p[i+1]=p[i]+dpdt[i]\*dt;

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

    }

    return 0;

}

図17　課題10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18　課題10の結果のグラフ

課題11

下記の数式を計算するプログラムを作り，時間ステップやシミュレーションを行う時間を調整し

たうえで，定常的な周期を示すようになったときのmRNA とPER の時間変化がどのようになっ

たかグラフを用いて説明せよ．特に周期が何時間になったか確認すること．なお，上記の数式を計

算するプログラムで使用する定数を表2 に示す．また，*M*, *P*1, *P*2 の初期値は0 とせよ．

テキスト, 手紙

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

解答：

図19にプログラムを、図20に実行結果を示した。

#include <stdio.h>

#define N 300000

double dt = 0.001;

double t=0.0;

double M, P1, P2;

double Vm=1.0;

double Vp=0.5;

double kp1=10.0;

double kp2=0.03;

double kp3=0.1;

double km=0.1;

double P=0.1;

double Jp=0.05;

double ka=2000.0;

double kd=10.0;

double r=2.0;

double dm, dp1, dp2;

int main(void){

    for (int i=0;i<N;i++){

        dm=(Vm/(1+(P2/P)\*(P2/P)))-km\*M;

        dp1=Vp\*M-((kp1\*P1)/(Jp+P1+r\*P2))-kp3\*P1-2.0\*ka\*P1\*P1+2.0\*kd\*P2;

        dp2=ka\*(P1\*P1)-kd\*P2-((kp2\*P2)/(Jp+P1+r\*P2))-kp3\*P2;

        M+=dm\*dt;

        P1+=dp1\*dt;

        P2+=dp2\*dt;

        printf("%lf %lf %lf %lf\n", dt\*i,M,P1,P2);

    }

    return 0;

}

グラフ が含まれている画像

AI 生成コンテンツは誤りを含む可能性があります。

図20