#033★★☆☆ 2022.2.12 / 2023.7.29

薬物速度論解析のためのラプラス変換（その３：微分方程式）。

薬物速度論で用いるいくつかの微分方程式をラプラス変換で解いてみる。変数の意味などの詳細は一般的薬物速度論の定義に合わせているのでここでは説明を省略する。

(1) 静注 1-コンパートメントモデル（初期条件：$C(0)$ とする）。

$dC(t)/dt = -k \cdot C(t)$

$dC(t)/dt \quad \leftrightarrow \quad s \cdot \tilde{C}(s) - C(0)$ なので

$s \cdot \tilde{C}(s) - C(0) = -k \cdot \tilde{C}(s)$　となり、整理して

$\tilde{C}(s) = C(0)/(s+k)$

$exp(-a \cdot t) \quad \leftrightarrow \quad 1/(s+a)$　なので、逆変換すると、

$C(t) = C(0) \cdot exp(-k \cdot t)$　と得られる。

(2) 経口 1-コンパートメントモデル（初期条件：$X_a(0)$、$X_b(0) = 0$ とする）。

＊実際には分布容積で除して濃度データを扱うが、ここでは薬物量 X で考える。添字、a：吸収部位、b：体内。

$dX_a(t)/dt = -k_a \cdot X_a(t) \qquad dX_b(t)/dt = k_a \cdot X_a - k_e \cdot X_b$ なので、

$\widetilde{X_a}(t) - X_a(0) = -k_a \cdot \widetilde{X_a}(t) \qquad \widetilde{X_b}(t) - 0 = k_a \cdot \widetilde{X_a} - k_e \cdot \widetilde{X_b}$ となり、整理して、

$\widetilde{X_a}(t) = X_a(0)/(s+k_a) \qquad (s+k_e)\widetilde{X_b}(t) = k_a \cdot X_a(0)/(s+k_a)$ なので、

$\widetilde{X_b}(t) = k_a \cdot X_a(0)/(s+k_a)/(s+k_e)$ となり、逆変換すると、

$(e^{-a \cdot t} - e^{-b \cdot t})/(b-a) \ \leftrightarrow\ 1/(s+a)(s+b)$ を用いて、

$X_a(t) = X_a(0) \cdot exp(-k_a \cdot t)$

$$X_b(t) = \frac{k_a \cdot X_a(0)}{k_a - k_e} \cdot \{exp(-k_e \cdot t) - exp(-k_a \cdot t)\}$$

(3) 点滴 1-コンパートメントモデル

点滴注入速度を R (mg/L/hr) と設定する。単位体積あたりで定義したので次式は濃度に関する式として成立する。（初期条件：$C(0) = 0$ とする）。

$dC(t)/dt = R - k \cdot C(t)$

$s \cdot \tilde{C}(s) - C(0) = R - k \cdot \tilde{C}(s)$　となり、整理して

$\tilde{C}(s) = R/(s+k)$

$(e^{-a \cdot t} - e^{-b \cdot t})/(b-a) \ \leftrightarrow\ 1/(s+a)(s+b)$ で $a = 0$ とした場合を考えると、

$(1 - e^{-b \cdot t})/b \ \leftrightarrow\ 1/(s+b)$ なので、逆変換すると、

$$C(t) = \frac{R}{k} \cdot \left(1 - exp(-k \cdot t)\right)$$

特に、無限時間が経過すると、公式 $\lim_{t \to \infty} C(t) \quad \leftrightarrow \quad \lim_{s \to 0} s \cdot \tilde{C}(t)$ より、

$C(\infty) = R/k$ の一定値となる。