

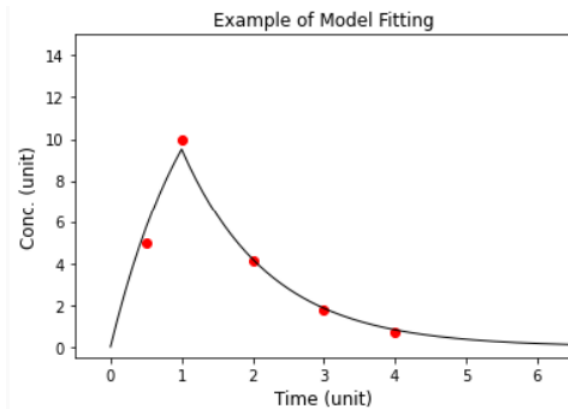
薬物動態：点滴投与 1-コンパートメントモデルのあてはめ計算

薬物動態、点滴投与 1-コンパートメントモデルのあてはめ計算 (prog02\_04.py)

\* 前回まで (#001、#002) の続き、前回までの記事を確認した上で下記を参照してください。

- (1) データの入力：前回同様。投与量 (DOSE)、薬物動態パラメータであるクリアランス (CL)、分布容積 (VD)、に加えて点滴時間 (TINF) を定義した。点滴速度は DOSE/TINF となる。
- (2) モデルあてはめ、結果のグラフ化、得られたパラメータ値の出力：前回同様。

以上の内容で作成した例を次ページ「prog02\_04.py」に示した。出力結果は次のとおり。



```
-- Estimated Parameters --  
CL = 5.8828  
Vd = 7.1750  
Ke = 0.8199  
* t1/2 = 0.8454
```

以上

```
"""# Program 02-04 "prog02_04.py"""  
# Fitting to One-Compartment inf model  
#  
#import math  
import numpy as np  
import matplotlib.pyplot as plt  
from scipy.optimize import curve_fit  
#  
# Global variables  
DOSE = 100.  
TINF = 1.0  
CL = 1.0  
VD = 1.0  
#
```

```

def set_data():
    # Data input in this program
    data_x = [0.5, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0]
    data_y = [5.0, 10.0, 4.1, 1.8, 0.7]
    return data_x, data_y

#
def model_eq141(x, a, b):
    # 1-Comp. inf model
    temp1 = 1.0 - np.exp(-a/b * x)
    temp2 = (1.0 - np.exp(-a/b * TINF)) * (np.exp(-a/b * (x - TINF)))
    return DOSE / TINF / a * (temp1 * (x <= TINF) + temp2 * (x > TINF))

#
def draw_plot(data_x, data_y):
    # Data plotting
    plt.title("Example of Model Fitting", fontsize = 12)
    plt.xlim(-0.5, 6.5)
    plt.ylim(-0.5, 15.0)
    plt.xlabel("Time (unit)", fontsize = 12)
    plt.ylabel("Conc. (unit)", fontsize = 12)
    plt.plot(data_x, data_y, "o", color = "red")
    # SImulation of predicted curve
    pred_x = np.arange(0., 10., 0.05)
    pred_y = model_eq141(pred_x, CL, VD)
    plt.plot(pred_x, pred_y, linestyle = "solid", linewidth = "1", color = "black")
    plt.show()

#
def print_output():
    # Output
    print ("-- Estimated Parameters --")
    print ('    CL = {:.4f}'.format(CL))
    print ('    Vd = {:.4f}'.format(VD))
    print ('    Ke = {:.4f}'.format(CL / VD))
    print (' * t1/2 = {:.4f}'.format(np.log(2) / (CL / VD)))

#
if __name__ == '__main__':
    x, y = set_data()
    p_init = (4.0, 5.0)
    param, cov = curve_fit(model_eq141, x, y, p0 = p_init)

```

ミスあり (赤字)  
b を a に修正

```
CL = param[0]
VD = param[1]
draw_plot(x, y)
print_output()
```