

# 程式使用說明書

## Pharmacokinetic Analysis 藥物動力學預測計算器

### 1. 程式介紹

本程式專為藥物動力學中的一室模型與二室模型預測而設計。其核心功能包含一室模型及二室模型的主要參數計算，並能生成預測圖形和原始數據圖形。透過此程式，使用者可以簡化複雜的計算過程，並獲得正確的數值結果，協助其更有效地進行藥物動力學分析。

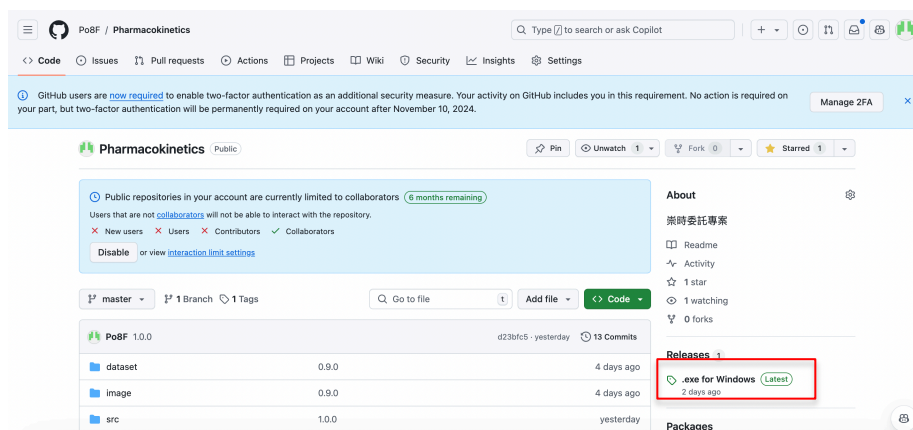
### 2. 安裝指南

程式安裝環境要求為 Windows 系統。

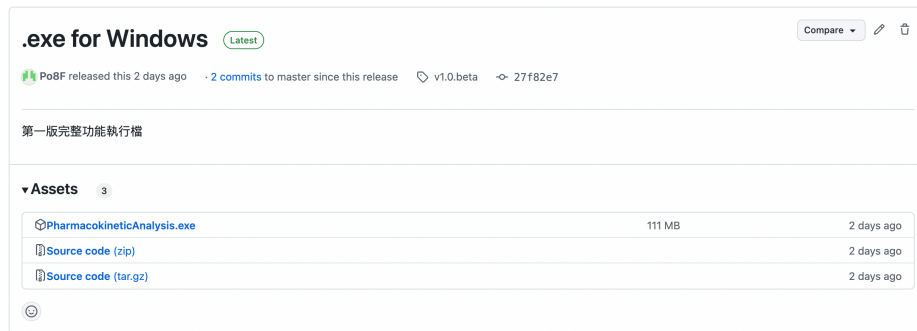
執行檔下載連結：<https://github.com/Po8F/Pharmacokinetics>。

下載步驟如下：

#### 1. 專案執行檔位置。



2. 點擊「PharmacokineticAnalysis.exe」下載專案檔。



3. 執行檔直接雙擊即可執行。
4. 若出現 **Running on local URL: http://127.0.0.1:7860** 即表示安裝並執行成功。
5. 程式執行時請勿關閉本視窗，關閉視窗即表示停止運行程式。

### 3. 使用方式及功能說明

程式介面設計如下圖：

藥物濃度分析工具

第一部分主要功能設定：

- 一、原始資料檔案上傳：

點擊後可選擇 .xlsx 檔案上傳。

- 二、工作表選擇。

自動讀取檔案中的工作表名，請確定工作表中的表格格式如下：

Time	Cp	Dose
value	value	value

value	value	以下留空
-------	-------	------

[Time]及[Cp]下資料數量不限，但數量需相等，[Dose]資料數量限定為 1 項。

### 三、設定圖表標題。

設定以實驗名稱為主，此設定會影響的結果如下：

#### 1. 圖表的標題：

留空預設為「XXX Compartment Model」。

若沒有留空則設定成「XXX Compartment Model – 設定名稱」。

#### 2. 儲存檔案的資料夾名稱。

#### 3. 儲存檔案的檔名。

### 四、X 軸、Y 軸單位設定。

X 軸：時間。

單位尺度：預設為 Minute，可設定成 Second、Minute、Hour、Day。

Y 軸：藥物濃度。

單位尺度：預設為 mg/L，可設定成 g/L、mg/L、μg/L、ng/L。

### 五、程式執行訊息提示。

分析過程程式是否正常執行的提示訊息。

### 六、分析按鈕。

按下即執行線性回歸分析，若分析成功下方介面將顯示分析結果圖及相關參數。

### 七、重置按鈕。

重置上述設定回歸預設值。

### 八、儲存按鈕。

儲存檔案至執行檔路徑下方的同名資料夾，若執行成功將會儲存三個檔案，分別為一室模型預測圖 (.png)、二室模型預測圖 (.png)、分析結果參數 (.xlsx)。

一室模型結果

一室模型圖表

一室模型參數

輸出數值

二室模型結果

二室模型圖表

二室模型參數

輸出數值

## 第二部分圖表及參數輸出：

使用普通最小平方法來建立線性回歸模型，並輸出模型的斜率和截距。根據這些回歸參數，應用相應的公式計算一室模型和二室模型所需的參數，最終回傳計算結果。

以下為一室模型及二室模型使用的參數定義及對應公式：

### 一、 一室模型

一室模型回歸預測線使用資料為全部原始資料之集合。

參數	公式或參數來源
slope	線性回歸預測線之斜率。
k_e	線性回歸預測線之截距。
half_life	$\frac{0.693}{k_e}$
intercept	$\ln(C_{p0})$
intital_concentration	$C_{p0}$
clearnce	$k_e \times V_d$
VD	$V_d = \frac{Does}{C_{p0}}$
AUC(0-t)	$AUC_{0-t} = \int_0^t C_p(t) dt$
AUC(0-finity)	$AUC_{0-\infty} = \int_0^{\infty} C_p(t) dt$

## 二、 二室模型

分為兩段預測線，先由後段最後三組資料 ( 若資料集夠大可能會出問題 )，使用普通最小平方回歸得出預測線 B，透過 B 以及  $\beta$  求出預測線 A 的原始資料及拆分標準如下說明：

判斷標準：

原始資料集個別數值若滿足下列條件則為預測線 A 之有效資料集：

$$\ln(C_p(t) - C'_p(t)) > 0$$

$C'_p(t)$ ：預測線 B 的預測函數：

$$C'_p(t) = B e^{\beta t}$$

參數	公式或參數來源
a	線性回歸預測線 A 之斜率。( A )
alpha	線性回歸預測線 A 之截距。( $\alpha$ )
b	線性回歸預測線 B 之斜率。( B )
beta	線性回歸預測線 B 之截距。( $\beta$ )
k_21	$k_{21} = \frac{(A\beta) + (B\alpha)}{(A + B)}$
k_10	$k_{10} = \frac{\alpha\beta}{k_{21}}$
k_12	$k_{12} = \alpha + \beta - k_{10} - k_{21}$
half_life_alpha	$h_{\frac{1}{2}} = \frac{0.693}{\alpha}$
half_life_beta	$h_{\frac{1}{2}} = \frac{0.693}{\beta}$
half_life_k21	$h_{\frac{1}{2}} = \frac{0.693}{k_{21}}$
half_life_k10	$h_{\frac{1}{2}} = \frac{0.693}{k_{10}}$
half_life_k12	$h_{\frac{1}{2}} = \frac{0.693}{k_{12}}$
AUC(0-t)	$AUC_{0-t} = \int_0^t C_p(t) dt$

AUC(0-finity)	$AUC_{0-\infty} = \int_0^{\infty} C_p(t) dt$
Volume	$V = \frac{Dose}{A + B}$
VDss	$VD_{ss} = V(1 + \frac{k_{12}}{k_{21}})$
clearance	$k_{10} \times V$
Cmax	$max(C_p)$

4. 常見問題

目前暫無。