

建模背景

在医疗健康领域，理解药物在生物组织中的传输行为对于优化治疗方案、预测药效及制定个体化用药策略具有重要意义。药物在体内经历扩散、分布、代谢和排泄等多个过程，其中扩散与代谢是决定局部药物浓度变化的关键因素。为了定量描述这一动态过程，建立数学模型成为一种有效的手段。

本模型聚焦于药物在生物组织中的一维扩散与代谢过程。假设药物从初始位置释放后，在组织中向周围扩散，同时经历一级代谢反应，浓度随时间和空间位置变化。通过偏微分方程（PDE）建模，可以描述药物浓度在不同空间点和时间点的演化过程。

在实际应用中，解析求解偏微分方程可能受限于复杂边界条件或非线性项，因此常采用近似解析解或数值模拟方法进行评估。本模型基于扩散-代谢方程的解析解形式，构建一个简化但具有物理意义的函数，用于模拟药物浓度在特定位置和时间的预测值。该函数可用于后续的参数估计、敏感性分析、药物释放优化等任务，为药代动力学建模提供基础支持。

建模公式

药物在组织中的扩散与代谢过程可由如下偏微分方程描述：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

其中，\$ C(x,t) \$ 表示药物在位置 \$ x \$ 和时间 \$ t \$ 的浓度，\$

D 为扩散系数， k 为代谢速率常数。该方程描述了两个主要过程：扩散导致药物从高浓度区域向低浓度区域传播，代谢则使药物浓度随时间呈指数衰减。
该方程在初始条件为 $C(x,0) = C_0$ (x) (即药物初始集中在原点) 和无限空间边界条件下，具有解析解。基于此解析解，构建如下评估函数用于模拟药物浓度：

$$C(x, t) = C_0 \cdot e^{-kt} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

该函数可用于预测药物在任意空间位置 x 和时间 t 的浓度值，输入参数包括初始浓度 C_0 、扩散系数 D 和代谢速率 k 。
通过该模型，可以有效模拟药物在组织中的动态分布，为药理研究和临床应用提供理论支持。