

CVIČENÍ MODELOVÁNÍ A SIMULACE

Cvičení 5 - LS 2014 – Michel Kana

Co uděláme ve dnešním cvičení?

1. **Shrnutí minulého cvičení**
2. **Jedno-kompartmentové modely**
3. **Více-kompartmentové modely**
4. **Shrnutí**

Shrnutí minulého cvičení

[Modely populací]

Model dvoudruhových populací dravec – kořist: *Lotky – Volterry* se zpožděním, Kolmogorovův model

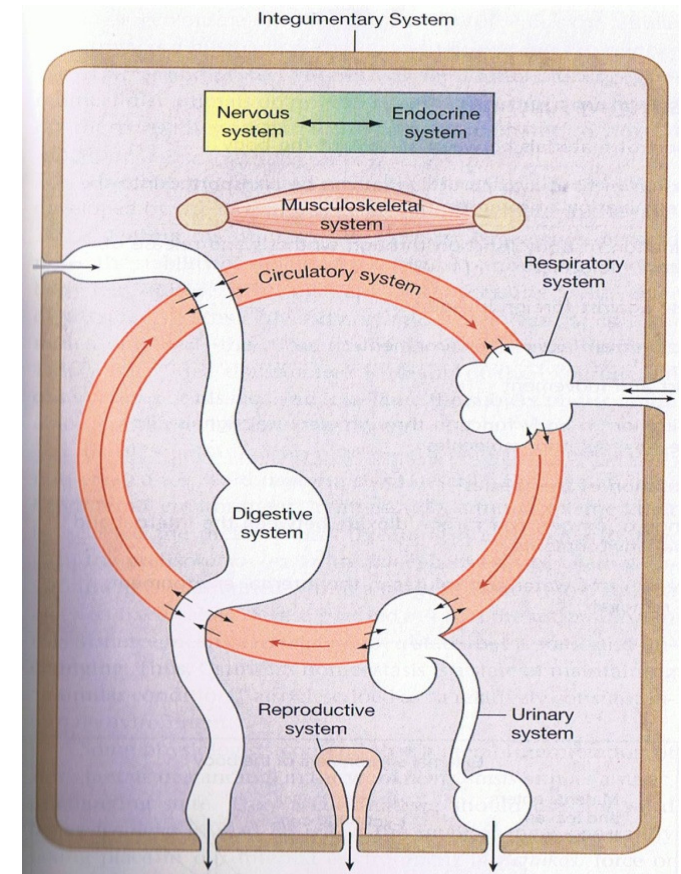
Model dvoudruhových populací s konkurencí

Model dvoudruhových populací se spolupráce

Epidemiologické modely

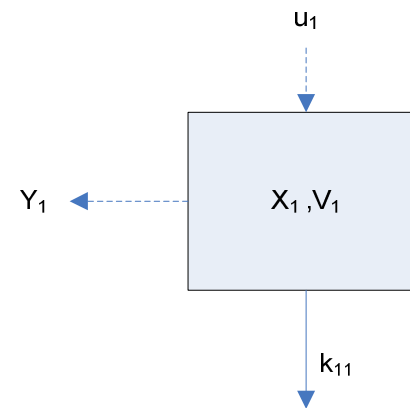
Kompartmentové modely

- **Kompartment** je homogenní a odlišitelný prostor s definovatelným rozměrem jako hmota a koncentrace.
- **Látky** jsou elementy, které podléhají pohybu jako je např. absorpce, vylučování, oxidace, atp. (moč, krev, ...)
- **Vstup kompartmentu** je reprezentován přivedením sledované látky z jeho okolí.
- **Výstup kompartmentu** je spojen s pohybem látky mimo prostor kompartmentu.



1-Kompartmentové modely

- 1-kompartmentový model je zjednodušený pohled na homogenní orgán, v němž je libovolný lék nebo látka.
 - ▣ u_1 představuje vstup léku do kompartmentu.
 - ▣ X_1 představuje množství léku ve kompartmentu.
 - ▣ Y_1 představuje koncentrace léku ve kompartmentu.
 - ▣ k_{11} určuje průměrný rychlost extrakce léku z kompartmentu.
 - ▣ V_1 určuje hypotetický objem kompartmentu.



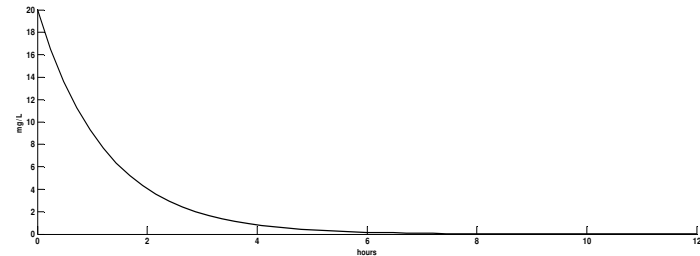
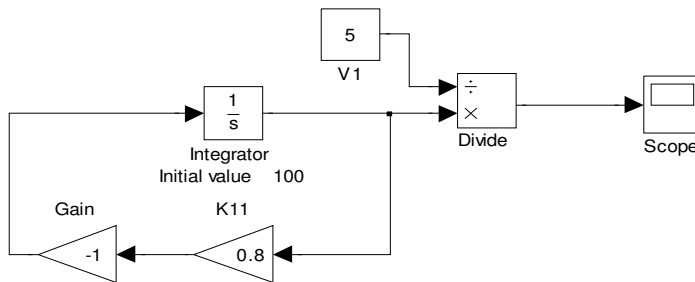
$$\dot{X}_1 = u_1 - k_{11} \cdot X_1$$
$$Y_1 = \frac{1}{V_1} X_1$$

1-Kompartmentové modely

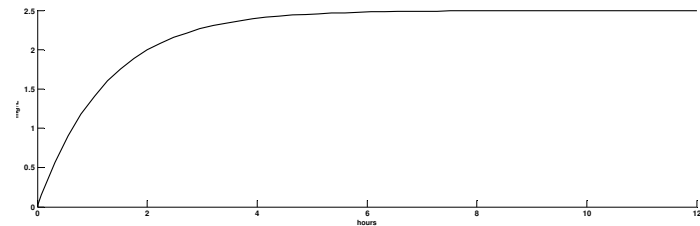
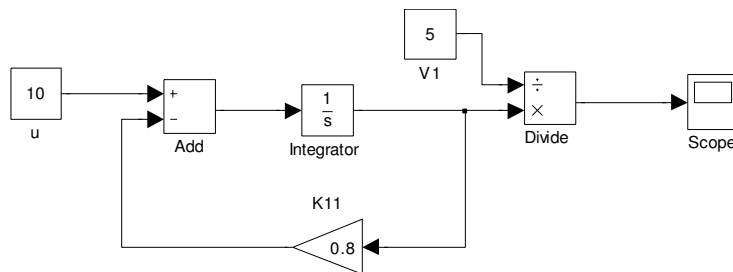
- 1-kompartmentový model s jednorázovým perorální příjem léku.

$$\dot{X}_1 = u_1 - k_{11} \cdot X_1$$

$$Y_1 = \frac{1}{V_1} \cdot X_1$$

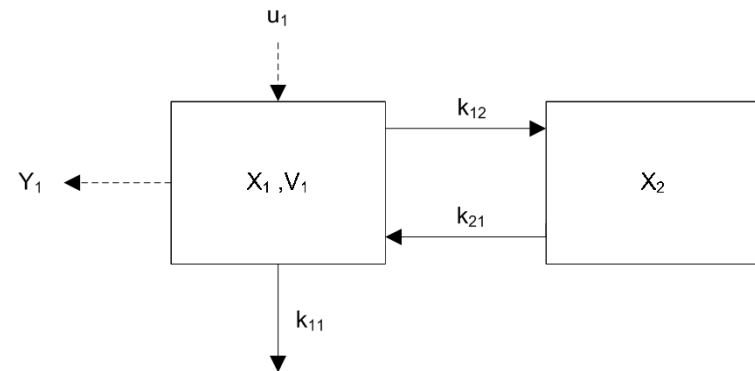


- 1-kompartmentový model s intravenózním příjem léku.



2-Kompartmentové modely

- 2-kompartmentový model je např. zjednodušený pohled na organismus s centrálním a periferním kompartmentem.
- Centrální kompartment
 - ▣ u_1 představuje vstup léku do centrálního kompartmentu.
 - ▣ X_1 představuje množství léku ve centrální kompartmentu.
 - ▣ Y_1 představuje koncentrace léku ve centrální kompartmentu.
 - ▣ k_{11} určuje průměrný rychlost extrakce léku z centrálního kompartmentu.
 - ▣ k_{12} určuje průměrný rychlost distribuce léku z centrálního do periferního kompartmentu.
 - ▣ V_1 určuje hypotetický objem centrálního kompartmentu.
- Periferní kompartment
 - ▣ X_2 představuje množství léku ve periferní kompartmentu.
 - ▣ k_{21} určuje průměrný rychlost zpětné distribuce léku z periferního do centrálního kompartmentu.

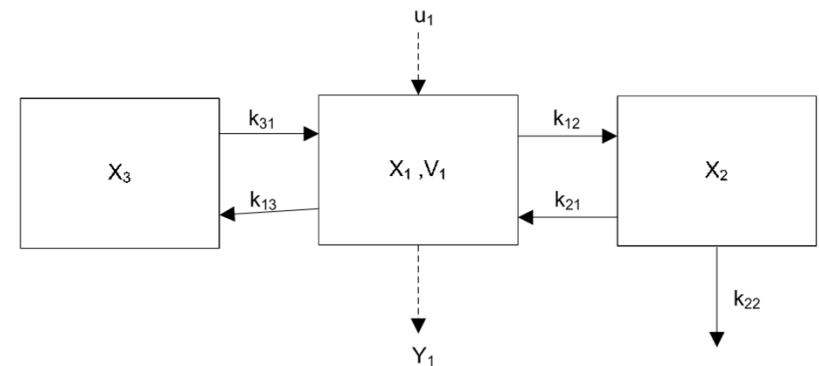


$$\begin{aligned}\dot{X}_1 &= (-k_{11} - k_{12}) \cdot X_1 + k_{21} \cdot X_2 + u_1 \\ \dot{X}_2 &= k_{12} \cdot X_1 + (-k_{21}) \cdot X_2 + 0 \\ Y_1 &= \frac{1}{V_1} \cdot X_1\end{aligned}$$

3-Kompartmentové modely

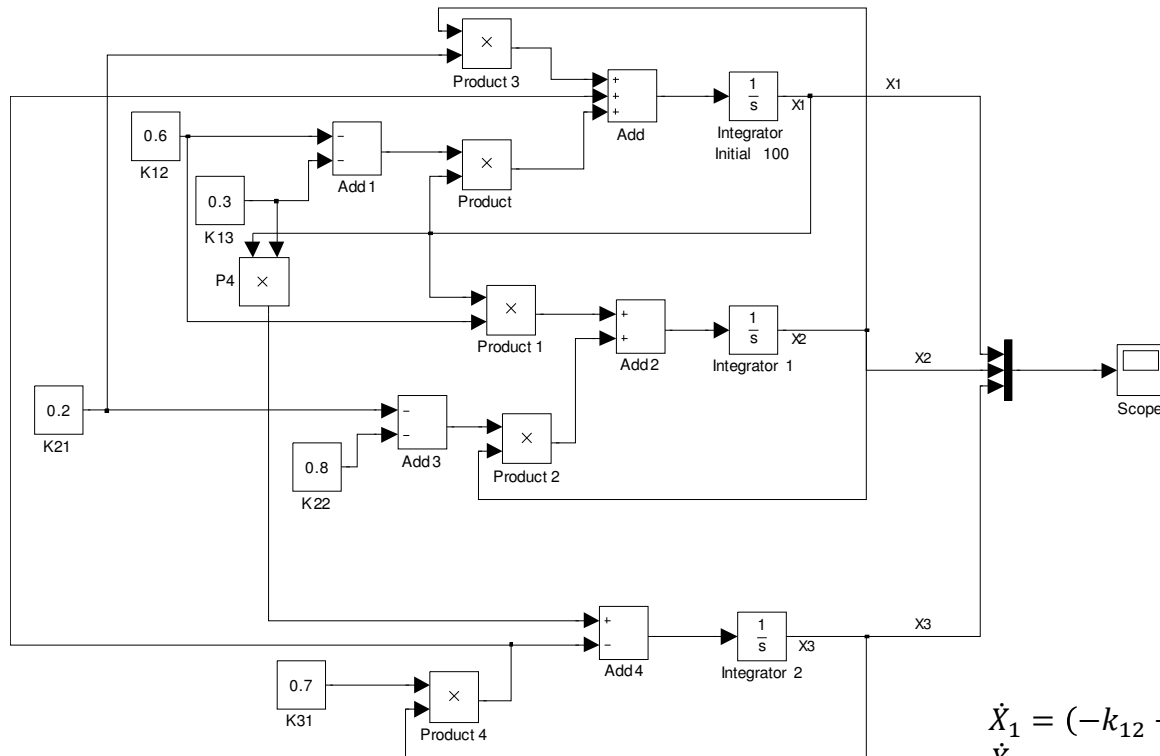
- Vancomycin je antibiotikum s intramuskulární a perorální aplikací. 80-90% aplikované látky jsou vyloučeny z ledvin v průběhu prvních 24 hodin.

- ▣ Centrální kompartment
- ▣ Periferní kompartment
- ▣ Ledviny



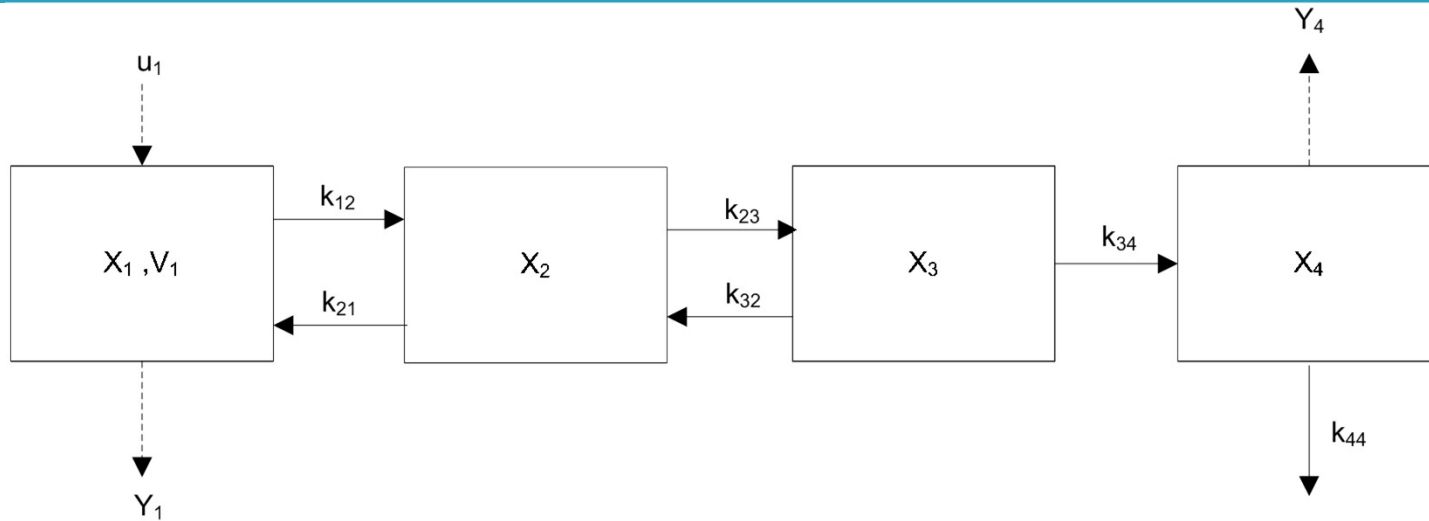
$$\begin{aligned}\dot{X}_1 &= (-k_{12} - k_{13}) \cdot X_1 + k_{21} \cdot X_2 + k_{31} \cdot X_3 + u_1 \\ \dot{X}_2 &= k_{12} \cdot X_1 + (-k_{21} - k_{22}) \cdot X_2 + 0 \cdot X_3 + 0 \\ \dot{X}_3 &= k_{13} \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 + (-k_{31}) \cdot X_3 + 0 \\ Y_1 &= \frac{1}{V_1} \cdot X_1\end{aligned}$$

3-Kompartmentové modely



$$\begin{aligned}
 \dot{X}_1 &= (-k_{12} - k_{13})X_1 + k_{21}X_2 + k_{31}X_3 + u_1 \\
 \dot{X}_2 &= k_{12}X_1 + (-k_{21} - k_{22})X_2 + 0 \cdot X_3 + 0 \\
 \dot{X}_3 &= k_{13}X_1 + 0 \cdot X_2 + (-k_{31})X_3 + 0 \\
 Y_1 &= \frac{1}{V_1} \cdot X_1
 \end{aligned}$$

4-Kompartimentové modely

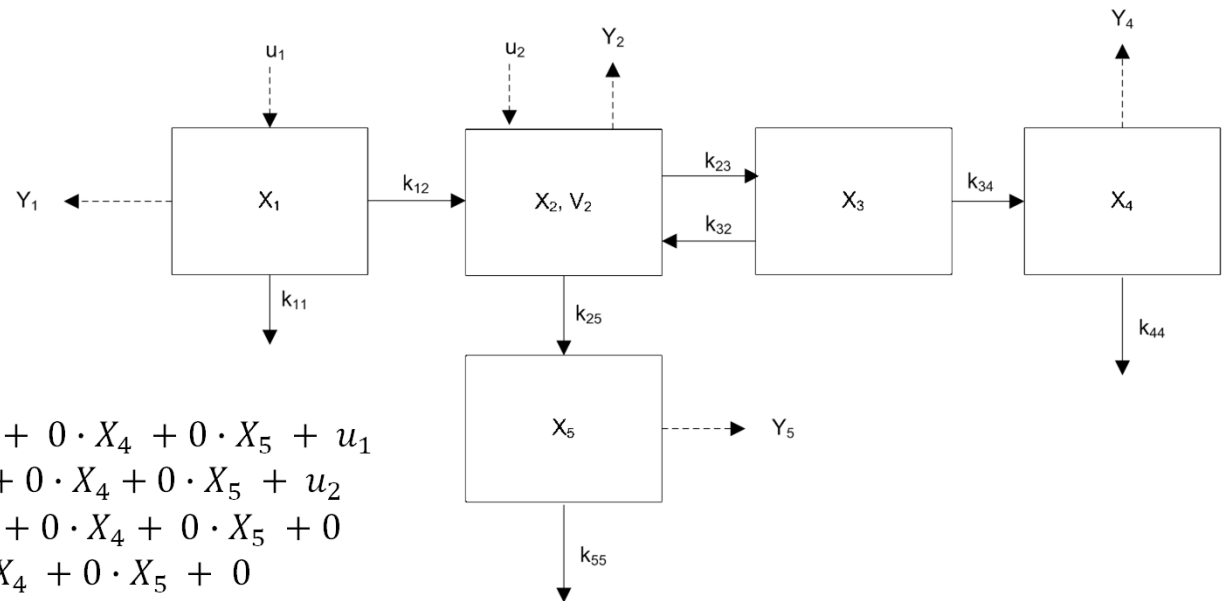


$$\begin{aligned}
 \dot{X}_1 &= (-k_{12}) \cdot X_1 + k_{21} \cdot X_2 + 0 \cdot X_3 + 0 \cdot X_4 + u_1 \\
 \dot{X}_2 &= k_{12} \cdot X_1 + (-k_{21} - k_{23}) \cdot X_2 + k_{32} \cdot X_3 + 0 \cdot X_4 + 0 \\
 \dot{X}_3 &= 0 \cdot X_1 + k_{23} \cdot X_2 + (-k_{32} - k_{34}) \cdot X_3 + 0 \cdot X_4 + 0 \\
 \dot{X}_4 &= 0 \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 + k_{34} \cdot X_3 + (-k_{44}) \cdot X_4 + 0
 \end{aligned}$$

$$Y_1 = \frac{1}{V_1} \cdot X_1$$

$$Y_4 = X_4$$

5-Kompartimentové modely



$$\dot{X}_1 = (-k_{11} - k_{12}) \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 + 0 \cdot X_3 + 0 \cdot X_4 + 0 \cdot X_5 + u_1$$

$$\dot{X}_2 = k_{12}X_1 + (-k_{23} - k_{25})X_2 + k_{32}X_3 + 0 \cdot X_4 + 0 \cdot X_5 + u_2$$

$$\dot{X}_3 = 0 \cdot X_1 + k_{23}X_2 + (-k_{32} - k_{34})X_3 + 0 \cdot X_4 + 0 \cdot X_5 + 0$$

$$\dot{X}_4 = 0 \cdot X_1 + 0 \cdot X_2 + k_{34}X_3 + (-k_{44})X_4 + 0 \cdot X_5 + 0$$

$$\dot{X}_5 = 0 \cdot X_1 + k_{25}X_2 + 0 \cdot X_3 + 0 \cdot X_4 + (-k_{55})X_5 + 0$$

$$Y_2 = \frac{1}{V_2} \cdot X_2$$

$$Y_4 = X_4$$

$$Y_5 = X_5$$

Shrnutí dnešního cvičení

[Modely populací]

Jedno-kompartmentové modely

Více-kompartmentové modely

[Co bude dál?]

Příští týden představíme maticový popis kompartmentové modely.