# RでPK解析Simulation

# Jupyter Webにアクセス

# https://jupyter.org/try

# “Try Jupyter with R”をクリック、しばらく待つ

# File → New Notebook → R

# Rを電卓のように使ってみる

1 + 2 # Shift+Return

2 \* 3

2 ^ 4 # 24

2 ^ 50 # 250

sqrt(2)

log(10) # ln10

log10(100) # log100

# Rで統計

a <- c(2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)

a

a <- a \* 10

a

sum(a)

mean(a)

sd(a)

b <- c(47, 48, 49, 50, 51, 52, 53)

b

mean(b)

sd(b)

boxplot(a, b)

# RでPK解析Simulation

# mrgsolveパッケージをインストール

install.packages("mrgsolve")

library(mrgsolve)

# 1-コンパートメントモデル経口投与

code<-"

$PARAM

Ke = 0.15, Vd = 10, Ka = 0.8

$INIT

Xa=10, X=0

$ODE

dxdt\_Xa = -Ka\*Xa;

dxdt\_X = Ka\*Xa - Ke\*X;

$CAPTURE

C = X/Vd; "

# グラフを描く

mod<-mcode("oral", code) %>% update(end = 24, delta = 0.1)

mod %>% mrgsim %>% plot

# Kaを変化させてみる

idataka <- expand.idata(Ka = c(0.4, 0.8, 1.6))

out <-

mod %>%

idata\_set(idataka) %>%

mrgsim(end=24)

plot(out, C~time)

# Keを変化させてみる

idatake <- expand.idata(Ke = c(0.075, 0.15, 0.3))

out <-

mod %>%

idata\_set(idatake) %>%

mrgsim(end=24)

plot(out, C~time)

# Vdを変化させてみる

idatavd <- expand.idata(Vd = c(5, 10, 20))

out <-

mod %>%

idata\_set(idatavd) %>%

mrgsim(end=24)

plot(out, C~time)

#1-コンパートメントモデル経口投与　血中濃度を対数

code2<-"

$PARAM

Ke = 0.15, Vd = 10, Ka = 0.8

$INIT

Xa=10, X=0

$ODE

dxdt\_Xa = -Ka\*Xa;

dxdt\_X = Ka\*Xa - Ke\*X;

$CAPTURE

lnC = log(X/Vd); "

#グラフを描く

mod2<-mcode("oral2", code2) %>% update(end = 24, delta = 0.1)

mod2 %>% mrgsim %>% plot

#Kaを変化させてみる　時間を48時間まで

idata <- expand.idata(Ka = c(0.4, 0.8, 1.6))

out <-

mod2 %>%

idata\_set(idata) %>%

mrgsim(end=48)

plot(out, lnC~time)

#Keを変化させてみる　時間を48時間まで

idatake <- expand.idata(Ke = c(0.075, 0.15, 0.3))

out <-

mod2 %>%

idata\_set(idatake) %>%

mrgsim(end=48)

plot(out, lnC~time)

#Vdを変化させてみる　時間を48時間まで

idatavd <- expand.idata(Vd= c(5, 10, 20))

out <-

mod2 %>%

idata\_set(idatavd) %>%

mrgsim(end=48)

plot(out, lnC~time)

# Keが異なる患者へ12時間ごと10 mg繰り返し投与3日間

idatake <- expand.idata(Ke = c(0.01, 0.05, 0.25))

mod %>% init(Xa=0) %>%

ev\_rx("10 q 12 x 6") %>%

idata\_set(idatake) %>%

mrgsim(end = 72, delta = 0.1) %>%

plot(C~time)

# Keが異なる患者へ24時間ごと4 mg繰り返し投与30日間

idatake <- expand.idata(Ke = c(0.01, 0.05, 0.25))

mod %>% init(Xa=0) %>%

ev\_rx("4 q 24 x 30") %>%

idata\_set(idatake) %>%

mrgsim(end = 720, delta = 0.1) %>%

plot(C~time)

# Ka、Ke、Vdなどの数字を変えて試してみてください

# 終了するときは、ブラウザ（のタブ）を閉じてください。何も保存されません

# 保存したいときは、次のようにしてください

# File → Rename → 「R-PK」など名前をつける

# File → Download as → Notebook　としてダウンロード

# 便利な使い方

# グーグルコラボにアクセスする

# https://colab.research.google.com

# グーグルのアカウント（Gmailアドレスとパスワード）でログインする

# ファイル→ファイルをアップロード　先ほどダウンロードしたファイルをアップロード

# グーグルコラボ上で実行でき、保存もできます