# 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

# 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

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

out <-

mod %>%

idata\_set(idata) %>%

mrgsim(end=24)

plot(out, C~.)

#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~.)

#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~.)

#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~.)

#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~.)

#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~.)

#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

#終了するとこは、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-PKsimulation」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