rijksuniversiteit groningen

Compartimentensystemen samenvatting

Hielke Freerk Boersma

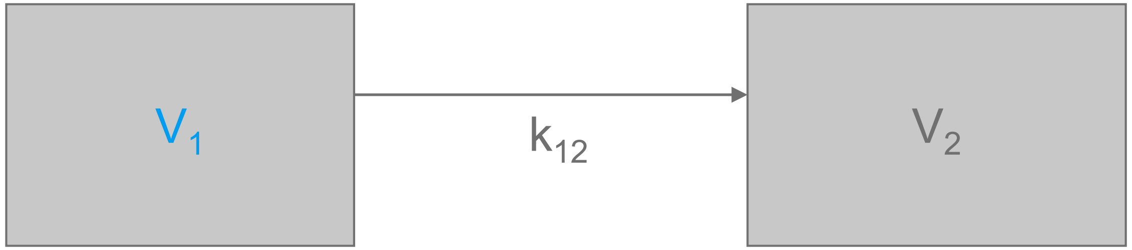
4 december 2023

Vraagstelling

- Hoe gedraagt de hoeveelheid van een al dan niet schadelijke stof (of de concentratie daarvan) zich in een ruimte als functie van de tijd?
- Kenmerk:

$$\frac{dD_1}{dt} = c \cdot D_1(t) \quad of \quad \frac{dD_1}{dt} = c \cdot D_1(t) + f(t)$$

2-Compartimenten systeem



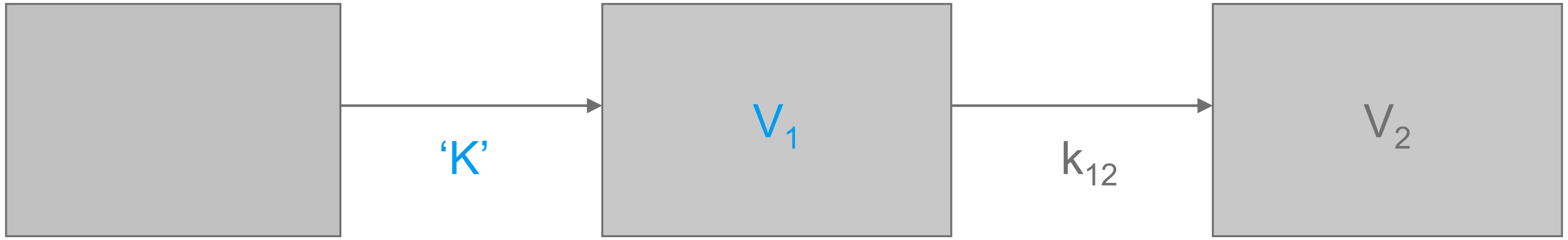
$$\frac{dD_1}{dt} = -k_{12} \cdot D_1(t); \quad D_1(0) = D$$

$$D_1(t) = D \cdot e^{-k_{12}t}$$

$$D_2(t) = D - D_1(t); \quad \textit{idem voor meer compartimenten}$$

Speciaal 2-Compartimenten systeem

(speciaal geval: constante toevoer naar V_1 ; K is het productietempo)



$$\frac{dD_1}{dt} = K - k_{12} \cdot D_1(t); \quad D_1(0) = 0$$

$$D_1 = \frac{K}{k_{12}} - c \cdot e^{-k_{12}t}$$

$$D_1(t) = \frac{K}{k_{12}} \cdot \left(1 - e^{-k_{12}t}\right)$$

3-Compartimenten systeem

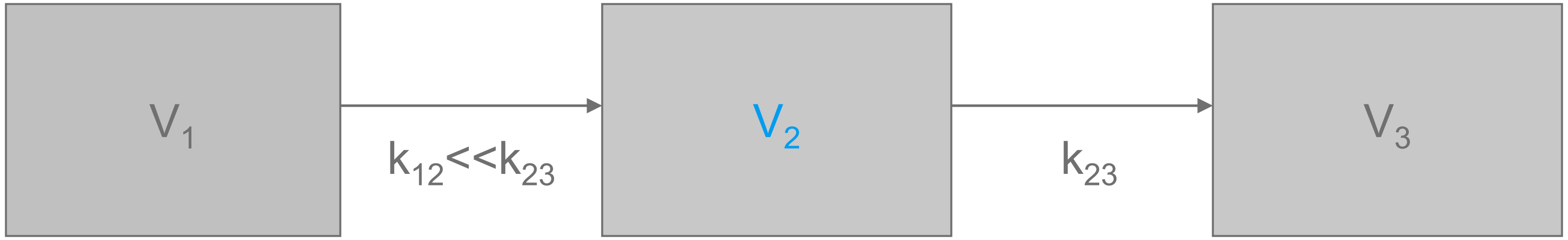
$$V_1 \xrightarrow{k_{12}} V_2 \xrightarrow{k_{23}} V_3$$

Compartiment 1&3: zie 2-Compartimentensysteem

$$\frac{dD_2}{dt} = -k_{23} \cdot D_2(t) + k_{12} \cdot D_1(t); \quad D_1(0) = D,\ D_2(0) = 0$$

$$D_2(t) = \frac{k_{12} D_1(0)}{k_{23} - k_{12}} \cdot (e^{-k_{12}t} - e^{-k_{23}t})$$

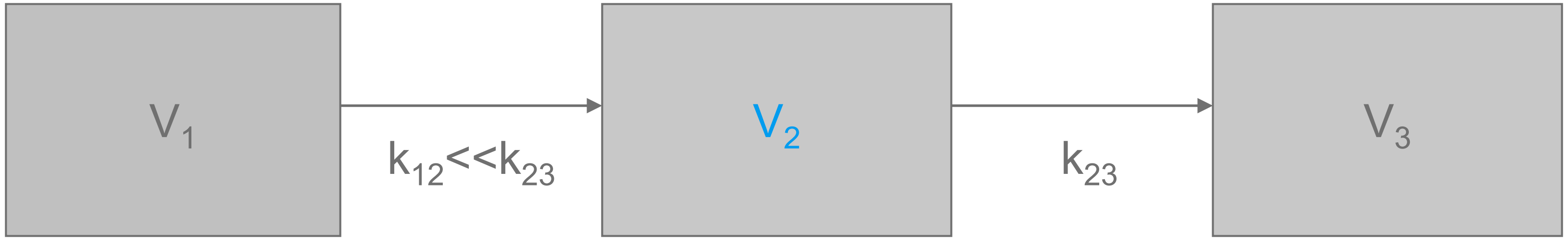
Grensgevallen compartiment 2 - I



- $T_{½,12} >> T_{½,23}$
- Indicatie verhouding: $k_{23} > 5k_{12}$
- Voor $k_{12}t << 1$ geldt dat toevoer uit compartiment 1 nagenoeg constant is: $K=k_{12}D$

$$D_2(t) = \frac{k_{12}D}{k_{23}} \cdot \left(1 - e^{-k_{23}t}\right)$$

Grensgevallen compartiment 2 - II



- Voor $k_{12}t > 1$ (òf $k_{23}t > \sim 2$) geldt dat de hoeveelheid in compartiment 2 verloopt met de overgangsconstante uit compartiment 1.

$$D_2(t) = \frac{k_{12} D_1(t)}{k_{23}} = \frac{k_{12} D}{k_{23}} \cdot e^{-k_{12}t}$$

- Bij $k_{23}t > \sim 2$: evenwichtssituatie (‘glijdend’ evenwicht)
- $k_{23}t > \sim 2$ correspondeert met $t > \sim 3T_{½}$ (comp 2 → comp 3)

Grensgevallen compartiment 2 - III

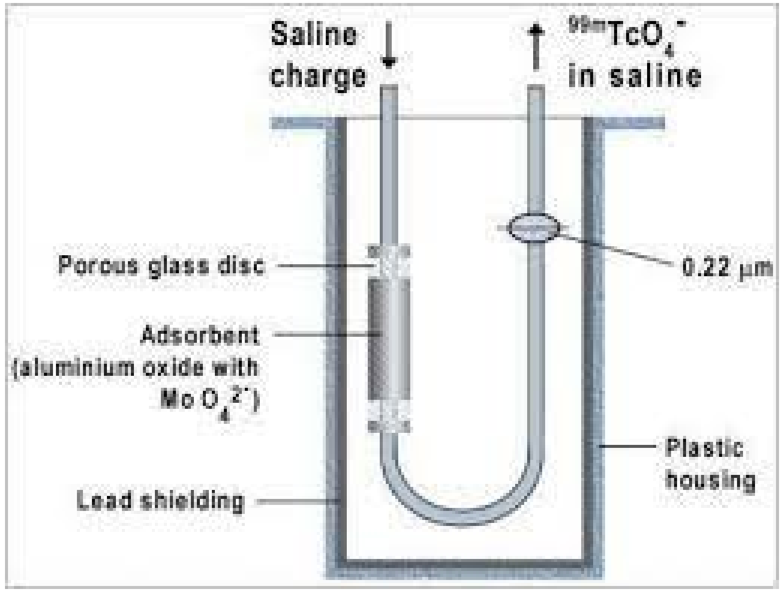
- Activiteit A is aantal deeltjes dat per tijdseenheid 'uitstroomt': activiteit $A_2 = k_{23} \cdot D_2(t)$
- Maar ook: $\frac{dD_2}{dt} = \underline{\underline{-k_{23} \cdot D_2(t)}} + k_{12} \cdot D_1(t)$
- In evenwicht geldt (zie ook vorige slide)

$$k_{23} D_2(t) = k_{23} \frac{k_{12} D}{k_{23}} \cdot e^{-k_{12} t} = k_{23} \frac{k_{12}}{k_{23}} D_1(t) = k_{12} D_1(t)$$

  - ofwel: d$D_2/dt \sim 0$
  - ➔ uitstroom uit compartiment 1 is gelijk aan uitstroom uit compartiment 2, ofwel
  - ➔ Activiteiten (s^{-1}) vd compartimenten gelijk: $A_1 = A_2$

$k_{12} << k_{23} \rightarrow T_{½,12} >> T_{½,23}$

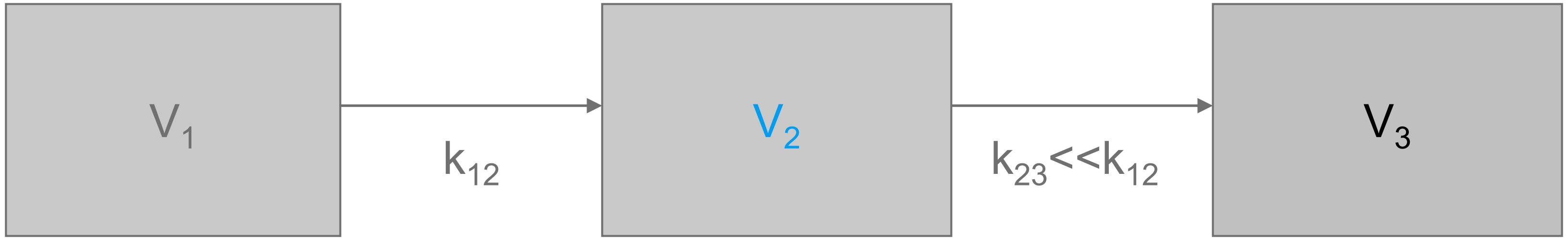
- Voorbeeld: Molybdeen → Technetium ($T_{½}$ = 66 uur)
  - Technetium → dochter ($T_{½}$ = 6 uur)



$k_{12} << k_{23} \rightarrow T_{1/2,12} >> T_{1/2,23}$

- Voorbeeld: Uranium → Dochter 1 ($T_{1/2}$ = 4,5 miljard jaar)
  - Dochter 1 → Dochter 2 ($T_{1/2}$ = 24 dagen)
  - Dochter 2 → …

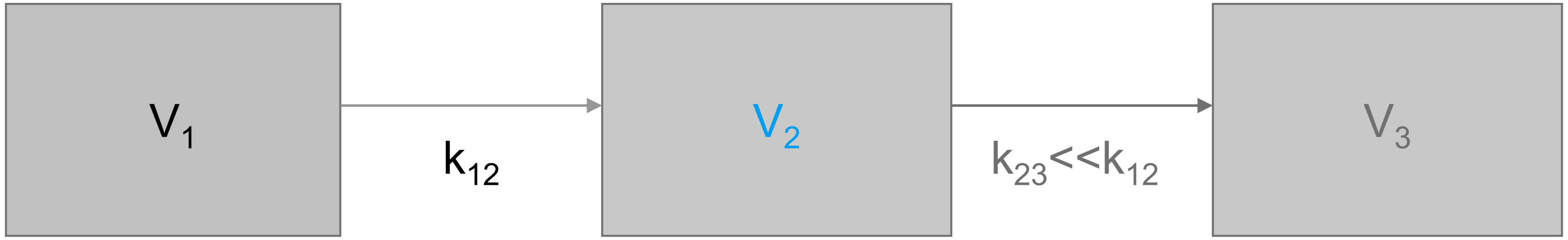
Grensgevallen compartiment 2 - IV



- $T_{½,12} << T_{½,23}$
- Voor $k_{23}t << 1$ geldt dat toevoer naar compartiment 3 nagenoeg verwaarloosbaar is
- Benadering door 2-compartimenten model (compartiment 2)

$$D_2(t) = D \cdot \left(1 - e^{-k_{12}t}\right)$$

Grensgevallen compartiment 2 - V



- Voor $k_{23}t > 1$ geldt dat compartiment 1 nagenoeg leeg is
- Is feitelijk 2-compartimenten model (nu compartiment 1)
- Zie b.v. fig. 2.3 in de syllabus

$$\Rightarrow \quad D_2(t) = D \cdot e^{-k_{23}t}$$

$k_{12} >> k_{23} \rightarrow T_{½,12} << T_{½,23}$

- Voorbeeld: slokdarm → maag ($T_{½}$ orde van seconden)
  - maag → darm ($T_{½}$ orde van een uur)

En verder…

- Ventilatievoud λ: het afgezogen volume per tijdseenheid / volume van de ruimte

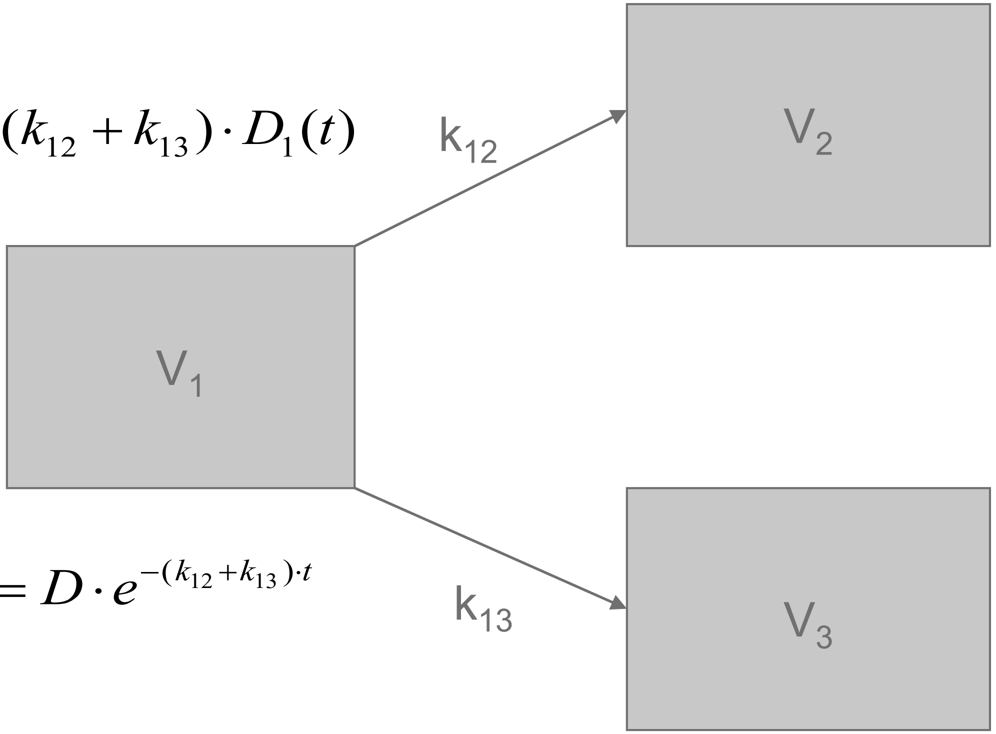
$$\Rightarrow \quad k_{12} = \lambda$$

- Halveringstijd: $T_{1/2} = \ln 2 / \lambda = 0{,}693 / \lambda$

- Gemiddelde verblijftijd in compartiment: $T_{gem} = {}^{1}/_{\lambda} = {}^{1}/_{k_{12}} = \dfrac{T_{1/2}}{\ln(2)}$
  - ook wel: ‘effectieve’ levensduur

‘2’-Compartimenten-systeem met 2 afvoerkanalen

$$\frac{dD_1}{dt} = -(k_{12} + k_{13}) \cdot D_1(t)$$



$$D_1(t) = D \cdot e^{-(k_{12}+k_{13})\cdot t}$$

$$\frac{D_2}{D_3} = \frac{k_{12}}{k_{13}}$$

‘2’-Compartimenten-systeem met 2 afvoerkanalen

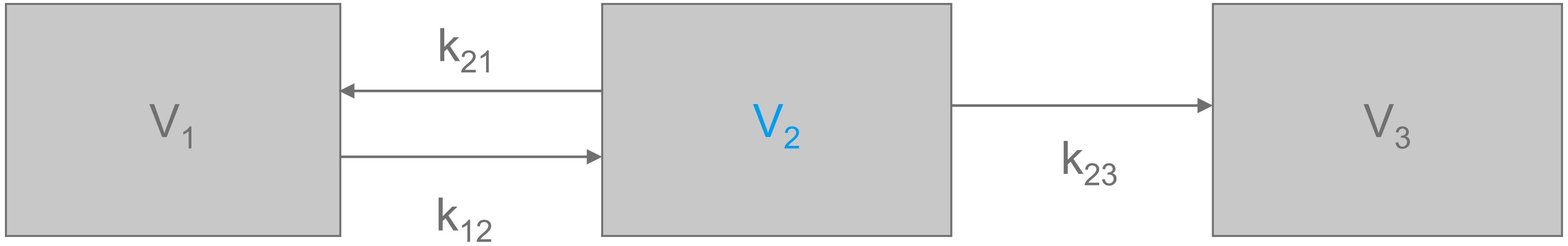
- De effectieve verwijderingsconstante is de som van de individuele verwijderingsconstantes.

$$k_{eff} = k_{12} + k_{13}$$

- De effectieve halveringstijd wordt dan:

$$\frac{1}{T_{1/2}^{eff}} = \frac{1}{T_{1/2}^{12}} + \frac{1}{T_{1/2}^{13}}$$

Niet behandeld, maar in toekomst wel belangrijk



Uitwisseling tussen compartimenten

als $k_{23}=0$ →
$$\frac{\mathrm{d}D_1}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{k}_{12}D_1 + \mathrm{k}_{21}D_2$$

$$\mathrm{k}_{12}\, D_1(\infty) = \mathrm{k}_{21}\, D_2(\infty)$$

$D_0 = D_1(t) + D_2(t)$ →
$$D_1(\infty) = \frac{\mathrm{k}_{21}}{\mathrm{k}_{12}+\mathrm{k}_{21}} D_0$$
$$D_2(\infty) = \frac{\mathrm{k}_{12}}{\mathrm{k}_{12}+\mathrm{k}_{21}} D_0$$