データ解析について（補足 2）

東京薬科大学生命科学部
生物情報科学研究室

速度式：$\begin{cases} \dfrac{df_N}{dt} = -k_1 f_N & \cdots① \\ \dfrac{df_I}{dt} = k_1 f_N - k_2 f_I & \cdots② \end{cases}$

保存則：$f_N(t) + f_I(t) + f_U(t) = 1 \quad \cdots③$

初期条件：$f_N(0) = f_N^0, \quad f_I(0) = f_I^0 \quad \cdots④$

のもとで解く．

微分方程式①の一般解は，変数分離法により $f_N(t) = C_1 \exp(-k_1 t)$（$C_1$ は任意定数）だから，条件④の第 1 式を代入すると $C_1 = f_N^0$．したがって初期条件を満たす①の特殊解は，

$$f_N(t) = f_N^0 \exp(-k_1 t) \quad \cdots⑤$$

⑤を②に代入すると，

$$\frac{df_I}{dt} = -k_2 f_I + k_1 f_N^0 \exp(-k_1 t) \quad \cdots⑥$$

が得られる．以下では定数変化法により，非斉次型微分方程式⑥を解く．

⑥に対する斉次型微分方程式

$$\frac{df_I}{dt} = -k_2 f_I \quad \cdots⑦$$

の一般解は，①のときと同様にして，$f_I(t) = C_2 \exp(-k_2 t)$（$C_2$ は任意定数）だから，定数 C_2 を t の関数 $C_2(t)$ で置き換えた

$$f_I(t) = C_2(t) \exp(-k_2 t) \quad \cdots⑧$$

が，⑥の一般解として表される．

$C_2(t)$ の関数形を定めるため，⑧を⑥に代入すると，

$C_2'(t)\exp(-k_2 t) - k_2 C_2(t)\exp(-k_2 t) = -k_2 C_2(t)\exp(-k_2 t) + k_1 f_N^0 \exp(-k_1 t)$ より，

$$C_2'(t) = k_1 f_N^0 \exp(-k_1 t)\exp(k_2 t) = k_1 f_N^0 \exp\big((k_2 - k_1)t\big)$$

両辺を積分すると $C_2(t) = \dfrac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1}\exp\big((k_2 - k_1)t\big) + C_3$ が得られるので，⑧に代入して，

$$f_I(t) = \left(\frac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1}\exp\big((k_2 - k_1)t\big) + C_3\right)\exp(-k_2 t) \qquad (C_3 \text{は任意定数}) \qquad \cdots⑨$$

が，非斉次型微分方程式⑥の一般解として与えられる．

⑨に条件④の第 2 式を代入すると，$f_I^0 = \dfrac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1} + C_3$ より，$C_3 = f_I^0 - \dfrac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1}$

したがって初期条件を満たす方程式⑥の特殊解は，

東京薬科大学生命科学部
生物情報科学研究室

$$f_I(t) = \left(\frac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1} \exp\left((k_2 - k_1)t\right) + f_I^0 - \frac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1} \right) \exp(-k_2 t)$$

$$= \frac{k_1 f_N^0}{k_2 - k_1} \left(\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t) \right) + f_I^0 \exp(-k_2 t) \quad \cdots ⑩$$

で表される．

最後に保存則③より，

$$f_U(t) = 1 - f_N(t) - f_I(t)$$

に式⑤，⑩の結果を代入すれば，$f_U(t)$ が求められる．