#032★★☆☆ 2022.2.12 / 2023.7.29

薬物速度論解析のためのラプラス変換（その２：モーメント）。

薬物速度論解析では、モーメント解析法と称し、血中濃度推移を統計分布とみなして曲線下面積（AUC, area under curve）、薬物分子の体内での平均滞留時間（MRT, mean residence time）などのモーメントパラメータが用いられる。ノンコンパートメント解析ともいう。実測値からは「台形法」により数値積分することでパラメータが算出できるが、ここでは血中濃度推移に関数近似した場合を考える。

0 次モーメント（関数を積分（面積）、AUC）、1 次モーメント（関数の平均値、MRT）は次となる。

$$AUC = \int_0^\infty C(t)dt = \lim_{s\to 0}\tilde{C}(s) \qquad MRT = \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}ln\left(\tilde{C}(s)\right)$$

例えば、$C(t) = A \cdot exp(-a \cdot t)$ （静注 1-コンパートメントモデル）のラプラス変換形は

$\tilde{C}(s) = A/(s+a)$ となり、定義より次が得られる。

$$AUC = \lim_{s\to 0}\frac{A}{s+a} = \frac{A}{a} \qquad MRT = \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}\{ln(A) - ln(s+a)\} = \lim_{s\to 0}\frac{1}{s+a} = \frac{1}{a}$$

また、$C(t) = A \cdot exp(-a \cdot t) + B \cdot exp(-b \cdot t)$ （静注 2-コンパートメントモデル）では次：

$$\tilde{C}(s) = \frac{A}{s+a} + \frac{B}{s+b}$$

$$AUC = \frac{A}{a} + \frac{B}{b}$$

$$MRT = \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}ln\left(\frac{A}{s+\alpha} + \frac{B}{s+\beta}\right) = \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}ln\left(\frac{s(A+B)+A\beta+B\alpha}{(s+\alpha)(s+\beta)}\right)$$

$$= \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}\{ln(s(A+B)+A\beta+B\alpha) - ln(s+\alpha) - ln(s+\beta)\}$$

$$= \lim_{s\to 0} -\left\{\frac{A+B}{s(A+B)+A\beta+B\alpha} - \frac{1}{s+\alpha} - \frac{1}{s+\beta}\right\} = \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} - \frac{A+B}{A\beta+B\alpha}$$

次のラプラス変換形（経口 1 -コンパートメントモデルに相当）では：

$$\tilde{C}(s) = \frac{a \cdot A}{(s+a)(s+b)} \qquad AUC = \frac{A}{b}$$

$$MRT = \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}ln\left(\frac{a \cdot A}{(s+a)(s+b)}\right)$$

$$= \lim_{s\to 0} -\frac{d}{ds}ln\{aA - (s+a) - (s+b)\}$$

$$= \lim_{s\to 0} -\left\{-\frac{1}{s+\alpha} - \frac{1}{s+\beta}\right\} = \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta}$$