

<Vol, page No.>

41, 521-524

<section>

Mathematical Models P

<English title>

Stochastic Models for Papilloma Formation Following Exposure to TCDD

<Japanese title>

TCDDへの曝露に続く乳頭腫形成の確率論的モデル

<Authors>

Elizabeth A. Brooks, Michael C. Kohn, Angelique P.J.M. van Birgelen, George W. Lucier, and Christopher J. Portier

<Keywords>

Biologically-based mathematical model, experimental data analysis, skin papilloma, rates in the process of formation of papillomas

<Japanese keywords>

生物学に基づく数学モデル, 実験データの解析, 皮膚乳頭腫, 乳頭腫形成過程の速さ

<Captions>

表1 経皮投与研究から得られた乳頭腫データへの二段階モデルのパラメータの適合

表2 経口投与研究から得られた乳頭腫データへの二段階モデルのパラメータの適合

<Summary>

生物学に基づく数学モデル (BBM) を用いて, 経皮投与実験と経口投与実験から得られた皮膚乳頭腫データの解析を行った. 乳頭腫の発生と死亡と変異との速さが, 時間にも依存する, 二段階モデルを用いた. 経口曝露実験から得られたパラメータは, 経皮投与実験の結果に対する適合は良くなかった. TCDDの予測皮膚濃度と乳頭腫の生成速度の関係は有意ではないという結果が得られたが, これは発生機構についての知見とは必ずしも合致せず, 今後さらに検討が必要である.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 525-528

<section>

Mathematical Models P

<English title>

Quantitative Structure/Activity Relationships for Laterally Chlorinated Dibenzo-p-Dioxins Using Spectroscopically Generated Molecular Geometry Parameters, Valence-Bond Approximations and Hydrophobicity Parameters

<Japanese title>

分光学的に生成された分子幾何パラメータと原子価結合近似法と疎水性パラメータを用いた，側面が塩素化されたジベンゾパラジオキシンの定量的構造活性相関

<Authors>

James Grainger, Jacqueline Lovingood, Patricia C McClure and Donald G. Patterson, Jr.

<Keywords>

QSAR, toxicity, molecular geometry parameters, hydrophobicity

<Japanese keywords>

定量的構造活性相関, 毒性, 分子幾何パラメータ, 疎水性

<Captions>

表1 側面が塩素化されたジベンゾパラジオキシンについての分光学的に生成された分子幾何パラメータと分画パラメータと毒性パラメータ

<Summary>

著者によるAbstract: フーリエ変換赤外線による分子幾何パラメータ，炭素13核磁気共鳴，および動物実験の毒性データを評価したところ，毒性のある，側面が四塩素化されたジベンゾパラジオキシンの，データが入手可能な化合物について，良い構造活性相関を示した．COC結合角，オキソニウムイオン性，シクロデキストリン修飾ミセル界面動電クロマトグラフィーから得られた疎水性パラメータおよびオクタノール水分配データと毒性の相関を取った．

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 529-532

<section>

Mathematical Models P

<English title>

MULTIVARIATE PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERISATION OF POLYBROMINATED
DIPHENYL ETHERS (PBDE)

<Japanese title>

ポリ臭素化ジフェニルエーテル (PBDE) の多変量物理化学的特徴付け

<Authors>

Mikael T Harju and Mats Tysklind

<Keywords>

physico-chemical properties, principal component analysis (PCA), partial least
squares (PLS) model, relative retention time (RRT), quantitative structure-property
relationship (QSPR)

<Japanese keywords>

物理化学的性質, 主成分分析法, 偏最小二乗モデル, 相対保持時間, 定量的構造物性相関

<Captions>

表1 計算された半実験的パラメータおよびQSARパラメータ, PCAモデルに入れたときの省略表
記付.

表2 最初の4つの主成分に基づく16計画水準への209のPBDE化合物の配置を示す2-4多元配
置. さらに8つの中心点を選択. IUPAC番号付けは文献10による.

図1 PBDE化合物の相対保持時間 (RRTs), 観測されたRRTs (非極性 CPSil-8カラム) を予
測されたRRTsに対して.

<Summary>

PBDE化合物について33種類の物理化学パラメータに対して主成分分析を行い, パラメータと化
合物の分類を行った. また, さらに偏最小二乗法を用いて, 31の化合物について, ガスクロマト
グラフィーにおける相対保持時間についての定量的構造物性相関 (QSPR) を定めた. このよう
な, 定量的構造活性相関 (QSAR) あるいはQSPRと組み合わせた, PBDEの評価のための新しい
戦略を, PBDEの環境挙動についての篩いがけに用いることを提案する.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 533-536

<section>

Mathematical Models P

<English title>

Physiological Modeling Prediction of Equivalent Skin Burdens from Oral and Transdermal Doses of TCDD

<Japanese title>

TCDDの経口および経皮投与における等価皮膚負荷量の生理学的モデル化による予測

<Authors>

Michael C. Kohn and Angelique P.J.M. van Birgelen

<Keywords>

conversion of an oral-dosing rat model to a skin-dosing mouse model, dermal, systemic, disposition, physiology and biochemical response

<Japanese keywords>

経口投与ラットモデルから皮膚投与マウスモデルへの変換, 皮膚の, 全身性の, 分配, 生理学および生化学的な応答

<Captions>

表1 一週当たり五日の経口投与90日後の肝臓対脂肪濃度比

表2 一週当たり五日の経口胃管投与26週後のTCDDの計算組織濃度 (pmole/g)

表3 一週当たり三日の局所皮膚塗布26週後のTCDDの計算組織濃度 (pmole/g)

<Summary>

すでに開発したラットでのTCDD体内分配モデルを, 生理学的パラメータをマウスのものに変え, また他のパラメータをマウスでの経口投与実験に基いて推定し, 経口投与および皮膚投与マウスモデルに変換した. これらのモデルを用いて両経路でさまざまな量の投与を行った場合の, 体のさまざまな部位の濃度を計算し, 議論した. 本研究の結果は, 種, 臓器, 曝露経路を超えて応答を予測する際のPBPK (生理学に基づく薬物動態学) モデルの有用性を示す.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 537-540

<section>

Mathematical Models P

<English title>

A QSAR STUDY OF SOME PCBs' LIGAND-BINDING AFFINITY TO THE CYTOSOLIC Ah RECEPTOR (AhR)

<Japanese title>

細胞質ゾルに存在するAh受容体へのいくつかのPCBの配位結合性のQSAR研究

<Authors>

David F.V. Lewis and Miriam N. Jacobs

<Keywords>

polychlorinated biphenyl, aryl hydrocarbon (Ah) receptor, quantitative structure-activity relationship (QSAR), area depth ratio, energy of the highest occupied molecular orbital

<Japanese keywords>

ポリ塩素化ビフェニル, アリル炭化水素受容体, 定量的構造活性相関, 面積深さ比, 最高被占分子軌道 (HOMO) エネルギー

<Captions>

表1 Ah 受容体へのポリ塩素化ビフェニルの結合のためのデータ

<Summary>

平面状および非平面状PCBのAh受容体への結合性の変動は, これら化合物の生物学的効力の重要な測度であるが, 平面性と分子の長さで最高被占分子軌道 (HOMO) エネルギーとを含む, 分子構造および電子構造のいくつかの因子と関係づけられた. これら3つの記述子で, 四塩化, 五塩化, 六塩化ビフェニルを含む14の化合物についての分散の90%を説明した.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 541-545

<section>

Mathematical Models P

<English title>

An Evaluation of EPA's ISCST -Version 3 Model Part 2. Deposition and Soil Concentration of Dioxins

<Japanese title>

EPAのISCST第3版モデルの評価 第二部 ダイオキシンの沈着と土壌中濃度

<Authors>

Matthew Lorber, Randall Robinson, Alan Eschenroeder

<Keywords>

United States Environment Protection Agency (US EPA), nonreactive Gaussian air quality dispersion model, the Industrial Source Complex Short Term Model (ISCST3) version 98226, polychlorinated dibenzodioxins and polychlorinated dibenzofurans

<Japanese keywords>

アメリカ合州国環境保護庁, 非反応性ガウス分布大気質拡散モデル, 複合工業発生源短期モデル 98226版, ポリ塩素化ジベンゾジオキシンおよびポリ塩素化ジベンゾフラン

<Captions>

表1 ISCST3沈着および土壌予測モデルの結果, 区分ごとの測定された土壌試料濃度を1992年と1994年とのいずれかの煙突試験を仮定したモデル濃度と比較(土壌濃度はpg/g, obs = 測定値; '92, '94 = 1992年および1994年の煙突試験結果を用いたISCLTの結果; "on-site"観測データは沈着の傾向を示していることは期待されていない - 詳細は本文を見よ)

<Summary>

USEPAのモデルISCST3, 98226版が, コロンバス都市ごみ焼却エネルギー回収施設付近のポリ塩素化ジベンゾジオキシンとポリ塩素化ジベンゾフランとの土壌中濃度をどの程度良く予測できるかを調べた. ISCST3による沈着計算値から, 単純な土壌混合モデルによって土壌濃度を算出した. 予測値は大部分が, 観測値の十分の一から十倍の範囲に入った. 高い煙突から放出されたダイオキシン類の挙動に影響を与える過程をより良く理解するために, 本研究が同様の調査が他所でも行われるきっかけとなることを希望する.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 547-552

<section>

Mathematical Models P

<English title>

An Evaluation of EPA's ISCST -Version 3 Model Part 1. Air Dispersion of Dioxins

<Japanese title>

EPAのISCST第3版モデルの評価 第一部 ダイオキシンの大気拡散

<Authors>

Alan Eschenroeder, Matthew Lorber

<Keywords>

United States Environment Protection Agency (US EPA), nonreactive Gaussian air quality dispersion model, the Industrial Source Complex Short Term Model (ISCST3) version 98226, polychlorinated dibenzodioxins and polychlorinated dibenzofurans

<Japanese keywords>

アメリカ合州国環境保護庁, 非反応性ガウス分布大気質拡散モデル, 複合工業発生源短期モデル 98226版, ポリ塩素化ジベンゾジオキシンおよびポリ塩素化ジベンゾフラン

<Captions>

表1 都市域監視局での総CDD/F濃度増加値の観測値とモデル計算値の比較 (total = 同族体濃度の和; on-site, airport = 現地および空港の気象データを用いたモデル計算結果)

表2 現地気象データをモデルへの入力に用いた場合のSE-3局での同族体および毒性等量濃度の観測値とモデル計算値の比較

<Summary>

USEPAのモデルISCST3, 98226版が, コロンバス都市ごみ焼却エネルギー回収施設付近のポリ塩素化ジベンゾジオキシンとポリ塩素化ジベンゾフランとの大気中濃度をどの程度良く予測できるかを調べた。予測値は観測値の十分の一から十倍の範囲に入り, 大部分の観測値については五十分の一から五倍の範囲に入った。高い煙突から放出されたダイオキシン類の挙動に影響を与える過程をより良く理解するために, 本研究が同様の調査が他所でも行われるきっかけとなることを希望する。

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 553-556

<section>

Mathematical Models P

<English title>

Molecular Modeling for Predicting the Toxicity of Dioxins Furans and PolyChloro Biphenyl (PCB) Compounds

<Japanese title>

ダイオキシンとフランとポリ塩素ビフェニルの化合物の毒性を予測するための分子モデル化

<Authors>

Pluton Pullumbi and Ivan Milosavljevic

<Keywords>

quantitative structure/activity relationships, halogen substituted dibenzo-p-dioxins and dibenzo-furans, PolyChloro Biphenyls (PCB), structural features, molecular properties

<Japanese keywords>

定量的構造活性相関, ハロゲン置換ジベンゾパラジオキシンおよびジベンゾフラン, ポリ塩素ビフェニル, 構造の特徴, 分子特性

<Captions>

図1 毒性対予測された毒性 (式1)

図1 毒性対予測された毒性 (式2)

<Summary>

著者のConclusions: 定量的構造活性相関手法 (QSAR) における遺伝関数近似 (GFA) 算法を用いて, ダイオキシンとフランの毒性を, これら化合物の構造および電子的特徴に相関づけた. トレーニングセットは, 実験的に毒性が知られているPCBを含めることで拡張した. 基本的な相関を確立した. 非常に低い毒性に関しては相関が相対的に不満足であった. より詳細な実験データおよび計算の洗練によって相関は改善され得ることが示唆された.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>

<Vol, page No.>

41, 557-560

<section>

Mathematical Models P

<English title>

Environmental Fate and Origin Estimation of Polychlorinated Dibenzo-p-Dioxins and Polychlorinated Dibenzofurans by the Dynamic Multimedia Environmental Fate Model

<Japanese title>

動的複媒体環境運命モデルによるポリ塩素化ジベンゾパラジオキシンとポリ塩素化ジベンゾフランの環境運命と起源の推定

<Authors>

Noriyuki Suzuki, Koji Tosa, Masashi Yasuda, Takeo Sakurai and Junko Nakanishi

<Keywords>

source, homologue/congener pattern, mechanistic model, fugacity level IV model, time trend

<Japanese keywords>

発生源, 同族体/化合物 パターン, 機械論的モデル, フガシティ 第四水準モデル, 時間変化の傾向

<Captions>

表1 ケースa, b, c, dにおける土壌および底質中の分解半減期のデータセット .

表2 ケースaにおける底質中PCDD/Fsの起源推定の相対比 .

表3 ケースbにおける底質中PCDD/Fsの起源推定の相対比 .

表4 ケースcにおける底質中PCDD/Fsの起源推定の相対比 .

表5 ケースdにおける底質中PCDD/Fsの起源推定の相対比 .

<Summary>

動的複媒体環境運命モデルにより, 底質中のポリ塩素化ジベンゾジオキシンおよびポリ塩素化ジベンゾフランへの都市ごみ焼却, PCPおよびCNP中の不純物の寄与の程度を推定した. モデルはフガシティ 第四水準モデルに基づいて開発した. 1965年, 1980年, 1995年, 2015年の計算結果より, 各起源の寄与の変動について議論した. モデルによる推定結果の有効性を確認するために, 土壌および底質中の半減期の値が結果に与える影響を調べた.

<Comments by translator>

<Translator>

桜井 健郎

<end>