

課題名 (タイトル) :

細胞シミュレーション統合プラットフォームを用いた細胞内現象の理解

利用者氏名 : ○須永 泰弘*、近山 英輔**、野田 茂穂*

所属 : * 情報基盤センター 計算工学応用開発ユニット

** 光量子工学研究領域 画像情報処理研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

次世代計算科学研究開発プログラムで開発した細胞シミュレーション統合プラットフォーム (RICS) を用いて様々な細胞現象をシミュレーションすることを目的とした。RICS は細胞内の空間構造を考慮し、場によって異なる生化学反応、物質拡散、膜機能を連成したシミュレーションを可能にした。本年度は肝臓細胞と血小板細胞をシミュレーションすることを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

RICS (Real world Image-based Cell Simulator) は、細胞内の場や複数のシミュレーションを連成するための共通基盤である。固定格子の空間内に細胞の形状モデルや反応モデルを構築し、様々な細胞反応のシミュレーションを可能とした。具体的には細胞を約 100 万個のボクセルに区画し、区画したボクセルに実測データより得られた細胞内の物質・物質の移動量・生化学反応などの情報を取り込みシミュレーションする。この RICS には、細胞内の生化学反応と物質拡散の連成解析、物質の膜透過、膜電位計算、移流拡散を弱連成の形式で連成解析する。RICS で計算可能な形状を作成するには 2 つの方法があり、一つは CAD を用いてポリゴンで近似した細胞・オルガネラ形状を作成し、RICS プリシステムにより RICS 用の形状モデルを構築する方法、もう一つは実際の顕微鏡から取得した 3 次元断層画像を元にオルガネラ等の形状を取り込む方法である。これにより、細胞の観察形状での反応をシミュレーションすることが可能であり、顕微鏡観察とシミュレーションを 1 対 1 で比較検証することを可能とした。細胞の反応にはこれまでの細胞シミュレーションにおいて実績のある E-Cell3 システムを使用し既存の生化学反応モデルを使用できるだけ

でなく、最近の生化学反応を記述する形式の中でディファクトスタンダードである SBML で記述されたものも直接 RICS で計算可能なソルバを RICS に実装した。

3. 結果

肝臓細胞の生化学反応モデルにエラーが出てしまい、RICS 上での動作まで行うことができなかった。血小板細胞は、反応と移流を組み合わせた計算を RICC から HOKUSAI への移植が完了し、計算することが可能となった。(図 1)

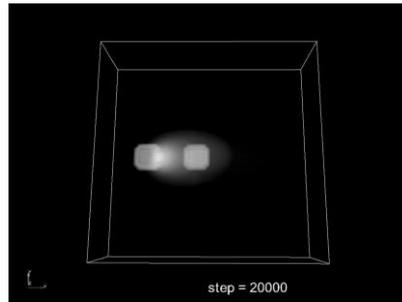


図 1 血小板細胞が直列に接着している場合の細胞間相互作用のシミュレーション結果

4. まとめ

肝臓細胞は準備に止まってしまったが、血小板細胞の計算は HOKUSAI を利用した計算を可能とした。

5. 今後の計画・展望

肝細胞の細胞内代謝モデルを早期に完成させ、HOKUSAI を使用した計算を行いたい。血小板細胞に関しては様々な条件での計算を行い、生体内での止血の仕組みに迫っていきたい。