

課題名(タイトル):

分子・細胞・組織の三次元動態をつなぐ多階層力学シミュレーション

利用者氏名:

○奥田 覚(1)

理研における所属研究室名:

(1)生命機能科学研究センター 形態形成シグナル研究チーム

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

組織・臓器の発生過程では、個々の細胞の増殖、分化、運動、および、力学・生化学的な機能変化が協調して進行する。これらの各素過程を制御する分子機構については多くの研究が行われ、細胞レベルの機能発現に関わる遺伝的因子や生化学反応ネットワーク等が解明されてきた。一方で、組織・臓器レベルの三次元的な構造形成を制御する力学機構については未知な点が多く、分子レベルの遺伝子発現と組織・臓器レベルの構造形成との間には大きな理解の隔りがある。そこで本研究では、多細胞の三次元ダイナミクスを記述する「汎用三次元バーテックスモデル」に対して、新たに、生化学反応ネットワークと力学-生化学変換の動態モデルを導入し、実験的に取得した定量データに基づいて、組織・臓器の形成過程における力学・生化学場を網羅的・定量的に予測する、新規の計算力学手法を開発する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

三次元バーテックスモデルの数値計算では、運動方程式の時間発展のための Euler 積分、速度場の連立一次方程式の解法のための収束計算、トポロジー変換計算の3種類の計算を行う。本研究では、この数理モデルを C 言語により実装し、OpenMP による並列計算を行う。そして、多細胞の大変形と細胞分化のパターニングとの力学・生化学カップリングによる形態形成の計算を行う。

3. 結果

三次元バーテックスモデルのアルゴリズムを C 言語により実装し、OpenMP による並列計算を行った。また、計算速度を向上させるため、アルゴリズムの改変を行った。

4. まとめ

組織・臓器の形態形成の機構を理解するため、三次元

バーテックスモデルを用いた数値計算の準備を行った。C 言語による実装を終え、実際の生物学的課題に対して適用するための準備が整った。

5. 今後の計画・展望

開発したシミュレータを用いて、多細胞の大変形と細胞分化のパターニングとの力学・生化学カップリングによる形態形成の計算を行う。この生体力学に基づいた解析により、細胞間相互作用の多体性、三次元性、多様性から生じる普遍的な力学原理が解明されると期待される。さらに、この計算工学と実験生物学の融合アプローチにより、分子機構から形態形成までを有機的に結ぶ、発生現象の新しい理解が得られると期待される。

6. 利用がなかった場合の理由

本研究では 2021 年 1 月よりスーパーコンピュータの利用を開始している。しかし、シミュレータのアルゴリズムの開発が遅れが生じたため、本年度の利用はほとんどなかった。一方で、今年度において、本課題のコアとなるシミュレータを開発したことから、来年度からは本格的な利用を開始する予定である。

2020 年度 利用研究成果リスト
該当なし