

プロジェクト名(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

組織や臓器の発生過程では、個々の細胞の増殖、分化、運動、そして機械的・生化学的機能が協調的に進行する。これらの素過程を制御する分子機構については多くの研究がなされ、細胞機能の発現に関与する遺伝因子や生化学的反応ネットワークが解明されてきた。一方、組織・臓器レベルでの三次元構造形成を制御する力学的メカニズムは未知であり、分子レベルでの遺伝子発現と組織・臓器レベルでの構造形成の間には大きな理解の隔りがある。本研究では、多細胞系の3次元ダイナミクスを記述する汎用3次元頂点モデルに、生化学反応ネットワークとダイナミクス-生化学変換の動力学モデルを導入し、多細胞系の3次元ダイナミクスを記述できるようにした。今後、実験的に得られた定量的データをもとに、組織・臓器の形成過程におけるダイナミクスと生化学場を包括的かつ定量的に予測する新しい計算力学的手法を開発する予定である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

3次元頂点モデルの数値計算では、3種類の計算が行われる。運動方程式の時間発展のためのオイラー積分、速度場の連立一次方程式を解くための収束計算、トポロジー変換の計算である。本研究では、この数理モデルをC言語で実装し、OpenMPを用いて並列計算を行った。そして、多細胞の大変形と細胞分化のパターニングの力学的・生化学的結合による形態形成の計算を行う。

3. 結果

3次元頂点モデルのアルゴリズムはC言語で実装され、OpenMPによる並列計算が行われた。また、計算速度を向上させるため、アルゴリズムの改良を行った。

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は、多細胞の大変形と細胞分化のパターン化の力学的・生化学的結合による形態形成の計算に使用される予定である。このバイオメカニクスに基づく解析により、細胞の多体性、三次元性、相互作用の多様性に起因する普遍的な力学原理が解明されることが期待される。さらに、この計算工学と実験生物学の統合的アプローチにより、分子機構と形態形成を有機的に結びつけ、発生現象の新たな理解をもたらすことが期待される。

6. 利用がなかった場合の理由

本研究では、2021年1月からスーパーコンピュータの利用を開始した。しかし、シミュレータのアルゴリズム開発の遅れにより、この年はほとんど利用されなかった。一方、今年度は本プロジェクトの核となるシミュレータを開発し、来年度から本格的な利用を開始する予定である。

2021 年度 利用研究成果リスト
該当なし