

高並列計算機によるマルチスケール・マルチフィジックス 心臓シミュレーション

-サルコメア力学から心筋細胞構造を経て心拍動にいたる 解析手法の開発と応用-

鷲尾 巧

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 人間環境学専攻

[アブストラクト]

心臓の収縮力の源は心筋細胞筋原線維内のサルコメアにおけるアクチン-ミオシンフィラメント間のATP分子をエネルギー源とする架橋運動であり、これは心筋の収縮率および収縮速度などマクロ的因子の影響も受けて変化する。さらに、心筋細胞およびその集合体も特殊な二次構造を有し、血液拍出機能に大きな影響を及ぼしていると考えられている。本講演では、京の計算能力を利用して、確率的な挙動を有するミクロスケール架橋運動、細胞集合体のメゾスケール二次構造の運動、および心筋のマクロスケール拍動運動を連成させて同時に解くマルチスケール解析手法について述べ、計算の結果明らかになりつつあるこれら異なるスケール間のモデリングや現象の関係について紹介する。

[キーワード]

心臓シミュレーション, マルチスケール解析, モンテカルロ法, 有限要素法, 興奮収縮連関

[講演要旨]

生体は、根本的には分子間の相互作用を基本として成り立っているミクロのシステムである。生体の構成要素である心臓は、図1に示すようにエネルギー源となるATP分子を生成する生化学反応を原点として、電気(イオン電流, 興奮伝播, 心電図など)・化学(物質輸送, 反応, エネルギー変換など)・力学(心筋張力, 血圧, 血流など)の諸現象に広く派生するマルチフィジックス問題を構成する。また空間尺度としては、タンパク分子(~10nm)から細胞(~100μm), 組織(~mm), 臓器(~cm)を経て血液拍出に至るマルチスケール問題を構成している。

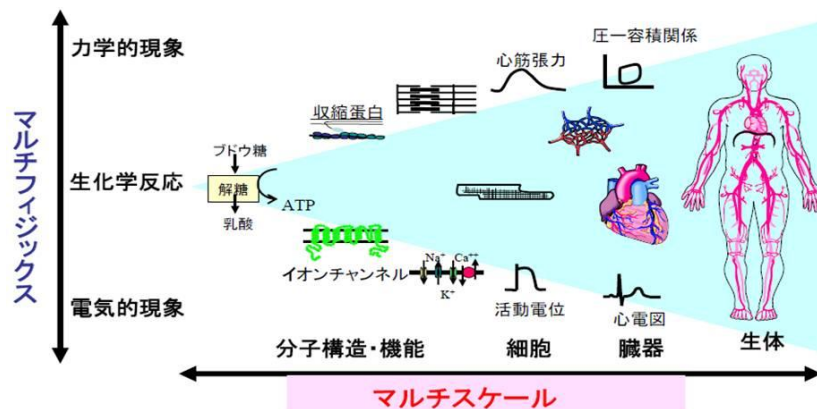


図1 心臓のマルチスケール・マルチフィジックス現象

臨床で日常的に用いられる心電図や血圧などのマクロ現象については古くから多くの医学・生理学的研究がなされてきたが、一方で近年著しい発展を続ける分子生物学によるマイクロレベルの知見との因果関係は、その間に大きなスケール差と複雑な相互作用を介したブラックボックスが介在しているため、もはや専門家にとっても明らかでなく、両者を合理的に説明し予測することは困難な現状に立ち至っている。

現在、我々はスーパーコンピュータ“京”において、図1上半分にあたる収縮タンパクの分子間相互作用の法則から統計物理学とNewton力学をその拠り所にしてマクロシステムとしての心臓の拍動を再現するマルチスケール解析を実行し、マイクロシステムの特性とマクロシステムとしての心機能の関係を明らかにする研究に取り組んでいる。京の利用を契機として、これまで困難であった分子結合状態の変化を合理的に追うことができる平均場モデルの構築や心筋組織の力学的構造を正しく反映するマクロ的力学モデルの構築などを経由することなく、図2に示すように各スケールの生化学的および力学的特性をありのままに計算に反映することのできる心拍動解析コードを開発した。

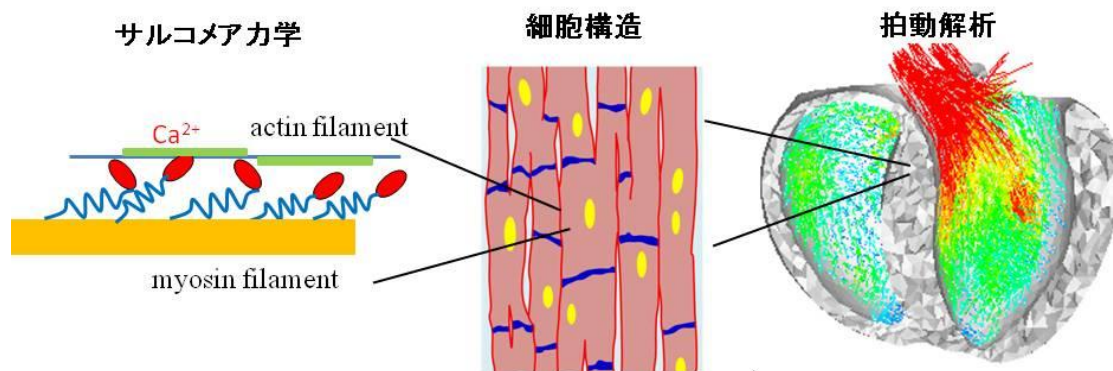


図2 心拍動のマルチスケール解析

この解析法の実現により、分子レベルでの状態変化の法則および細胞組織レベルでの各構造体が心臓の拍動性能やエネルギー消費に関わる効率にどのような影響を与えているのか、逆にマクロ的な筋肉の変形がフィードバックされて分子レベルでの状態変化にどのような影響をもたらしているのかなどをシミュレーション結果を通して解析することが可能となった。現在は、このようなコードの特性を活用して心肥大症メカニズムの解明などの課題に取り組んでいる。本講演では、上記マルチスケール解析手法のしくみ、京の一部を利用して取り組んでいる現状の試験的解析例の問題サイズおよび計算時間、将来的に取り組みたい問題規模、さらにこれまでに行った解析事例の紹介を行う。