

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**, 七澤 洋平**, 岡 秀樹**, 荒井 雅貴**

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

<p>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</p> <p>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肝小葉をシミュレーションすることを目的とした。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>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量・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</p>	<p>でなく、最近の生化学反応を記述する形式の中でデ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。</p> <p>3. 結果</p> <p>肝細胞の計算を RICC を用いて行うために、細胞内反応の EML モデルを RICS で利用可能なモデルへの変更を行った。しかしながら、モデルの変更に伴って、反応経路モデルの破綻がおり、原因を特定するために非常に時間が必要となってしまった。原因の特定はほぼ終わり、移植作業もほぼ終了した。</p> <p>4. まとめ</p> <p>肝細胞の計算を行う準備を行った。残念ながら RICC を利用した計算は当初の予定通り行うことができなかった。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>肝細胞の細胞内代謝モデルを早期に完成させ、RICC を使用した計算を行いたい。特に肝小葉での血流との連成計算には計算コストがかかるため RICC を利用させていただきたいと考えている。</p> <p>6. 利用がなかった場合の理由</p> <p>肝細胞の細胞内代謝モデルの構築に非常に時間を有しており、RICS を使用した大規模計算を行うことができなかったため。</p>
--	--