

## (2)細胞スケール解析チーム

- チームリーダー:川崎学園・岡山大・医学部 教授 梶谷文彦
- 協力研究者所属機関:  
慶応、京大、阪大、神戸大、東海大

## 研究の目的

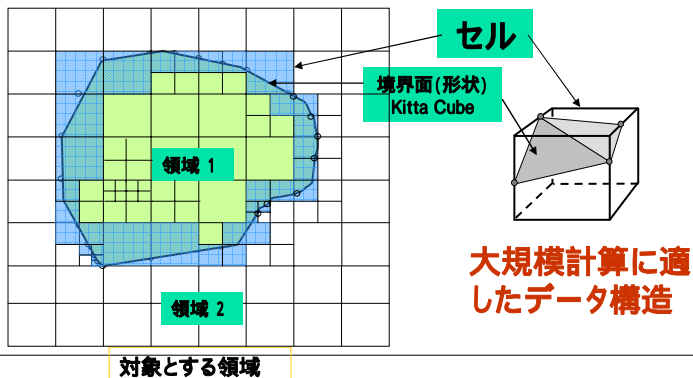
- ・生命の最小単位である細胞を対象に、生きている細胞内の現象を再現する統合シミュレーションを実現
- ・各種事象に特化した各種細胞シミュレーションを、細胞内の場(形状、コンパートメント)を基準に統合
- ・細胞内のオルガネラ、膜の不均一性、濃度勾配などを考慮したシミュレーションにより、より精緻な細胞内シミュレーションを実現

## シミュレーションを統合する仕組み

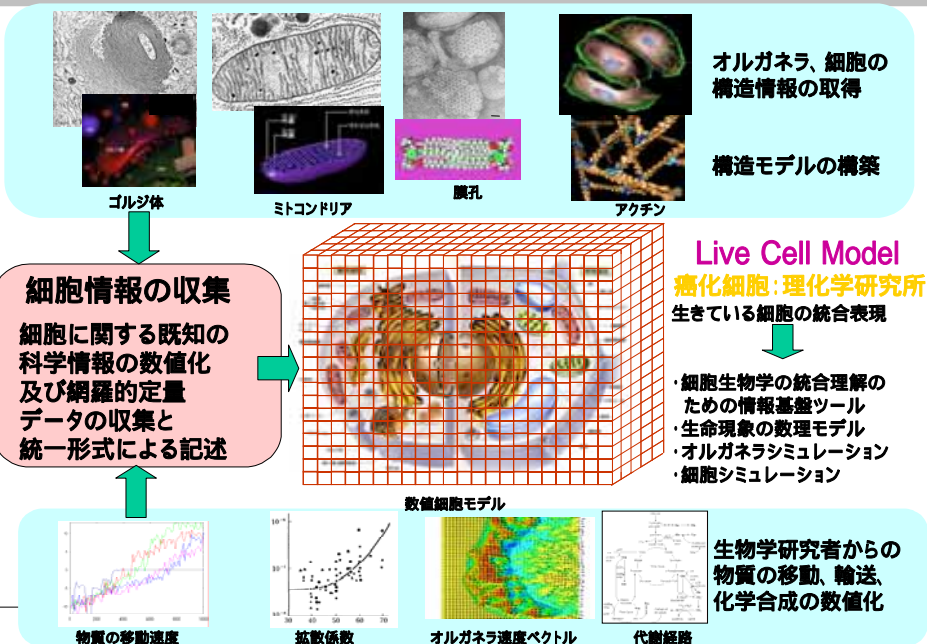
### VCADモデル(理化学研究所)

#### 細胞をセルを単位に完全に離散化表現

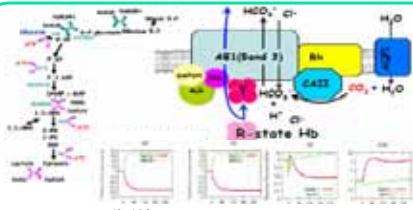
- (1)外形形状、(2)内部構造、(3)物性分布、  
(4)場の方程式を解くためのメッシュを持つ



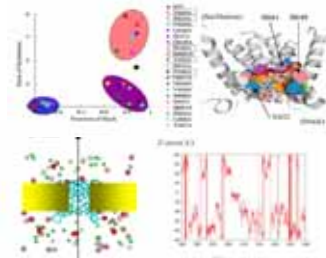
## 細胞の統一表現空間: Live Cell Model



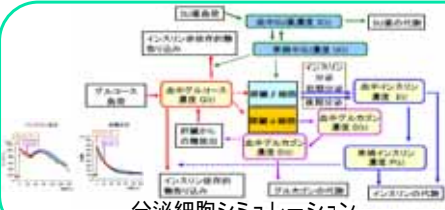
# これまでの各種細胞のシミュレーション



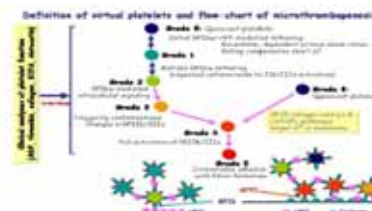
代謝シミュレーション



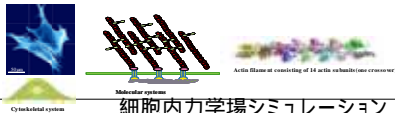
イオンチャネルシミュレーション



分泌細胞シミュレーション



血小板凝集シミュレーション



細胞内力学場シミュレーション

細胞内座標空間による  
統合シミュレーションの実現

分化細胞モデル

Live Cell Model

分化細胞モデルの構築  
個別シミュレーションの拡張  
異種シミュレーション連成解析

局所シミュレーション

細胞モデル構築基盤研究

物質の移動速度

統合シミュレーションへの支援研究

拡散係数

オルガネラ速度ベクトル

代謝経路

## 克服すべき課題

- 各種分化細胞モデルの構築
- シミュレーションのスケール
  - 直径20  $\mu\text{m}$ の細胞を20nm格子にて記述:10億Voxel(1TB)
    - 100nm格子にて記述:8百万Voxel(約8GB)
  - 1分裂周期(18hr)を10分間隔で記述:180TB
    - 1分裂周期(18hr)を30分間隔で記述:約300GB
  - 8分木の場合簡略化が可能:利用目的により粗密を制御
    - 1/1000の容量で記述可能(1  $\mu\text{m}$ を1nmに再分割)
- 膜の取り扱い
  - セル内面を均一な膜とし、チャネルの存在確率、透過率で記述
- 各シミュレーションの計算コストの増大
  - 精緻なシミュレーションの開発により、計算コストが増大
  - 場を考慮すると、計算コストは飛躍的に増加
- 異種シミュレーションの連成解析