

実用化を目指すマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ

久田 俊明

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]

東京大学では 2001 年より計算科学(久田)と医学(杉浦)の学融合により心臓シミュレータの開発が行われてきた。2003年-2008年はJST CRESTの下で「医療・創薬のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの開発」が行われ、2007年からはJST 産学共同シーズイノベーション化事業・育成ステージの下で富士通(株)次世代テクニカルコンピューティング開発本部アプリケーション開発統括部(門岡統括部長)と共に「心臓シミュレータの医療への実用化研究」が進められている。当チームによる心臓シミュレーション研究の現状と意義を説明する。

[キーワード]

心臓シミュレーション、マルチスケール・マルチフィジックス、有限要素法、流体構造連成解析、並列計算

[講演要旨]

心臓の活動の根元をなすのは純粋な生化学反応であるが、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(〜数10nm)から細胞(〜100 μ m)、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。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、一方でミクロ事象との因果関係は、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、個々の知見を有機的に活用して理解し予測することは困難な現状に立ち至っている。従ってマルチスケール・マルチフィジックス問題を正面から取り扱うことの出来る計算科学の実現は医学・医療の現場からの要請ともなっている。以上の観点から、筆者らのグループはマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの開発を行ってきた。本シミュレータは次のアプローチをとることを特徴とする。

(a) 細胞膜のイオンチャンネル、イオンポンプ、トランスポーターなどの分子機械の作用に基づく細胞内イオン環境のダイナミクスを記述する電気生理学モデル、並びにイオンにより制御される細胞内収縮タンパクであるアクチン・ミオシン間のクロスブリッジ運動を記述する興奮収縮連関モデルを内蔵した細胞から出発し、組織、臓器を経て最終的な血液拍出に至る心機能の全過程を相互作用を含め合理的に数理化しシミュレートする。

(b) その際現れる、大規模な電気・化学・力学現象のマルチフィジックス問題を非線形有限要素法をベースとする計算科学手法を用いて正面からシミュレートすることにより根拠のない省略や単純化、仮定を排除し、医学・生理学からの疑問に厳密に答を与えられるモデルを目指す。例えば心筋組織と血液の力学的連成はALE流体有限要素を用いた境界面追跡型手法により解析し、一方心臓弁に対しては、運動するALEメッシュからLの境界面捕捉型手法を適用する。これによりはじめて心臓内の血液の流れの詳細を知ることが出来る。

(c) 内部構造を有限要素法で再現した形ある細胞モデルを世界に先駆けて開発し、これを經由してミクロ現象とマクロ現象をシームレスにつなぐマルチスケールシミュレーションを、独自の均質化法を開発することにより、達成する。

正常或いは病態を再現した心臓のシミュレーションやその治療例を示す。