

## 血流と血球細胞の流体力学と細胞接着の連成シミュレーション

高木 周\*, 清水和弥\*, 伊井仁志\*\*, 塩崎聖治\*\*\*, 後藤信哉\*\*\*, 杉山和靖\*\*

\* 東京大学 大学院工学系研究科 [〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1]

\*\*大阪大学 大学院基礎工学研究科, \*\*\*東海大学 医学部

### 1. 緒言

生体の基本要素は細胞である。生命の本質を理解するためには、細胞レベルのモデルから生体全体を理解する必要がある。また、疾患のメカニズム解明や薬剤による治療を考えた場合には、分子生物学的知見を如何に病態に結びつけるかが極めて重要となる。すなわち、タンパク質、細胞レベルから器官・臓器までを結びつけるマルチスケールモデルを構築することが重要となる。本講演では、タンパク質レベルの相互作用から細胞スケール、さらに連続体としての血流や筋肉までを結びつけるための手法について説明する。具体的には、循環器系疾患を再現するマルチスケールシミュレーションの例として、血栓症の初期過程である血小板粘着現象について解析する計算手法について紹介する。

### 2. 血小板粘着プロセスのモデリング

動脈硬化巣への血小板粘着を再現するため、血管壁上のフォンヴィレブランド因子(VWF)分子と、血小板表面の GPIb $\alpha$  分子の間のタンパク質分子間の相互作用をモンテカルロ法で計算しながら、有限差分法に基づくオイラー型流体構造連成計算手法と連成させる手法の開発を行った。この手法では、血流中を流れる多数の赤血球や血小板などの血球細胞については、流れ場と相互作用して変形しながら流れていく状態を流体構造連成問題と

して詳細に解く。血小板については、膜表面の GPIb $\alpha$  分子と血管壁の VWF 分子の分子間相互作用力を分子動力学シミュレーションにより評価し、GPIb $\alpha$  分子と VWF 分子の結合・乖離を遷移状態理論に基づいてモンテカルロ法により計算する。この結果を、血小板と壁面の間に働く力として、造連成の計算の中に取り込んで連成させて解くことにより、血小板の壁面吸着まで取り込んだマルチスケールシミュレーションが達成される。

### 3. 結果

計算手法の詳細は文献[1]を参照のこと。ここでは、この手法を用いて、血管の一部に動脈硬化巣を想定した凸部があるとし、その形状の違いにより血小板粘着現象にどのような差異が生じるかをシミュレートした結果を図に示しておく。

### 謝 辞

本研究は、文部科学省、HPCI 戦略プログラム分野 1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」及び、ポスト「京」の開発重点課題(2)「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」の支援を受けている。

### 文 献

- 1) 高木周 (分担) : 岩波講座計算科学 4 「計算と生命」, 第 5 章「人体シミュレーション」, 中村春木 他編, 岩波文庫, 2012, pp. 169-210.

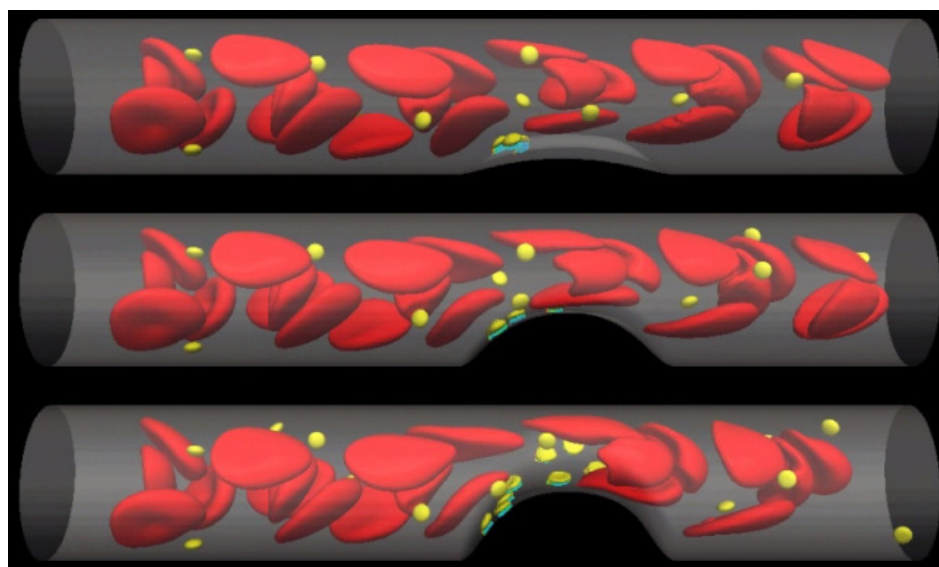


Fig. 1 血小板粘着現象に対する動脈硬化巣の形状の影響に関するシミュレーション