

## 京都大学 計算科学ユニット 第7回研究交流会

題名： 生命現象のモデリング

日時： 2013年4月22日（月）13:30～16:00

場所： 工学部3号館北館2階 N3 講義室

[http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/access/campus/map6r\\_y.htm](http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/access/campus/map6r_y.htm) (62番)

世話人： 山本量一先生（京都大学 工学研究科）

**講演1** 13:30～14:45（質疑応答）

**講師：**義永那津人先生（東北大学 WPI-AIMR 数学ユニット）

**題目：**細胞の力学と、人工システムにおける自発運動

概要：本講演では、細胞運動を理解するために我々が取り組んでいる二方向の試みを紹介したい。一つは、細胞骨格やストレスファイバーの力学について、もう一つは化学反応を使って自発的に運動する液滴、つまり人工的な系である。将来的には、細胞運動における細胞内部のダイナミックな変化と運動、そして細胞の形状についての普遍的な関係について明らかにすることを目指している。(i) 分子モーターや他のタンパク質によって架橋されたアクチンの束は、ATP の存在下、レーザーによって切ることによって、また細胞から単離することによって収縮することが知られている。我々は、この収縮の時間スケールが、アクチンフィラメント間を、結合解離を繰り返しながらダイナミックに架橋するタンパク質による実効的な摩擦によって決まると考えている。理論的に、いくつかの物理的メカニズムを考察し、バンドルの太さなどを変えることによって時間スケールの起源が移り変わることを議論する。(ii) 最近、self-propulsion と呼ばれる自発的運動について注目を集めている。細胞は、外からの力によって運動しているのではなく、内部構造の変化によって形を変えながら自発的に対称性を破って方向性を持った運動をしている。ここでは、化学反応によって駆動される自発的に運動する液滴について、その形状と運動性の相関について議論する。細胞のような非常に複雑なものをモデル化するための可能性についても考察したい。

**講演2** 14:45～16:00（質疑応答）

**講師：**高橋恒一氏（理化学研究所 生命システム研究センター）

**題目：**細胞環境下での生化学反応ネットワークシミュレーション

概要：細胞内生化学反応ネットワークのシミュレーション技術は、システム生物学や合成生物学における細胞の挙動のモデル化、予測、設計に不可欠であり、次世代の生命科学の一翼を担うものと考えられます。近年、レーザー顕微鏡をはじめとする高度な測定技術の発展により細胞内の微小環境において高分子が機能を発揮する様子を1分子レベルで直接観察する事が可能になり、これと対応する1分子粒度でのシミュレーション技術が求められ

るようになりました。「細胞環境」の特異な特徴である細胞内巨大分子混雑、分子の少数性、細胞骨格やゲノムによる空間の構造化、局在やクラスター化、構造多型、力学＝化学カップリングなどの諸要素を取り込んだシミュレーションモデルを構築するためには、これまでの分子／生化学シミュレーションの基礎となってきたスモルコフスキーの反応動力学理論や化学マスター方程式などが仮定する均一で希釈された溶液などの理想条件からかけ離れた系を扱う必要があり、モデル化の面でも計算量の面でも大きなチャレンジが存在します。今回は哺乳類細胞の MEK MAPKK による ERK MAPK の二重リン酸化反応モチーフを例に取り、この反応モチーフの大局的な入出力応答が、分子運動の局所的な時空間相関、細胞内分子混雑、また細胞膜上での酵素の局在などにより大幅に変化する事を示します。また、この変化が酵素＝基質再結合の促進を通じて反応様式が分配的と呼ばれる機構から連続的と呼ばれる機構に質的に変化している事に由来するものである事を議論します。