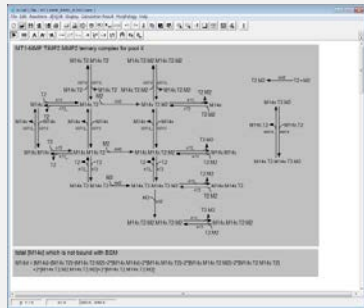


A-Cell

4D細胞シミュレーションのためのソフトウェア

Pathway

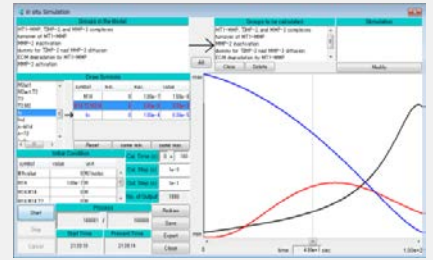
A-Cellは生化学反応式を紙に描く感覚でモデルを創ります。生化学反応式は細胞内プロセスとして最も研究が確立されており、しかも実験からパラメーターを得ることができるので、シミュレーションと実験の直接比較ができます。A-Cellではパスウェイのモデルに加えて方程式、刺激、膜電位のモデルを創ることができます。



In situ simulation

モデルをすぐにシミュレーションしてそのまま結果を表示する機能があるので、プログラムは不要です。最近のPCの性能は高いので、この方法で多くのシミュレーションを実行できます。高速化が必要な場合はA-Cellにプログラムを自動生成させられることができます。このように、プログラムの専門的知識がなくても使えます。

シミュレーションを行うにはプログラムが必要ですが、A-Cellには創った



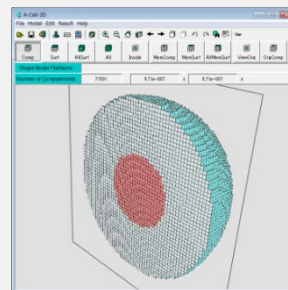
パスウェイシミュレーションは時間に対する濃度の変化を計算します。しかし細胞は3次元空間に広

4D

がる実体です。この中では時間に伴う変化だけでなく、場所による違い(局在)があり、これが細胞の機能発現に重要な役割を果たします。つまり細胞シミュレーションでは時間+3次元空間の4次元シミュレーションが本質的に重要です。A-Cellを使えば簡単に4次元シミュレーションを行うことができます。

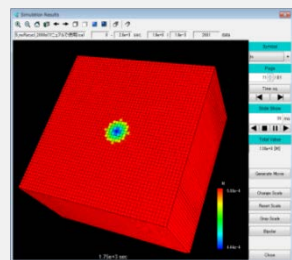
Shape

4Dシミュレーションを行うためには、細胞の3次元の広がりモデル化できなければなりません。A-Cellでは球、円筒、直方体などの単純



な形だけでなく、神経細胞の樹状突起とスパイン、また核もモデル化することができます。こうしてモデル化された形は小さな直方体に自動的に分割され、それによって空間的な非均一性をシミュレーションすることができます。しかし核内だけに存在する反応

は、核内だけに割り付けなければなりません。A-Cellを使えば、このような局所的な反応式の割付けを簡単にを行うことができます。



Movie

4Dシミュレーションの結果はかなり複雑になるの

で全体像をつかむのは簡単ではありません。しかしmovie表示をすれば時空間変化の様子を直感的に捉えることができます。A-Cellでは時空間シミュレーションの結果を簡単にmovie表示することができます。これによってその後の詳細な解析につなげることができます。

この結果を簡単にmovie表示することができます。これによってその後の詳細な解析につなげることができます。

A-CellはノートPCでシミュレーションを行うことができます。複雑なモデルの場合はシミュレーションに時間がかかるので、高速なPCが必要ですが、A-Cellを使って、どの程度の計算機が必要かを見積もることができます。

Computer



活用

第一の活用先は創薬です。A-Cellを使えば新規ターゲットの推定や検証ができるだけでなく、薬剤の必要性能や最適投与プロトコルを導き出すことも可能です。安全性の検査にも活用できます。一方、最近の論文では、機能解析したタンパク質の全体像を示す図が掲載されます。基礎研究分野では、このような図を基にしてA-Cellでモデルを創り、研究対象となったタンパク質の機能確認に活用することができます。これによって思考に抜けがないかをチェックすることができます。教育分野では、卒業研究、修士課程研究、博士課程研究に活用できます。

A-Cellエディション

- フリー エントリー 無償 (ホームページからダウンロード)
- ベーシック 5万円
- スタンダード 8万円 (いずれも税抜価格)

株式会社 True Cell Simulations

〒107-0052
東京都港区赤坂2-16-6 BIZ MARKS赤坂
03-6868-5430
<http://tc-simulations.com/homepage/>
contact@tc-simulations.com