

RICS-K: 細胞シミュレーション統合プラットフォーム プリシステム

独立行政法人 理化学研究所
情報基盤センター
HPCI計算生命科学推進プログラム
須永 泰弘



2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

1

本日の講義内容(再掲)



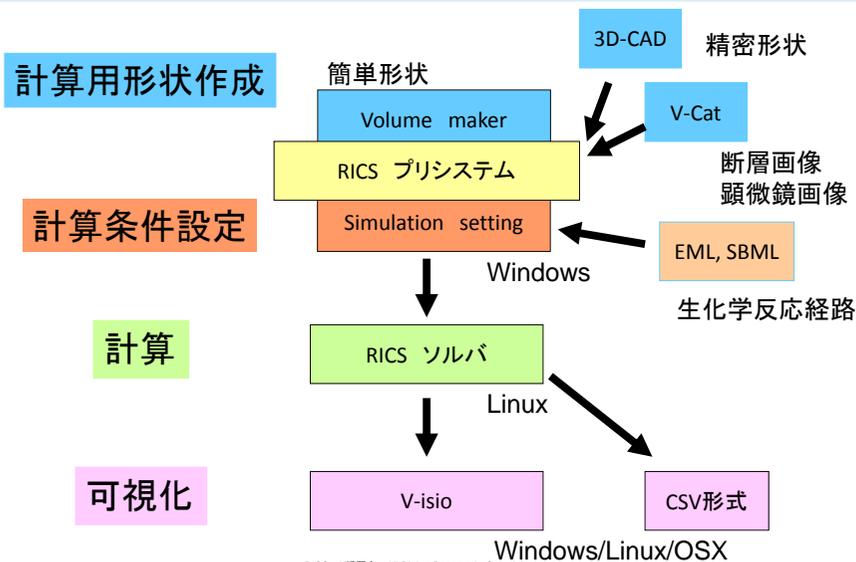
1. RICS-Kの概要 (30分)
2. RICS-K プリシステムを使用した計算準備(1時間)
(質問および休憩:30分)
3. RICS-Kによる計算と計算結果の可視化方法(1時間)

2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

2

RICSシステムの全体構成図



2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

3

必要とする設定ファイル



- (1) 形状ファイル → ソフト: 3D-CAD, VCAT, RICS-Pre
細胞形状や血管形状のデータファイル
- (2) 化学反応設定ファイル → ソフト: ECell-IDE, Cell Illustrator
EMLもしくはSBML形式で記述した反応ファイル
- (3) RICS計算ファイル → ソフト: RICS-Pre
拡散、移流、膜電位、物質濃度などの設定
並列数、計算時間、ソルバの選択などの設定

2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

4

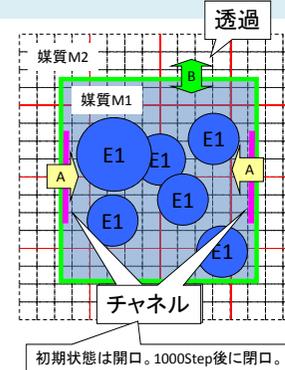
RICSソルバの主な入出力データ



RICSソルバは計算条件として、必要に応じて以下のデータを入力する(抜粋)

	名称	データ形式	備考
入力	計算条件ファイル (Configuration File)	XML	計算領域サイズ、時間ステップ、媒質毎の代謝、媒質、物質等の定義。物質の拡散係数の指定。出力の定義。etc...
	EML, SBML	EML, SBML	反応計算条件ファイル
	媒質の体積率、面積率データ	SVX	バイナリデータ。各媒質(オルガネラ等)毎に指定する。
	物質の初期濃度(局在)	SPH	初期状態として、物質の濃度が分布を持つ場合に指定。媒質で均一な場合は、計算条件ファイルで指定が可能。
	膜の局在	SPH	チャンネル等の膜機能について、局在を指定したい場合にSPHを使用する。ソルバが媒質データ(SVX)から膜の位置を計算する。その膜とSPHの交わる所に指定した膜の
出力	物質濃度(場のデータ)	SPH	指定計算Step毎にファイルを出力。V-Isioで3次元アニメーションが可能。
	物質濃度(指定点の数値)	csv	指定座標の指定計算Step毎の数値をテキストで出力(probe機能)

サンプルデータ(概要)



Aが媒質M1とM2の間の膜のチャンネルを通過してM2からM1へ流入。流入したAが分布しているE1と反応してBに変化(E1は拡散しない)。BはM1内を拡散し、膜透過により、M2へ拡散していく。1000Stepでチャンネルが閉口し、物質Aの流入が停止。

モデル概要:

空間領域: 立方体の媒質M1(内側),M2(外側)から構成される空間

[初期濃度]

- 触媒E1は媒質M1(内側)の空間にばらばらに局在
- 物質Aが媒質M2(外側)の空間に均一に分布

[膜条件]

- チャンネル(物質A)が側面の両側の膜中央に局在。物質Aを通ず(初期状態は閉口。1000Stepで閉口。)(APIを使用)
- 膜全体で物質Bが透過。

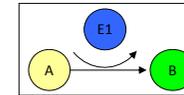
[代謝]

- E1を触媒として、AがBへと変化する。

その他計算条件

- 1500Step

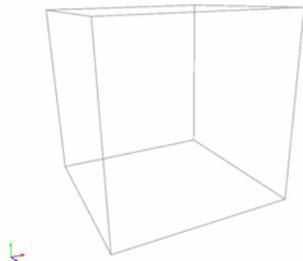
媒質M1の代謝系(mat1.eml)



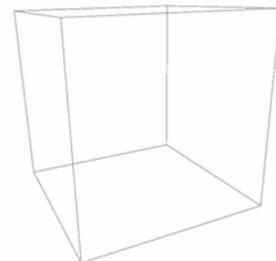
サンプルデータ(計算結果1)



Aが媒質M1とM2の間の膜のチャンネルを通過してM2からM1へ流入。流入したAが分布しているE1と反応してBに変化(E1は拡散しない)。BはM1内を拡散し、膜透過により、M2へ拡散していく。1000Stepでチャンネルが閉口し、物質Aの流入が停止。



媒質M1 物質A



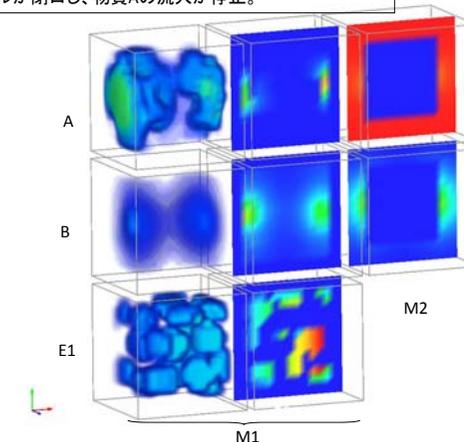
媒質M1 物質B

V-Isioを使って可視化:shaderVolren

サンプルデータ(計算結果2)



Aが媒質M1とM2の間の膜のチャンネルを通過してM2からM1へ流入。流入したAが分布しているE1と反応してBに変化(E1は拡散しない)。BはM1内を拡散し、膜透過により、M2へ拡散していく。1000Stepでチャンネルが閉口し、物質Aの流入が停止。

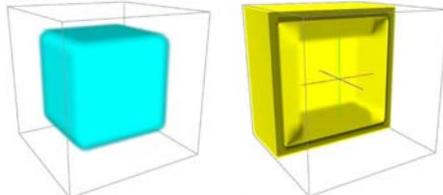


V-Isioを使って可視化: shaderVolren orthoScalar

入力データ(SVX,SPH)

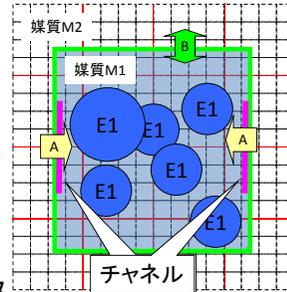


SVX 形状データ(体積率、面積率)



内側の媒質(M1.svx)

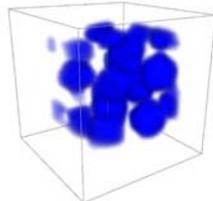
外側の媒質(M2.svx)(断面表示)



チャンネル

SPH 物質濃度データ

局在を指定したい時に使用

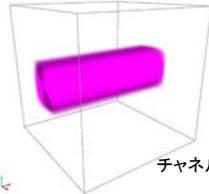


触媒の濃度(E1.sph)

2013/7/30

SPH 膜機能の分布データ

局在を指定したい時に使用



チャンネルの位置指定(channel.sph)

※チャンネル等の膜機能の局在は膜と指定したSPHの交わる場所を判定する。

※ファイル名は任意

RIKEN K講習会 All Rights Reserved, Copyright 2013 Riken, Japan.

9

入力データ(計算条件ファイル)



計算条件ファイル(XMLファイル)の一部

計算領域の原点、Voxel数、計算領域幅

```
<VoxelOrigin ox="0.000000" oy="0.000000" oz="0.000000" />
<VoxelSize ix="16" jx="16" kx="16" />
<VoxelWidth wx="1.000000" wy="1.000000" wz="1.000000" />
```

入力データ(SVX,SPH形式データ)の指定

```
<InputData basedir="." /in">
<InFile attr="M1" format="svx" fname="M1.svx" multi="no" />
<InFile attr="M2" format="svx" fname="M2.svx" multi="no" />
<InFile attr="M1:E1" format="sph" fname="E1.sph" multi="no" />
</InputData>
```

媒質の指定(代謝の指定)

```
<Elem name="cell">
<Elem name="M1" id="1">
<Param name="metabolism" dtype="STRING" value="./eml/mat1.eml" />
<Param name="system" dtype="STRING" value="/" />
</Elem>
<Elem name="M2" id="2">
</Elem>
</Elem>
```

物質の指定(E-Cell内での物質名、拡散係数、媒質での初期濃度)

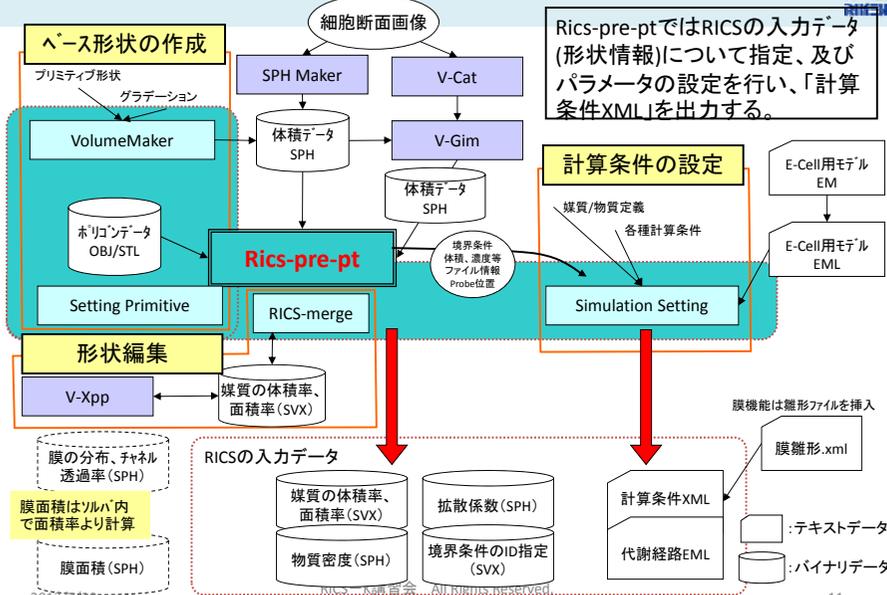
```
<Elem name="molecular">
<Elem name="A" id="3">
<Param name="FullID" dtype="STRING" value="Variable:/:S0" />
<Param name="DiffCoeff" dtype="REAL" value="1.000000" />
<Param name="MolConc" dtype="REAL" value="0" id="1" />
<Param name="MolConc" dtype="REAL" value="100" id="2" />
</Elem>
<Elem name="B" id="4">
<Param name="FullID" dtype="STRING" value="Variable:/:S1" />
<Param name="DiffCoeff" dtype="REAL" value="1.000000" />
<Param name="MolConc" dtype="REAL" value="0" id="1" />
<Param name="MolConc" dtype="REAL" value="0" id="2" />
</Elem>
<Elem name="E1" id="5">
<Param name="FullID" dtype="STRING" value="Variable:/:Ez" />
</Elem>
</Elem>
```

2013/7/30

RIKEN K講習会 All Rights Reserved, Copyright 2013 Riken, Japan.

10

RICsのデータフロー



2013/7/30

RIKEN K講習会 All Rights Reserved, Copyright 2013 Riken, Japan.

11

Ricsプリシシステムの作業内容

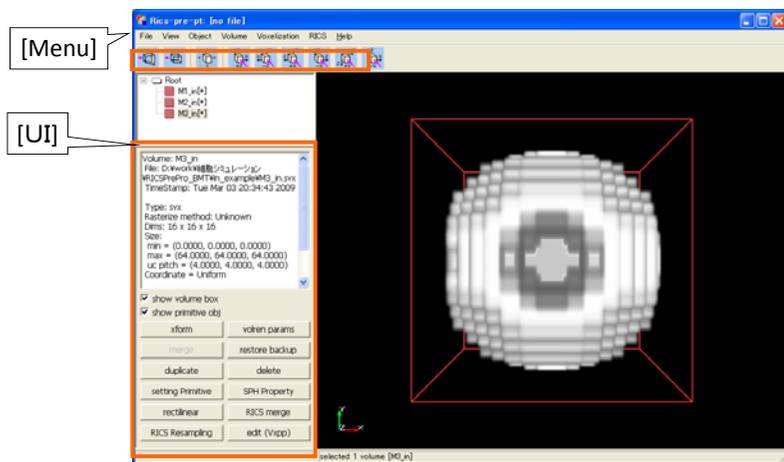


- ・形状データの作成・入力・編集
 - －形状のImport
 - －形状の作成
 - －形状の編集
- ・計算条件の設定
 - －領域、TimeStep、単位設定 etc...
 - －各媒質・各物質の指定(濃度・拡散)の設定
 - －反応と媒質(形状データ)との結合
 - －入出力ファイルの設定
 - －並列化手法(領域分割、式並列、反応並列)
 - －実行ソルバの指定(拡散・反応・膜)

2013/7/30

RIKEN K講習会 All Rights Reserved, Copyright 2013 Riken, Japan.

12



基本的な形状(SPHデータ)を作成し、出力する。

作成できる形状
四角柱、球、円柱、楕円

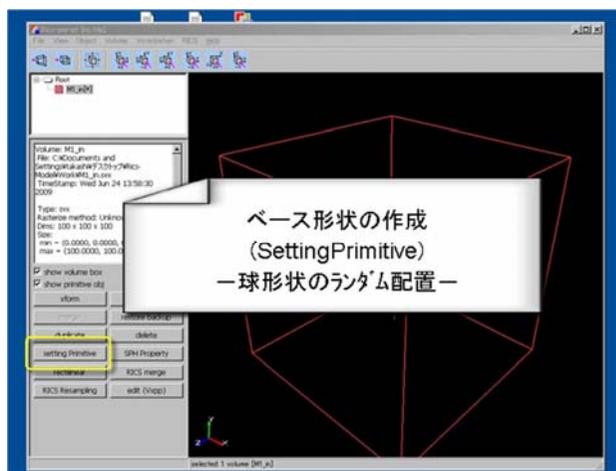
起動方法: [Menu] RICS/MakeVolume

Volume Space
計算領域の原点
領域サイズ
分割数

注1)出力ファイル
VolumeMakerからはSPHとして出力する。SPHをRics-pre-ptに読み込んだ場合、自動的にSVXに変換されて読み込まれる。
注2)Filterタブ
「Filter」タブでは、数値に勾配を設定できる。濃度に勾配(線形、Sigmoid)をつけることができる。



球体を計算領域内にランダム配置する。

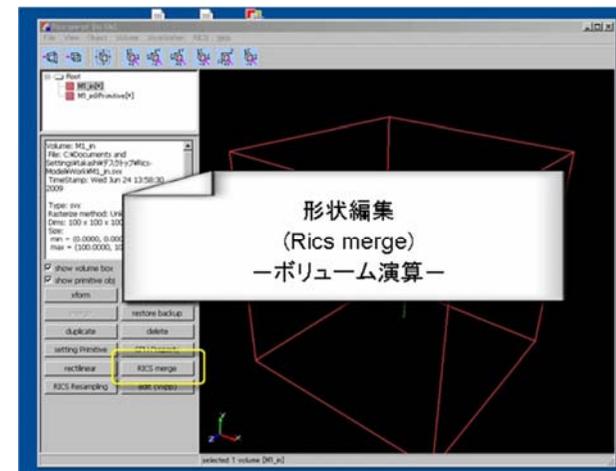


注1)配置場所
選択した媒質(SVX)の領域内にランダムに配置する。

選択したSVXの和、差、積のポリウム演算を行う。

ポリウム演算によって
修正するデータを選択後、
RICS Merge ボタンを押す。

注1)データの修正
RICS Mergeを行った場合、先に選択したSVXデータが修正される。
注2)データの種類
物質の濃度等、SPHとして使用したい場合、File-Exportで出力する。

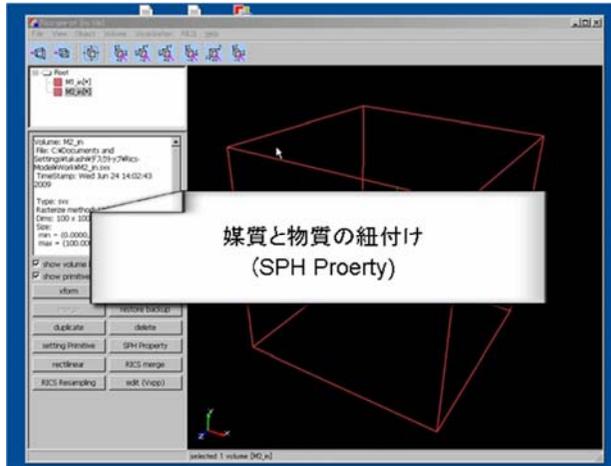


④ SPH Property



媒質(SVX)と物質(SPH)の紐付けを行う。

ツリーで媒質を選択後、SPH Propertyを押す。
選択した媒質で、
・物質初期濃度
・物質の拡散係数
・境界条件ID
のSPH、SVXを指定する。
計算条件設定(Simulation Setting)で、ここで指定したデータがリストに表示される。



2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

17

⑤ Simulation Setting



各種、計算条件の設定を行う。

DomainInfoタブ
領域(原点,VoxelSize等)
TimeStep(dt,Step数)
単位系
(長さ,時間,アボガド'ロ数)
計算条件(Initial/Restart)
Cell&Molecularタブ
各媒質・物質の定義
反応(EML)の指定
In&Outタブ
入出力ファイル定義
ParallelComputing
並列化手法
(領域分割、式、反応)
OutputParameter
観測点(数値出力)指定
SimSetting
ソルバ選択(拡散・反応・膜)
etc...



2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

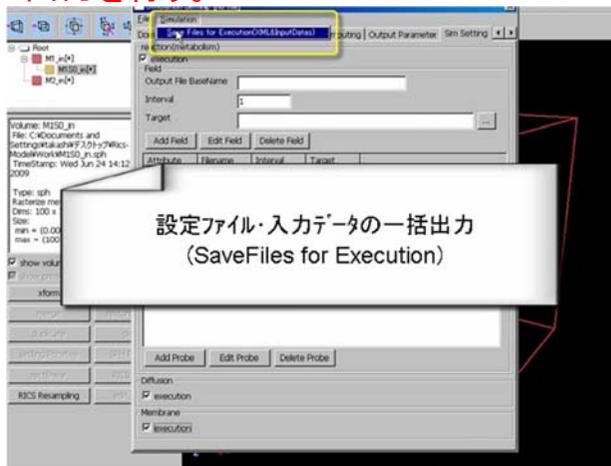
18

⑥ Save Simulation



計算用のファイル出力を行う。

計算条件XML,及びEML、SVX、SPH等の媒質、物質濃度等のファイルを指定したフォルダ配下に出力する。



2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

19

チュートリアル



さらに複雑なことを学習するためのチュートリアルハンドブックを用意しています。

ぜひ、ご活用ください。

2013/7/30

RICS-K講習会 All Rights Reserved,
Copyright 2013 Riken, Japan.

20