

細胞シミュレーション統合プラットフォーム
(RICS)
ー チュートリアル ー

2013年7月

理化学研究所

改訂情報

VerNo.	修正内容	日付
1.00	初版	2012/3/29
1.01	共通操作部・追記・修正	2012/5/01
1.02	誤植修正	2012/7/30

目 次

1. はじめに	5
2. 共通事項	6
2.1.1. RICS システムの概要	6
2.1.2. データについて (SVX、SPH、SVV)	7
2.1.3. 作業フローとデータフロー	8
2.1.1. 使用・作成データ	9
2.1.2. RICS-pre、V-Xgen の画面、View 操作	10
2.1.3. 各モデルのソルバの使用機能、コンパイルオプション	10
3. 単一細胞モデル	11
3.1. 作業フロー	11
3.2. 計算モデル	12
3.3. 形状データ作成	15
3.3.1. 各 OBJ ファイルの配置、SVX 化、修正 (V-Xgen、V-Xpp)	15
3.3.2. 外部領域用 SVX の作成 (V-Xgen)	25
3.3.3. ボリューム演算 (RICS-pre RICS merge)	27
3.3.4. 開口率設定 SVX の作成 (RICS-pre Export SPH, Import SPH)	32
3.3.5. 位置指定ファイルの作成 (RICS-pre VolumeMaker、VOI 抽出)	34
3.3.6. ワープ出入口の Voxel Index の情報出力 (RICS-pre VOI 情報表示)	42
3.3.7. Probe 位置の情報取得 (V-Xpp)	46
3.3.8. 形状データのコピー (Setting 部でのデータ設定準備)	50
3.4. 解析条件設定	50
3.4.1. EML の登録 (メインメニュー : File - EML Setting)	50
3.4.2. モデル規模、シミュレーション条件の設定 (Domain Info タブ)	51
3.4.3. 媒質・物質指定 (Cell & Molecular タブ)	51
3.4.4. 入出力ファイル指定 (In & Out タブ)	54
3.4.5. 並列化条件の設定 (Parallel Computing タブ)	57
3.4.6. ファイル出力パラメータの設定 (Output Parameter タブ)	57
3.4.7. 各機能の実行制御パラメータの設定 (SimSetting タブ)	58
3.4.8. 膜輸送機能の設定 (Membrane タブ)	60
3.4.9. 膜反応の設定 (Membrane Reaction タブ)	62
3.4.10. ワープの設定	63
3.5. 解析の実行	65
4. 肝細胞モデル	69
4.1. 作業フロー	69
4.2. 形状データ作成	70
4.2.1. 楕円球の作成 (VolumeMaker)	70
4.2.2. 体積率の修正 (V-Xpp の起動)	73

4.2.3.	体積率の修正（核部分を作成）	74
4.2.4.	細胞質部分を作成.....	78
4.2.5.	血管部分を作成.....	80
4.2.6.	SVX 作成直後.....	81
4.2.7.	開口率の設定（SPH ファイルの出力）	81
4.2.8.	開口率の設定（SVX データの作成）	83
4.2.9.	細胞のコピー.....	84
4.3.	解析条件設定.....	86
4.3.1.	モデル規模、シミュレーション条件の設定（Domain Info タブ）	86
4.3.2.	媒質・物質指定（Cell & Molecular タブ）	87
4.3.3.	入出力ファイル指定（In & Out タブ）	88
4.3.4.	並列化条件の設定（Parallel Computing タブ）	89
4.3.5.	ファイル出力パラメータの設定（Output Parameter タブ）	90
4.3.6.	各機能の実行制御パラメータの設定（SimSetting タブ）	90
4.3.7.	膜輸送機能の設定（Membrane タブ）	91
4.3.8.	解析条件ファイルの保存	91
4.3.9.	移流の設定.....	92
4.3.10.	境界条件の設定.....	92
4.4.	解析の実行.....	94
5.	神経細胞モデル.....	96
5.1.	作業フロー.....	96
5.2.	形状データ作成.....	97
5.2.1.	媒質データ、膜面積データの作成（CalcMemAreaVcat）	97
5.3.	解析条件設定.....	99
5.3.1.	モデル規模、シミュレーション条件の設定（Domain Info タブ）	99
5.3.2.	媒質・物質指定（Cell & Molecular タブ）	100
5.3.3.	入出力ファイル指定（In & Out タブ）	100
5.3.4.	並列化条件の設定（Parallel Computing タブ）	101
5.3.5.	ファイル出力パラメータの設定（Output Parameter タブ）	101
5.3.6.	膜電位の設定（Membrane Potential タブ）	101
5.3.7.	解析条件ファイルの保存	104
5.3.8.	膜電位物質の設定.....	104
5.3.9.	膜面積ファイルの設定.....	105
5.4.	解析の実行.....	107

1. はじめに

本書は、細胞シミュレーション統合プラットフォーム（以下、RICS）において、プリシステムを用いてソルバシステムの入力データを作成から解析を実行するまでの操作を記述したチュートリアルです。

本書では RICS プリシステム、RICS ソルバシステムその他、V-Xgen、V-Xpp 等の VCAD システム研究プログラムで開発されたシステムを使用しています。チュートリアルに必要な操作は本チュートリアルで説明しています。更に詳細な情報が必要な場合は各システムで提供しているマニュアルをご覧ください。

本書は以下のモデルを作成するためのチュートリアルです。

- 単一細胞モデル
- 肝細胞モデル
- 神経細胞モデル

使用システム

V-Xgen 3.0.1

V-Xpp 3.0.1

RICS-pre-pt 2.2.0

RICS-Solver 5.3.0

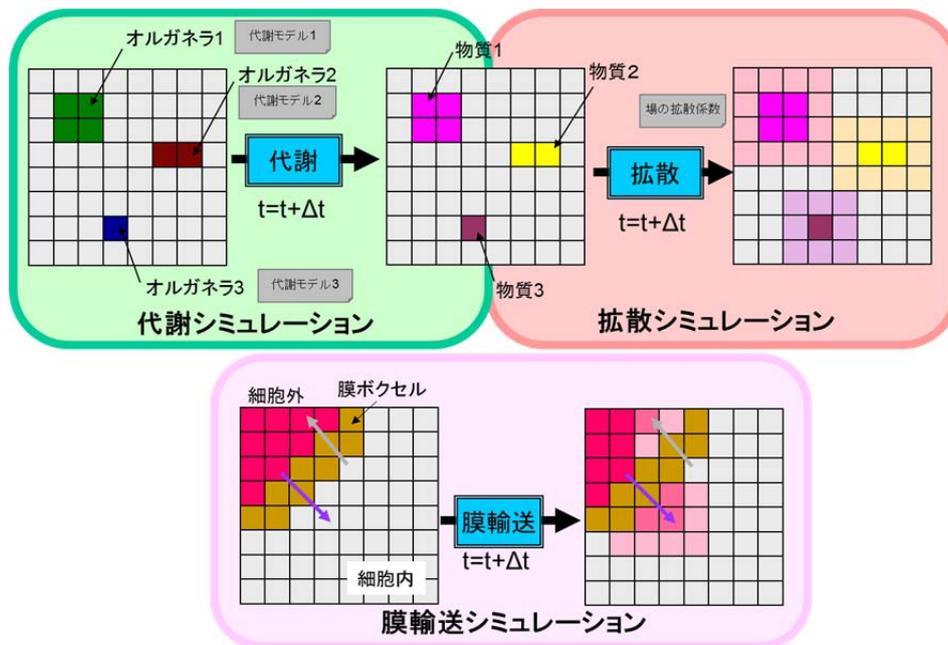
2. 共通事項

ここでは、モデル作成を行う上で必要な基本的な知識として、RICS システムの概要、使用するデータ、モデルの操作方法等、共通する内容を説明します。

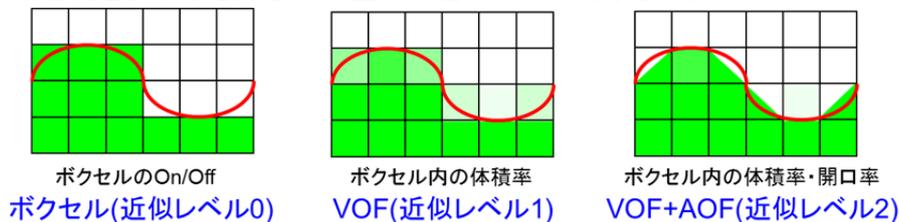
2.1. RICS システムの概要

RICS は位置、空間を考慮しながら、細胞内の生化学反応（代謝）、物質拡散、膜輸送等の機能を連成してシミュレーションするシステムです。細胞内の様々な現象を再現し、その仕組みを詳細に理解する事を目指しています。

RICS は V-CAD システム研究プログラムの開発システム(V-Xgen、V-Sphere 等)をベースに開発しており、直行格子（ボクセル）上で時間発展のシミュレーションを行うためのプリシステムとソルバシステムがあります。ボクセル毎の代謝シミュレーション、ボクセル間の濃度差による拡散シミュレーション、膜ボクセルにおける媒質（オルガネラ、細胞内外等）の間の物質を移動する膜輸送シミュレーションを連成して計算します（下図参照）。



ボクセルで形状を表現する方法には主に下記の3つがあります。



RICS は近似レベル 2 でボクセル内の体積率・開口率を使用してシミュレーションしています。

2.2. データについて (SVX、SPH、SVV)

RICS では細胞外、細胞質、オルガネラ（細胞内小器官）形状の入力データとして SVX データの体積率レコードと開口率レコードを使用し、物質濃度分布の入出力、膜の密度分布等を入力するために SPH データを使用しています。

SVX データ、SPH データは V-CAD システムの標準ファイルフォーマットです。

(1) SVX データ

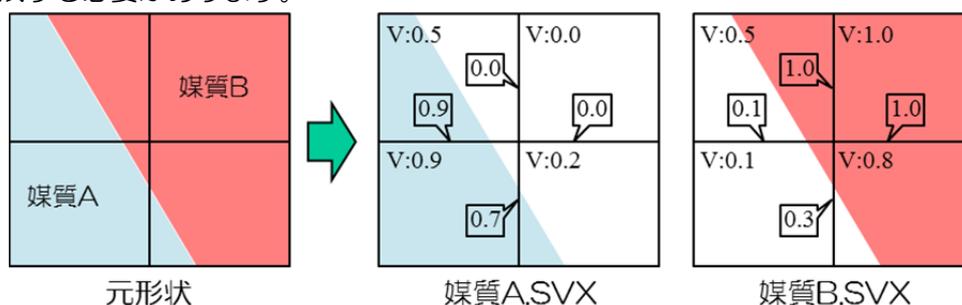
RICS は形状を表現するために、以下の2つを使用します。

体積率：ある形状（媒質）がボクセルに占める割合（値は 0.0～1.0）

開口率：ある形状（媒質）がボクセル間で連続している割合（値は 0.0～1.0）

• 形状データと媒質データ(SVX)

下図のように2つの媒質（A、B）の形状を表す場合、RICS はそれぞれについて SVX を作成する必要があります。



元形状に対して、上図の” V:0.5” 等の記述が各ボクセルの体積率、ボクセルの境界線に吹き出しで記述してある数字が開口率を表しています。ここでは、媒質 A、B を便宜上色分け表示していますが、元のボクセルの体積に占める割合を体積率として、ボクセル境界の面積に占める「割合」を面積率として持っています。

• RICS の各シミュレーションとレコードの使用法

各シミュレーションのデータレコードと使用法の概略を示します。

—代謝シミュレーション

ボクセルの体積と体積率から実際に代謝を行う体積を算出

—拡散シミュレーション

開口率（ボクセル間で連続している割合）から実際の物質移動量を算出

1.0 の時：ボクセル間は完全に連続

0.0 の時：ボクセル間は完全に非連続

上記以外：数値の割合だけ連続している（つながっている）

ボクセル間の濃度差から流束を算出、流束と開口率から物質移動量を算出

—膜輸送シミュレーション

開口率から膜の位置、方向を算出し、疑似的に膜面積を算出

膜の両側の物質濃度、膜輸送パラメータから流束を算出

流束と膜面積で実際の物質移動量を算出

※詳細は RICS ソルバのマニュアルおよび基本設計書を参照下さい。

(2) SPH データ

RICS では物質の濃度分布の入出力、膜密度の分布の入力等に SPH データを使用します。各ボクセルの値が、その場所の濃度や密度を表し、値は実数値です。

注) 開口率の算出、膜面積の算出について...

本チュートリアルでは、形状データ（開口率設定 SVX）を作成する方法について単一細胞モデル、幹細胞モデルで紹介しています。RICS プリシステムで SPH から SVX に変換する時、体積率から換算して開口率を算出します。そのため、形状から作成した開口率とは異なります。また、RICS ソルバは入力データの SVX の開口率から膜面積を算出しています。厳密に開口率、体積率、膜面積を指定してシミュレーションを行いたい場合は、膜面積ファイル（SVV ファイル）を使用する方法をご検討下さい。

2.3. 作業フローとデータフロー

(1) 作業フロー

モデル作成から解析を実行するまでの基本的な作業フローは右図の通りです。形状データの作成後、解析条件の設定・出力を行い、解析を実行します。

解析条件で指定する Probe(物質濃度等の数値出力)の位置の指定等、形状を参照しながら作成する必要があるパラメータを作成する場合、あらかじめ形状データ作成時に取得しておく作業をスムーズに行うことができます。



(2) 形状作成のデータフロー

RICS ソルバの入力データとして形状データ (SVX、SPH) を作成する方法にはいくつかの方法があります。V-Xgen、V-Xpp、RICS プリシステムの各システムを使用した場合のデータフローを説明します。

○基本フロー

RICS の形状データ (SVX,SPH) を作成する時の基本的なデータフローを示します。

1) RICS-Pre (Volume Maker)

幾何形状データを使用せずに、基本形状の位置と寸法を指定して、体積率の SPH ファイルを出力することができます。作成できる基本形状は角柱、球、円筒、楕円体です。複数の媒質の位置関係を確認しながら複雑な配置のモデルを作成することは難しいですが、単純な形状で代謝モデルや膜輸送機能のパラメータの確認を行う場合に有効な形状作成方法です。

体積率に係数かけて出力する機能(Filter)があります。膜の密度や物質の濃度分布を指定する時に使用します。

2) V-Xgen

幾何形状 (OBJ,STL ファイル) を読み込み、その形状データからボクセルデータ (SVX) を作成することが可能です。複数の幾何形状の位置関係を確認しながら配置してボクセル化 (Voxelization) するのに便利です。形状やボクセルの分割幅によっては正確に Voxelization することができない場合があります。その場合、トライ&エラーで Voxelization の最適な Method とパラメータを見つける必要があります。

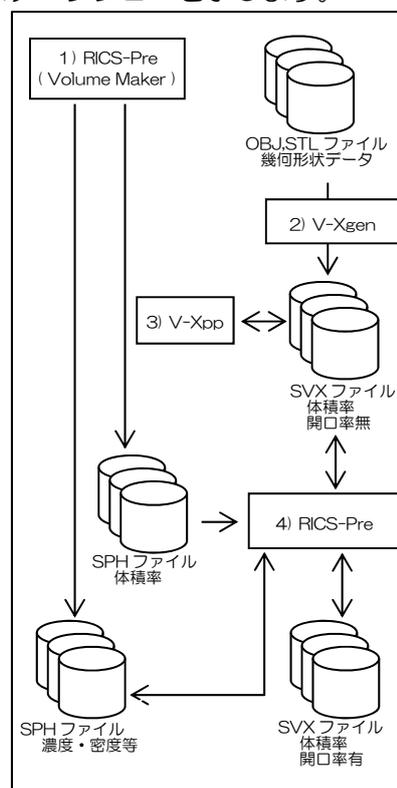
3) V-Xpp

既存の SVX を読み込み、ボクセルを Index や体積率等を指定して選択し、体積率を修正することが可能です。微小な体積率のボクセルを無くす等、Voxelization で作成した SVX の一部を修正するために使用します。

4) RICS-Pre

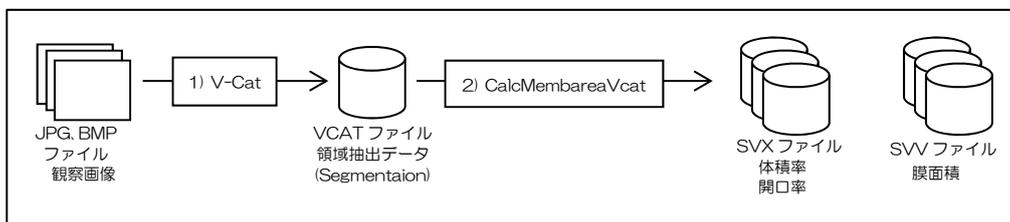
以下の機能を有しています。

- SPH を読み込んで SVX に変換
- SVX のボリューム演算 (和、差、積)
- VOI 抽出機能を使って対象ボクセルの選択、SPH 出力
- SettingPrimitive 機能による球形状のランダム(寸法、位置)作成



○画像データからのフロー

画像データから RICS の形状データを作成する時のフローを示します。



1) V-Cat

V-Cat を使用して細胞等の観察画像データを参照しながら領域分割(Segmentation)を行い、VCAT ファイルを作成します。

2) CalcMembareaVcat

CalcMembareaVcat を使用して、VCAT ファイルから SVX ファイル(体積率、開口率有)と SVV ファイル(膜面積ファイル)を作成します。

2.4. 使用・作成データ

各モデルのデータは以下のようなフォルダ構成でデータを用意しています。

tutorial_data/配下

01_1Cell/

+-01_1Cell_1model/

OBJ 等の入力ファイル、中間ファイル

+-01_1Cell_2sim/

実行用ファイル一式

02_hep/

+-02_hep_1model/

VCAT 等の入力ファイル、中間ファイル

+-02_hep_2sim/

実行用ファイル一式

03_Shinkei/

+-03_Shinkei_1model/

VCAT 等の元ファイル、中間ファイル

+-03_Shinkei_2sim/

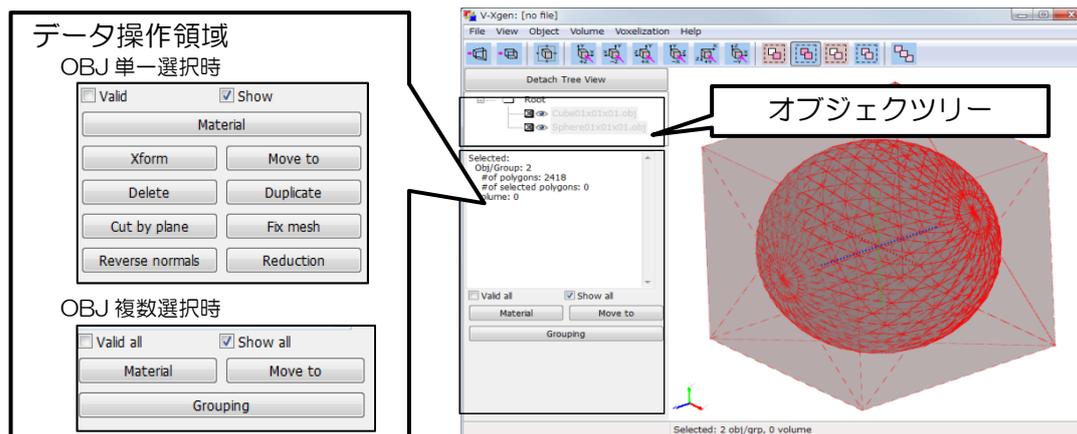
実行用ファイル一式

2.5. RICS-pre、V-Xgen の画面、View 操作

V-Xgen と RICS-pre はモデルの回転、拡大、並行移動の View 変更が可能で、その操作は共通です。

• オブジェクトツリー選択とメニュー表示

オブジェクトツリーでOBJファイルの選択の仕方によってデータ操作領域のメニュー表示が切り替わります Windows の Explorer と同じように Ctrl キー、Shift キーを使いながらオブジェクトツリービューのモデルを複数選択することが可能です。



• ビューの操作

3次元形状の見る方向を回転させたり、拡大・縮小表示、横への移動等の View 操作はマウスと Shift キー、Ctrl キーを組み合わせることで表示の変更が可能です。

- 回転表示 : マウス左ドラッグ
- 拡大・縮小表示 : Ctrl+マウス左ドラッグ
- 並行移動表示 : Shift+マウス左ドラッグ

2.6. 各モデルのソルバの使用機能、コンパイルオプション

ソルバの標準の機能（代謝、拡散、膜輸送）以外を使用する場合、RICS ソルバを構築する時にコンパイルオプションで使用する機能を有効にする必要があります。

各モデルで使用する機能とコンパイルオプションを示します。

- 単一細胞モデル
 - 標準機能：代謝・拡散・膜輸送
 - 追加機能：ボクセル間物質移動機能（ワープ）
 - コンパイルオプション：-DENABLE_WARP
- 肝細胞モデル
 - 標準機能：拡散・膜輸送
 - 追加機能：移流機能
 - コンパイルオプション：-DENABLE_ADVECTION
- 神経細胞モデル
 - 標準機能：未使用
 - 追加機能：膜電位機能
 - コンパイルオプション：-DENABLE_MEMBRANEPOTENTIAL

project_local_settings の変数、RICSOPT に上記オプションを追記して RICS ソルバを構築しなおして下さい。

3. 単一細胞モデル

単一細胞モデルでは、RICS の基本機能である代謝・拡散・膜輸送の3機能の他、Voxel 間物質移動機能（ワープ）を使用しています。RICS-pre はワープに関する設定機能を有していないため、解析条件設定ファイルに追加して記述します。

3.1. 作業フロー

ここでは、CAD で作成、出力したベースとなる OBJ ファイルから SVX データの作成、解析条件の設定を行います。

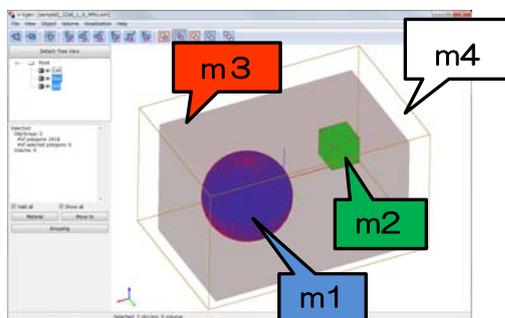
あらかじめ作成してある、基本形状の OBJ ファイル(球、立方体等)を V-Xgen に読み込み、変形（拡大や縮小）を行い、空間に配置（移動、回転）します。その後、V-Xgen の Voxelization 機能で SVX を作成し、体積率を修正後、RICS-pre の RICS merge を使って SVX のボリューム演算を行い、形状データを作成します。



3.2. 計算モデル

今回、配置する形状のイメージ、および物質変化のイメージをしめします。

(1) モデルの寸法・位置



形状イメージ

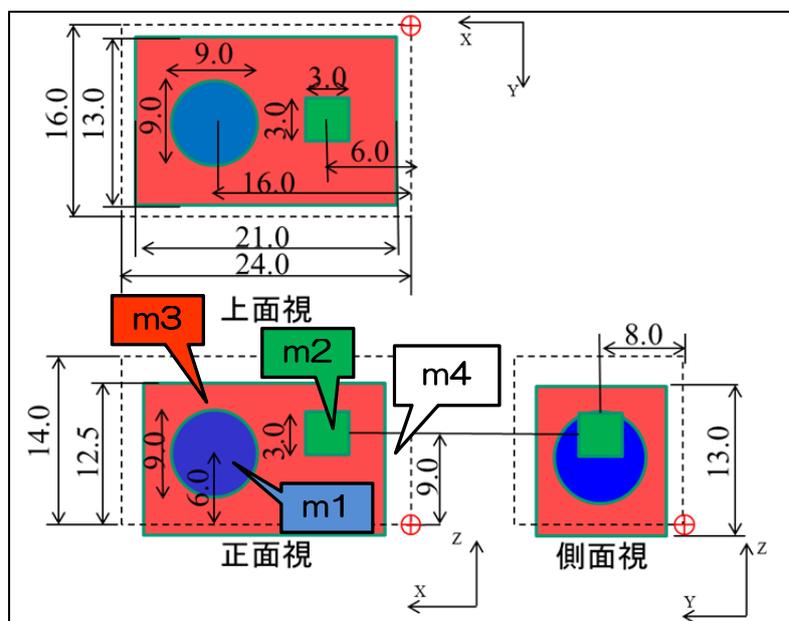
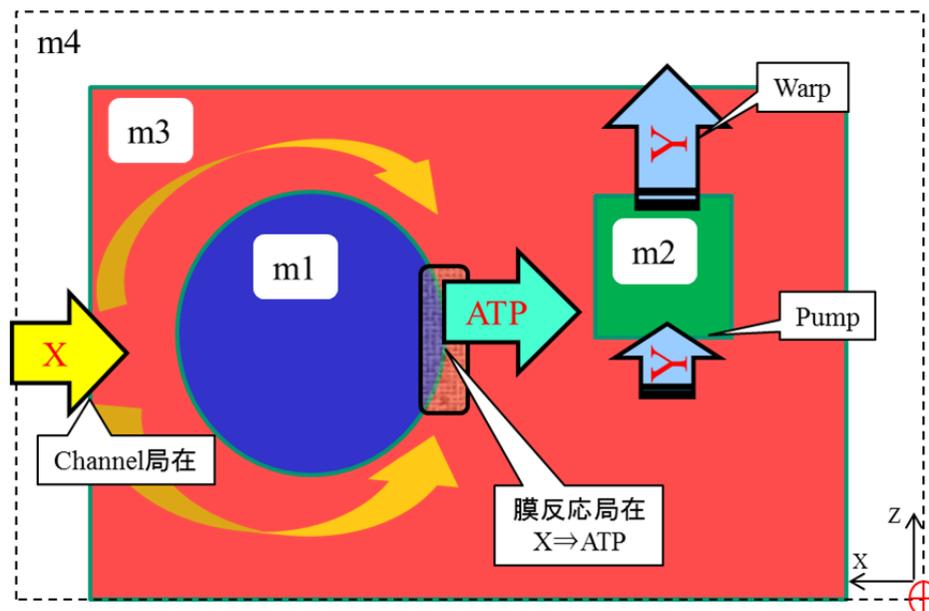


図. モデル寸法

表. モデル寸法（位置）寸法値(Xform 入力値、Voxelization 入力値)

	Translation			Scale			OBJ ファイル名		
	X	Y	Z	X	Y	Z			
m1	16.0	8.0	6.0	9.0	9.0	9.0	Cube01x01x01.obj		
m2	6.0	8.0	9.0	3.0	3.0	3.0	Sphere01x01x01.obj		
m3	12.0	8.0	6.0	21.0	13.0	13.0	Cube01x01x01.obj		
	Voxel Size			Voxel Pitch			原点		
m4	24	16	14	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

(2) 物質変化のイメージと物質パラメータ



物質変化のイメージ図

- Channel を通して物質 X が m4 (外部領域) から m3 (細胞) に流入。
- 拡散してきた物質 X が m1 表面の膜近傍で反応(反応領域が局在)で ATP に変化
X→ATP の反応式(EML) : A_B_for_1Cell_1Gnoe.eml
- 拡散してきた ATP を使って m2 表面の Pump が物質 Y を m2 に取り込む
- m2 内の物質 Y が指定値以上の濃度に達したら外部領域に Warp で放出

物質のパラメータ (初期濃度、拡散係数)

	物質拡散係数	2.0e+4	0.0	2.0e+4	2.0e+4	0.0	2.0e+4
	物質名(Full ID)	A	E1	B			
物質初期濃度	媒質名\物質名	X	E1	ATP	ADP	Pi	Y
	m1_ball	—	—	—	—	—	—
	m2_cube	—	—	—	—	—	0.0
	m3_cell	0.0	100.0	0.0	0.0	0.0	1.0e+3
	m4_out	1000.0	—	—	—	—	0.0

※物質名(FullID)は EML の物質名

(3) 膜輸送機能パラメータ

• Channel パラメータ

輸送物質 : X

K : 0.5 SW : 1.0 Fuzzy : 1.0

• Pump パラメータ

SW : 0.0(初期値。SwCtrl で制御)

VmaxATP : 20.0 KmATP : 2.0 TRATP : 1.0

Den : 10.0 Fuzzy : 1.0

SWCtrl :

JoinMethod : sum

Control function : michaelis

Vmax : 1.0 Km : 1.0 S : m3_cell:ATP

3.3. 形状データ作成

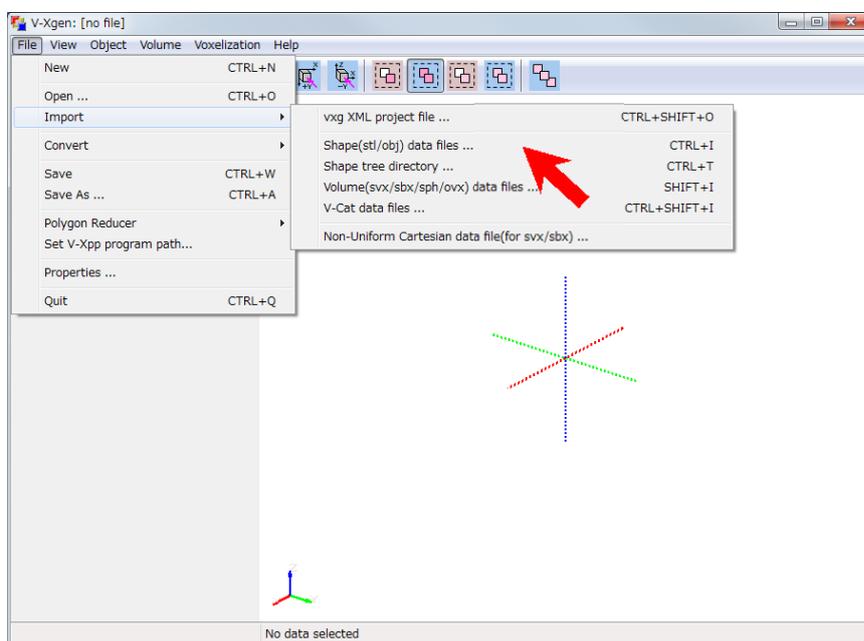
「3.2 計算モデル」の情報にもとづいて、OBJ ファイル（CAD 形状）の配置、配置した OBJ データから解析用の SVX データを作成します。その他に、膜の局在位置指定の SPH ファイルの作成、解析結果取得のための Probe 位置の取得を行います。

3.3.1. 各 OBJ ファイルの配置、SVX 化、修正（V-Xgen、V-Xpp）

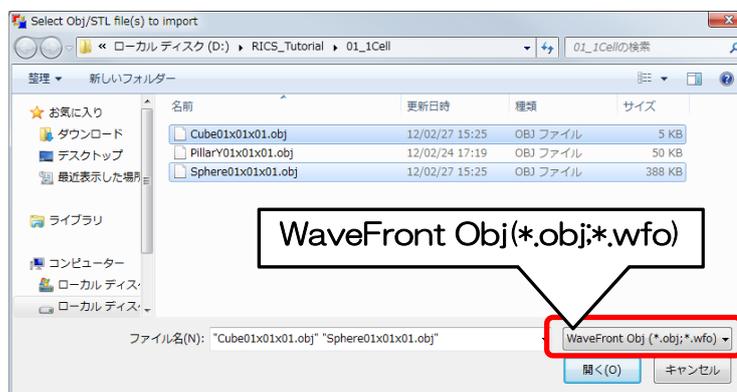
(1) ベース形状の読み込み（V-Xgen）

V-Xgen のメニューから基本形状を読み込みます。

メインメニュー：File - Import - Shape(stl/obj) data files ...



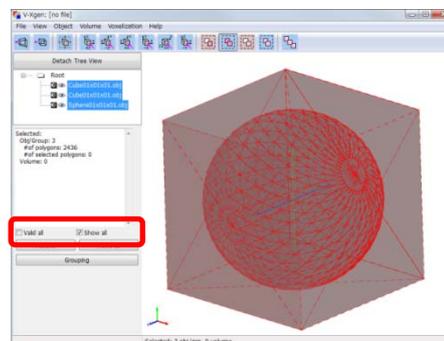
ファイルのフィルターを WaveFront OBJ(*.obj;*.wfo) に変更して
Cube01x01x01.obj を 2 回
Sphere01x01x01.obj を 1 回
を読み込みます。



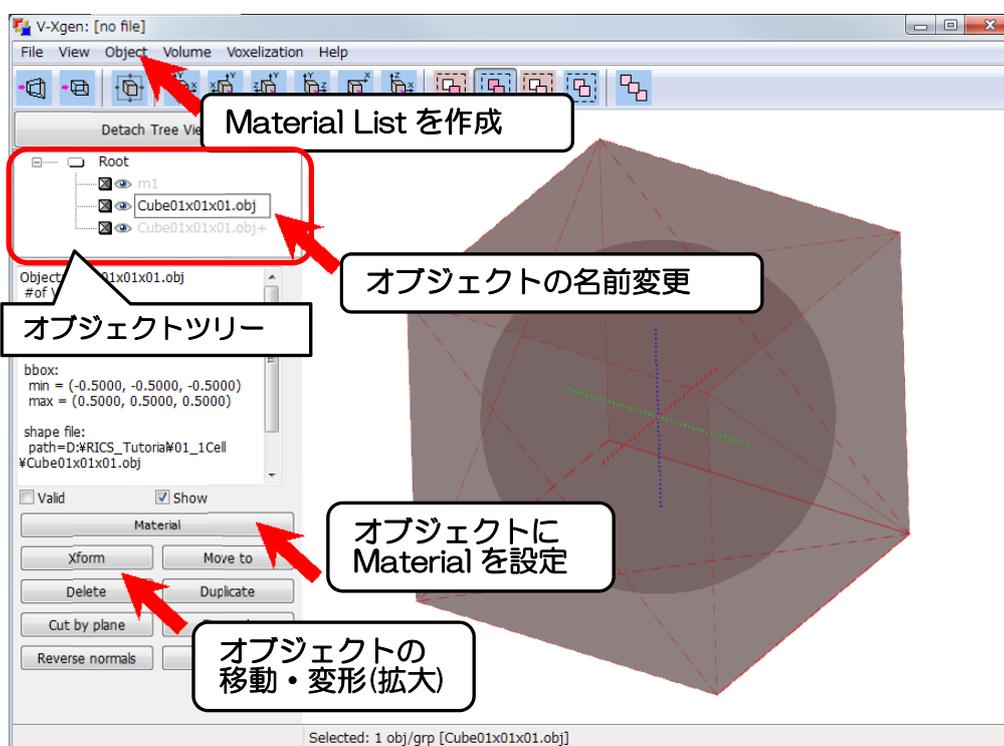
※obj を読み込み、移動・変形を行った後、Duplicate(コピー)を行うとコピー先の obj の形状データがおかしくなるバグが分かっています (V-Xgen Version3.0.1)。これを回避するため、同一形状であっても繰り返し読み込みます。

右図は以下の設定で表示しています。

- 背景を白
メニュー: View - Background Color
- 有効/表示設定
 Valid を Off
 Show を On
- オブジェクトツリーで全オブジェクトを選択



各オブジェクトの名前の変更、Material を設定することで作業しやすくします。



- オブジェクトの名前の変更

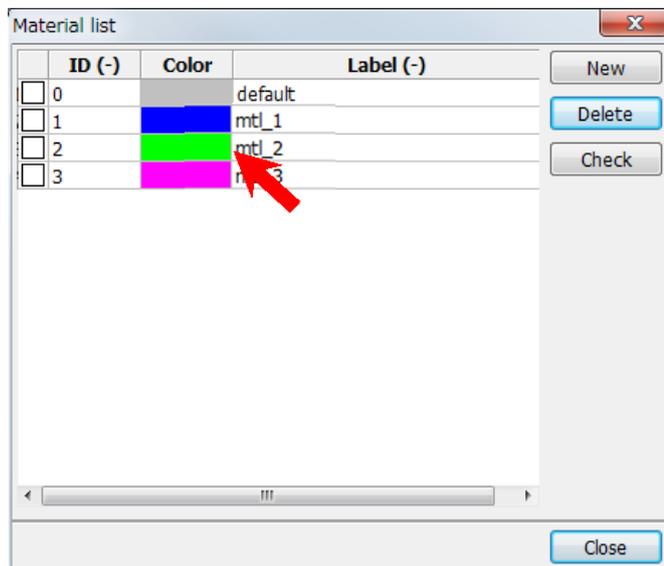
オブジェクトツリーの名前をクリックすると、変更可能になるので任意名を設定します。

※「Material の設定」のショートカットが「shift + m」に設定されています。オブジェクトの名前等で大文字の M を直接入力することができないので、注意が必要です。

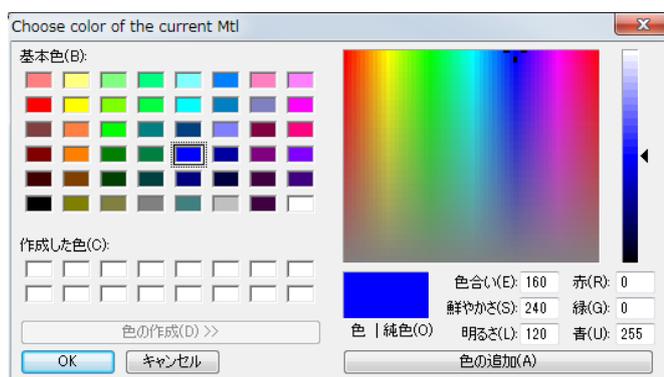
- Material List を作成

メインメニュー : Object - Material List

New ボタンで新規 Material を3つ追加してください。



Color の欄をダブルクリックしてカラーパレットで任意色を選択



- オブジェクトに Material を設定

オブジェクトツリーでオブジェクトを選択して Material ボタンを押下します。

Select Material ダイアログで対象の Material を選択します。

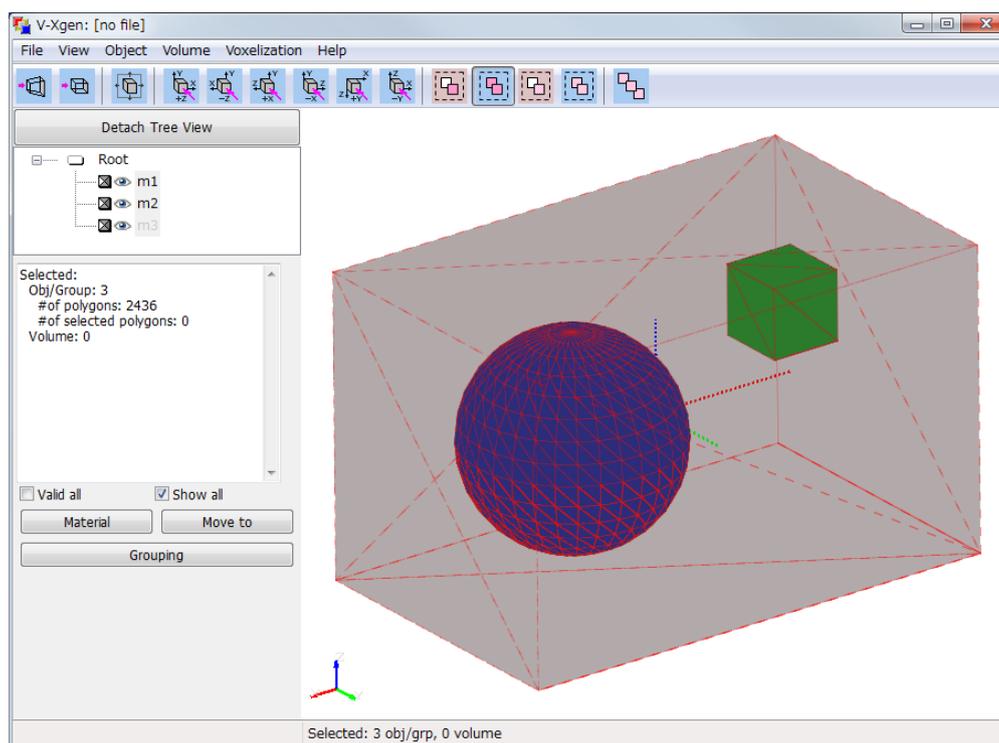
(2) オブジェクトの移動・拡大(Xform)

Xform 入力値

	Translation			Scale			OBJ ファイル名
	X	Y	Z	X	Y	Z	
m1	16.0	8.0	6.0	9.0	9.0	9.0	Sphere01x01x01.obj
m2	6.0	8.0	9.0	3.0	3.0	3.0	Cube01x01x01.obj
m3	12.0	8.0	6.0	21.0	13.0	13.0	Cube01x01x01.obj

以下の状態で表示して確認します。

- 背景を白
メニュー:View - Background Color
- 有効/表示設定
m1 Valid を On Show を On
m2 Valid を On Show を On
m2 Valid を Off Show を On
- 全オブジェクトを選択



[この段階のファイル]

ファイル名: tut01_01_Obj_Xform.xml(V-Xgen 用)

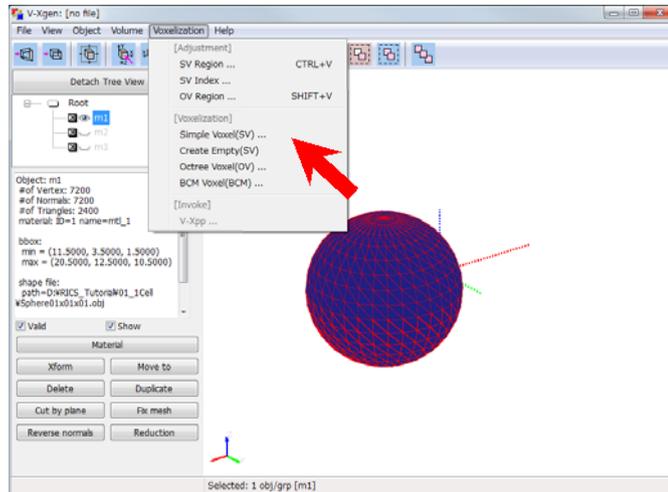
使用データ:

obj¥Cube01x01x01.obj、obj¥Sphere01x01x01.obj

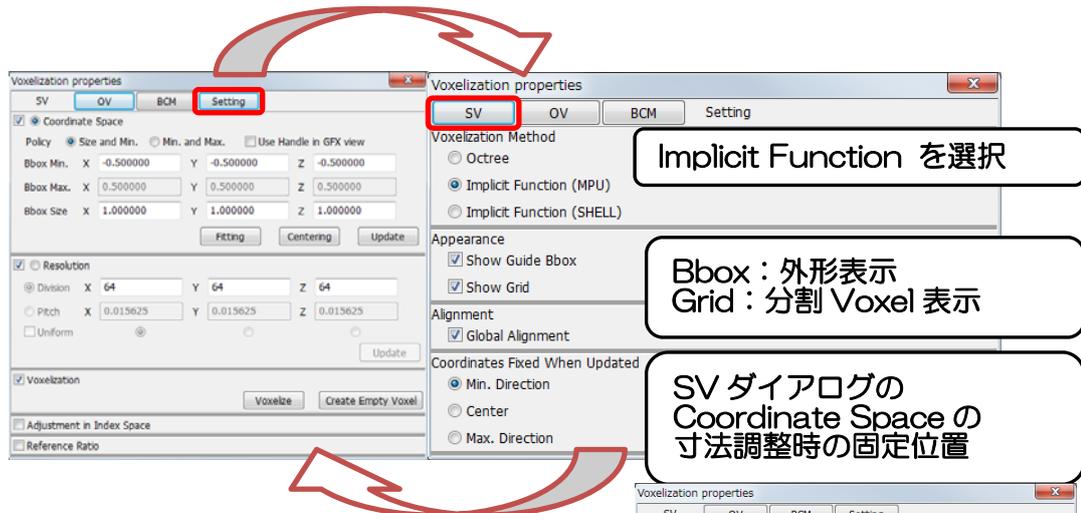
(3) SVX の出力(Voxelization)

各オブジェクト毎に Voxelization を行います。

- Voxelization properties ダイアログを起動
 メインメニュー : Voxelization - Simple Voxel(SV)...



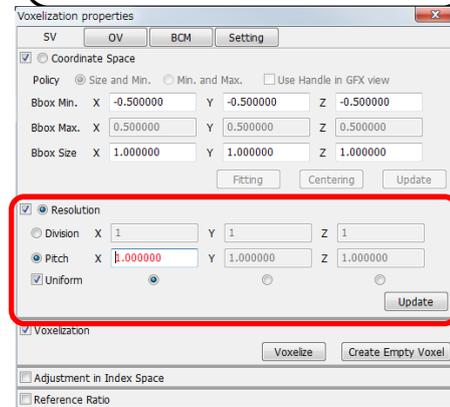
Setting タブ で Voxelization Method 等を設定します。



SV タブに戻って Voxel 数等を設定します。

- Voxel Pitch を指定
 - Resolution を選択
 - Pitch を選択
 - Uniform チェックボックスを On
 - X の下の●を選択し、X : 1.0 を設定

数値を入力後、Update ボタンを押下し、数字が黒くなるのを確認します。



- 計算領域サイズ(Coordinate Space)を設定

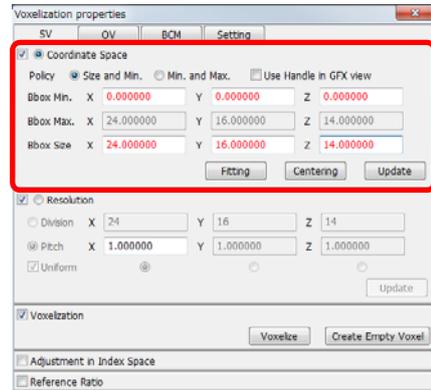
●Voxel Size(Coordinate Space) を選択

Policy ●Size and Min.を選択

計算領域を指定

Bbox Min. X : 0.0 Y : 0.0 Z : 0.0
Bbox Size X : 24.0 Y : 16.0 Z : 14.0

数値を入力後、Update ボタンを押下し、数字が黒くなるのを確認します。

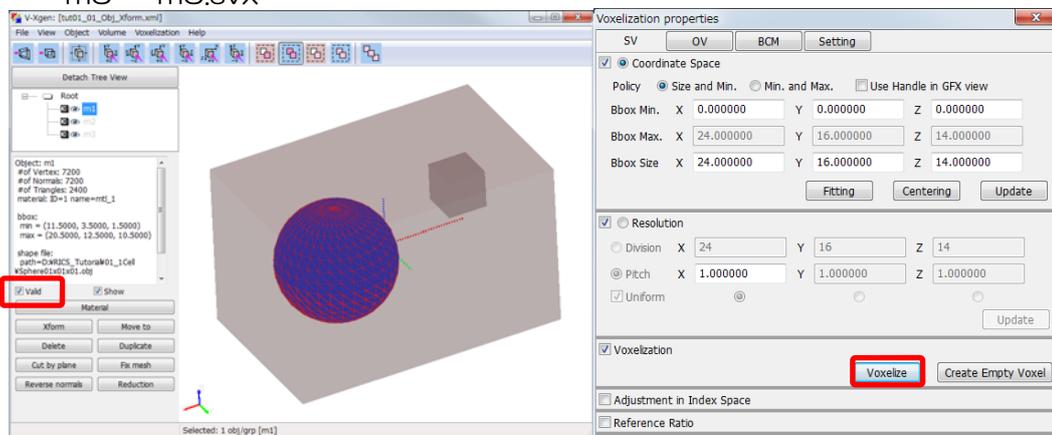


Voxelization を行います。

各オブジェクト毎に以下の操作を行います。

- Voxelization を行うオブジェクトのみ、Valid のチェックボックスを On
- Voxelization Properties ダイアログ の SV タブの Voxelize ボタンを押下
任意の出力ファイル名を指定して保存(ここでは以下の通り指定)

m1 m1.svx
m2 m2.svx
m3 m3.svx



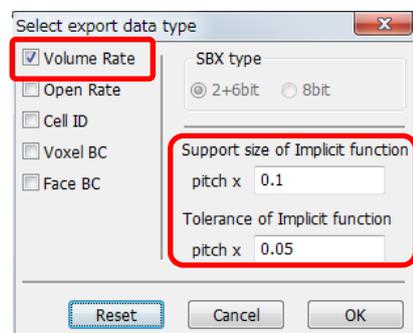
- 出力するデータ、隠関数のパラメータを設定

Volume Rate のみ出力

隠関数のパラメータを設定

Support size Pitch x : 0.1
Tolerance Pitch x : 0.05

※オブジェクトの形状によって Voxelization Method および、そのパラメータ値は適切な値が異なります。
オブジェクト毎に、Try & Error で見つかる必要があります。



[参考]

代謝・拡散・膜輸送の複雑な連成解析作成した SVX には微小な体積率の Voxel が存在する場合があります。これが原因でエラー回避のために体積率を修正する必要があります。また、RICS merge で SVX をボリューム演算して媒質データを作成します。これらの作業により、RICS merge で作成した SVX の開口率と、V-Xgen で作成した SVX の開口率の不整合が発生する可能性があります。これを回避するため、RICS-pre システムを使用して、開口率を再計算することを推奨します。

[この段階のファイル]

ファイル名： tut01_02_Voxelize.xml (V-Xgen 用)

使用データ：

obj¥Cube01x01x01.obj、obj¥Sphere01x01x01.obj
m1.svx、m2.svx、m3.svx、m4.svx

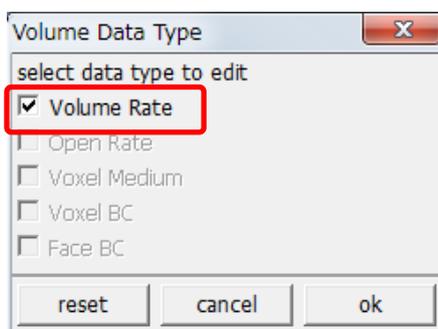
(4) 体積率の修正 (V-Xpp)

代謝・拡散・膜輸送が連成する複雑な連成計算を行う場合、解が発散する場合があります。その原因の一つとして、体積率が小さいボクセルが計算空間に存在することが挙げられます。その回避策として微小な体積率を修正する方法を示します。ここでは、V-Xpp を使用して、体積率が 0.2 以下になる Voxel が存在しないようにするため、体積率が 0.2 以下の Voxel に 0.0 を設定し、0.8 以上の Voxel に 1.0 を設定します。

V-Xpp を起動

修正する SVX を選択後、Edit(V-Xpp)ボタンを押下します。

表示される Volume Data Type ダイアログで、Volume Rate のみを選択し、V-Xpp を起動します。



VOI Selection ダイアログを起動します。

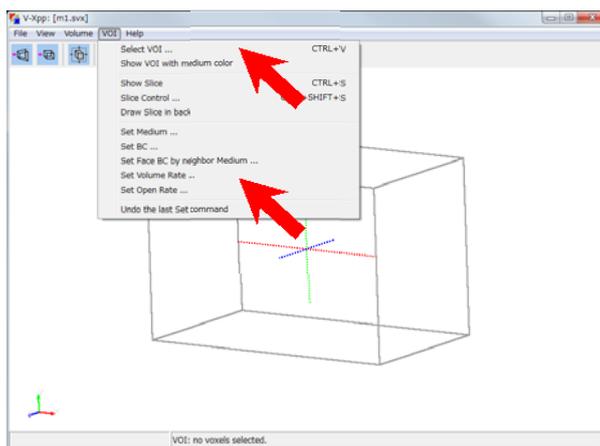
メインメニュー： VOI

Select VOI...

目的の Voxel を選択表示

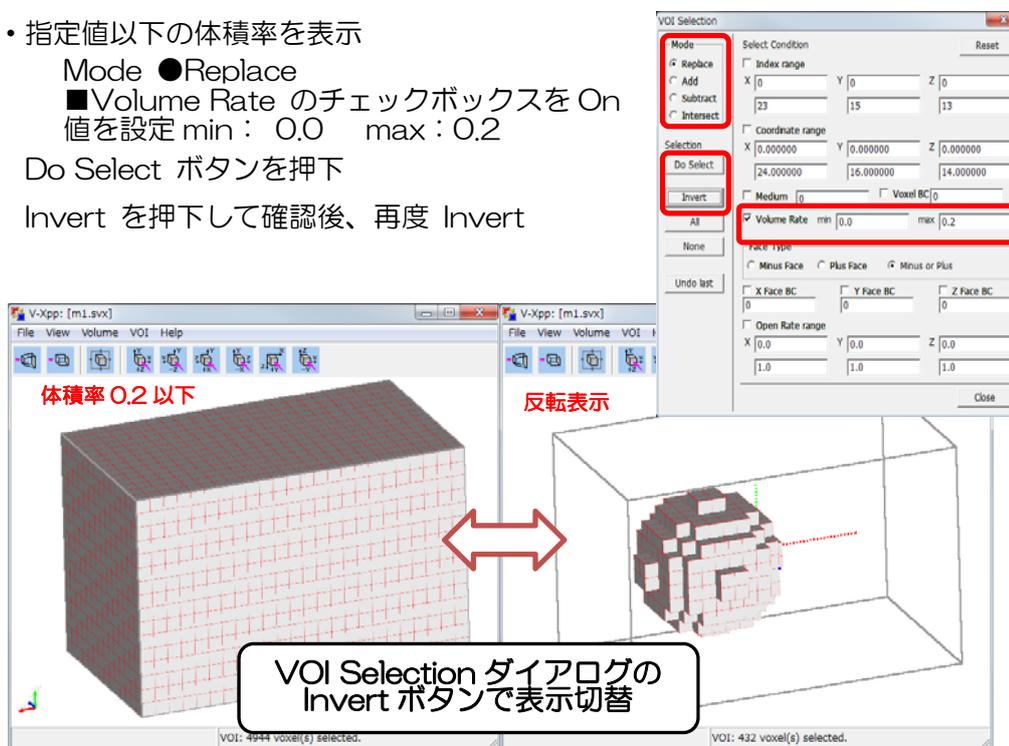
Set Volume Rate...

選択表示している Voxel に対して体積率を設定

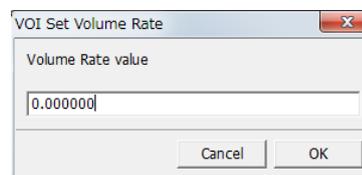


VOI Selection ダイアログ で微少な体積率の原因となる Voxel を選択し、値を設定します。

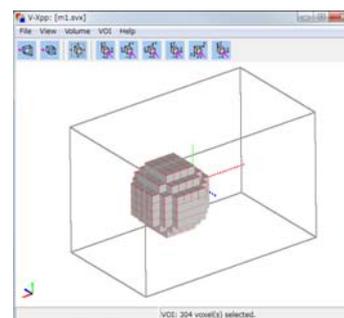
- 指定値以下の体積率を表示
 - Mode ●Replace
 - Volume Rate のチェックボックスを On
 - 値を設定 min : 0.0 max : 0.2
 - Do Select ボタンを押下
 - Invert を押下して確認後、再度 Invert



- 体積率 0.2 以下の Voxel に 0.0 を設定
- メインメニュー : VOI - Set Volume Rate

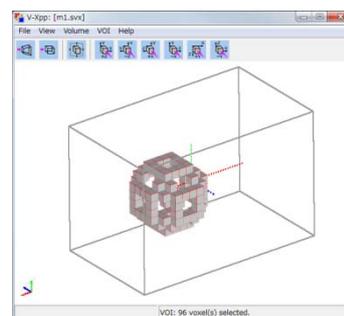


- 指定値以上の体積率の Voxel を表示
 - Mode ●Replace
 - Volume Rate のチェックボックスを On
 - 値を設定 min : 0.8 max : 1.0
 - Do Select ボタンを押下
 - 選択表示した Voxel に体積率 1.0 を設定



[参考]

VIO Selection Dialog で Volume Rate を
min : 0.8 max : 0.999
を指定して選択表示した場合は右図の通りです。



- 修正した SVX ファイルを保存後、終了

メインメニュー：File - Save As...

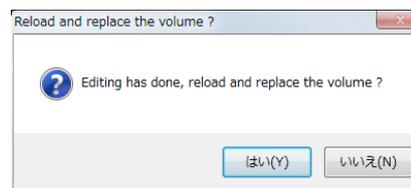
任意のファイル名で保存（ここでは以下の通りとします）。

m1_mod.svx

メインメニュー：File - Quit

修正した SVX データを V-Xgen に読み込むかどうかの確認ダイアログが表示されます。

ここでは、いいえ(N)を押下します。



他の SVX に対しても同様に体積率の修正を行います。

対象 SVX と保存ファイル名

対象 SVX：m2.svx 修正後の保存ファイル名：m2_mod.svx

対象 SVX：m3.svx 修正後の保存ファイル名：m3_mod.svx

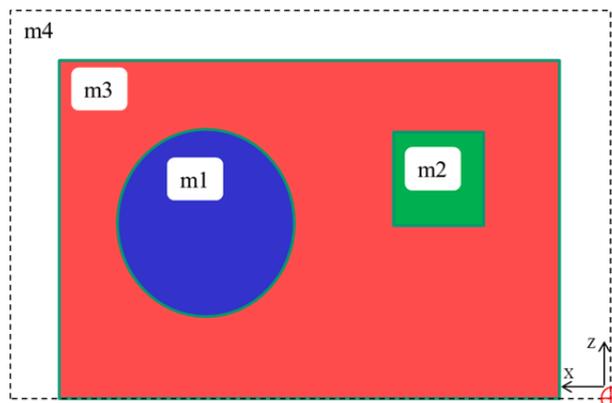
実施作業 (V-Xpp を使用)

体積率 0.2 以下の Voxel を選択表示して、体積率 0.0 を設定

体積率 0.8 以上の Voxel を選択表示して、体積率 1.0 を設定

3.3.2. 外部領域用 SVX の作成 (V-Xgen)

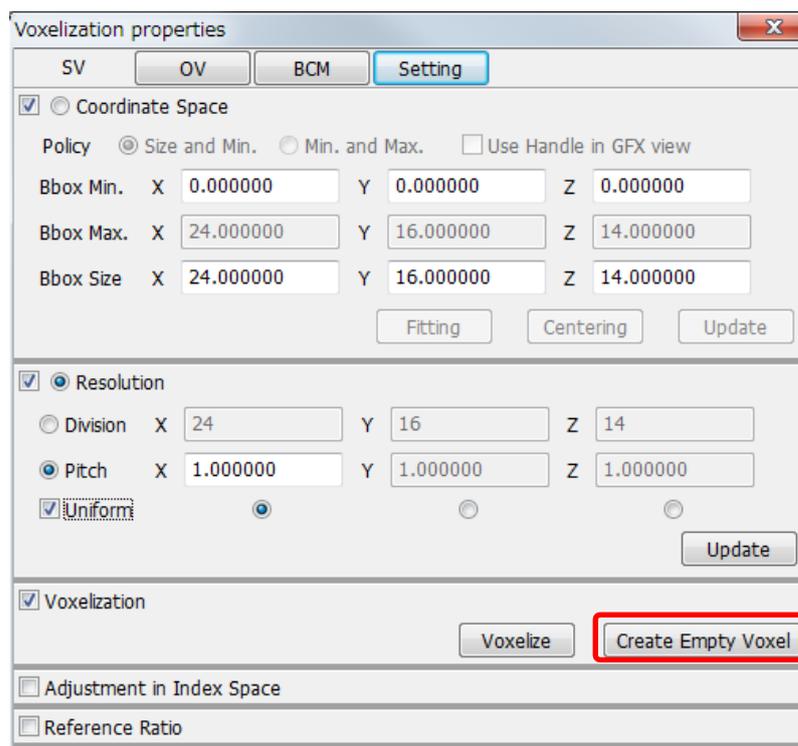
V-Xgen を使って、外部領域(m4)の元となる SVX データを作成します。空の Voxel 領域を作成してから、V-Xpp で体積率 1.0 を設定します。



(1) 空の SVX の作成

メインメニュー：Voxelization - Simple Voxel(SV)...

SV タブの設定が以下の通りになっていることを確認します。



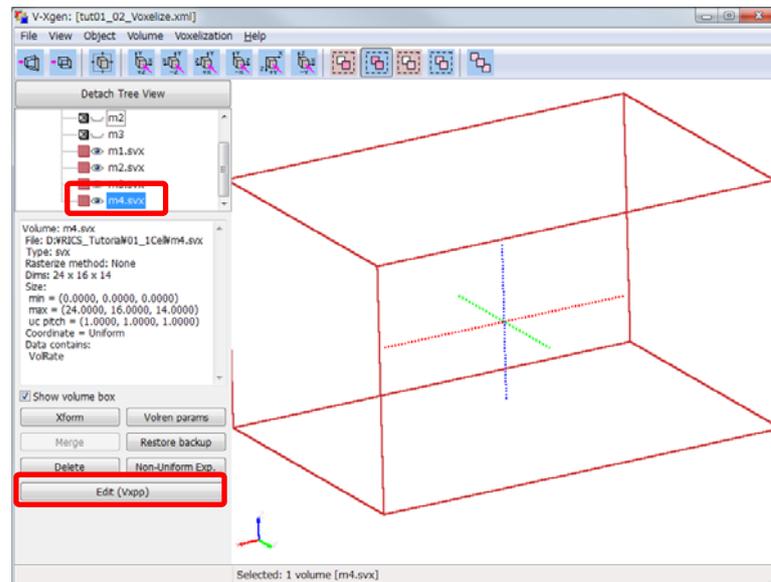
ここで、Create Empty Voxel ボタンを押下して、以下の設定で体積率のみの SVX ファイルを保存します。

- ファイル名：m4.svx(任意)
- Select export data type ダイアログ
 - Volume Rate のみ選択

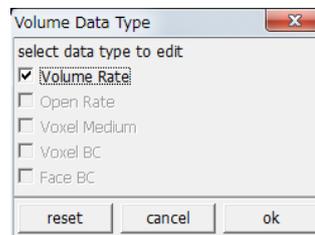
(2) 全領域に体積率 1.0 を設定(V-Xpp)

V-Xpp を使用して、全領域に体積率 1.0 を設定します。

- オブジェクトリツリーで、m4.svx を選択し、Edit(Vxpp) ボタンを押下



Volume Data Type ダイアログで、Volume Rate のみが選択されていることを確認して OK ボタンを押します。



VOI Selection ダイアログを起動して、全 Voxel を選択して、体積率を設定します。

メインメニュー：VOI - Select VOI

VOI Selection ダイアログで All ボタンを押下します。

全 Voxel が選択されているのを確認して、体積率 1.0 を設定します。

メインメニュー：VOI - Set Volume Rate...

修正したデータ保存します。

メインメニュー：File - Save As...

ファイル名：m4_mod.svx

[この段階のファイル]

ファイル名：

tut01_03_before_merge¥tut01_03_before_merge.xml(RICS-pre 用)

使用データ：(tut01_03_before_merge フォルダ配下)

m1_mod.svx、m2_mod.svx、m3_mod.svx、m4_mod.svx

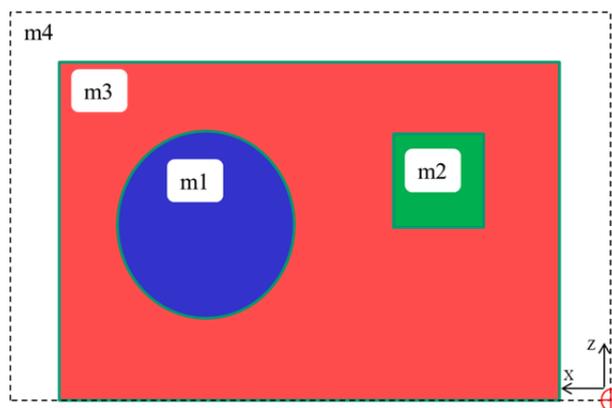
3.3.3. ボリューム演算 (RICS-pre RICS merge)

RICS-pre システムを使って、各媒質が重ならないようにボリューム演算を行います。

外側の媒質から内側の媒質を取り除くボリューム演算を順番に行っていきます。

外部領域の作成 : m4_mod.svx から m3_mod.svx を取り除く

細胞質領域の作成 : m3_mod.svx から m2_mod.svx と m1_mod.svx を取り除く

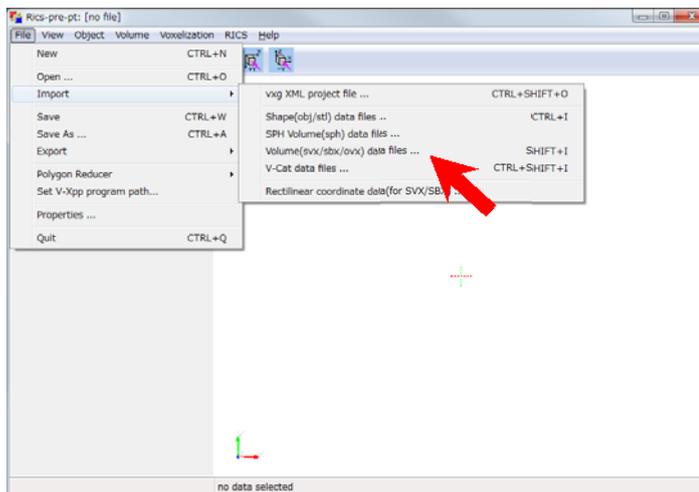


(1) SVX の読み込み (m1_mod.svx、m2_mod.svx、m3_mod.svx、m4_mod.svx)

• SVX ファイルの読み込み

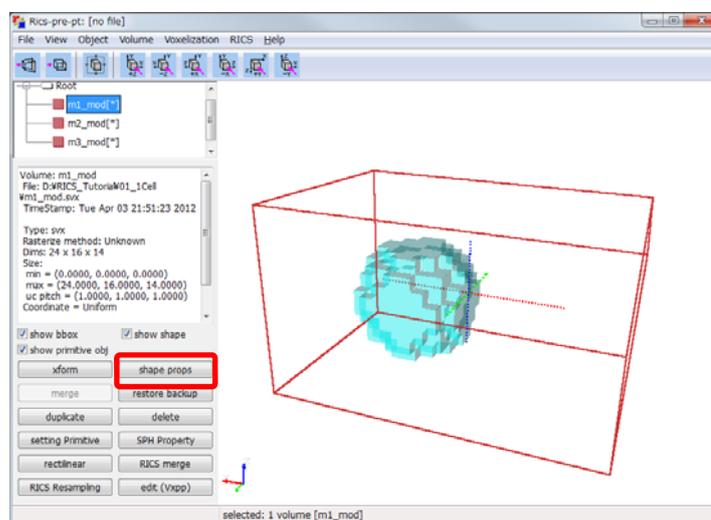
m1_mod.svx、m2_mod.svx、m3_mod.svx の 3 ファイルを選択して読み込みます。

メインメニュー : File - Import - Volume(svx/sbx/ovx) data files...



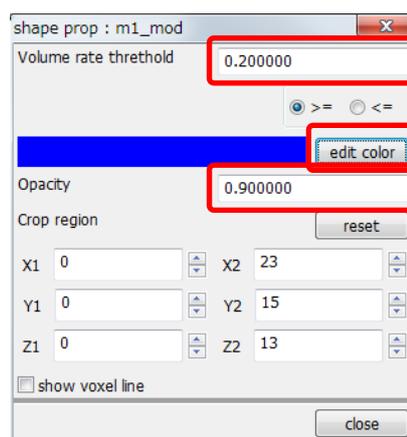
- 各 SVX の色、表示の閾値の変更

オブジェクトリツリーで m1_mod を選択して、shape props ボタンを押下します。



shape prop ダイアログで表示の設定を変更します。

Volume rate threshold : 0.1
 edit color : 青
 Opacity : 0.9



m2_mod、 m3_mod についても同様に変更します。

m2_mod を選択して shape props ボタンを押下して以下を設定

Volume rate threshold : 0.1
 edit color : 緑
 Opacity : 0.9

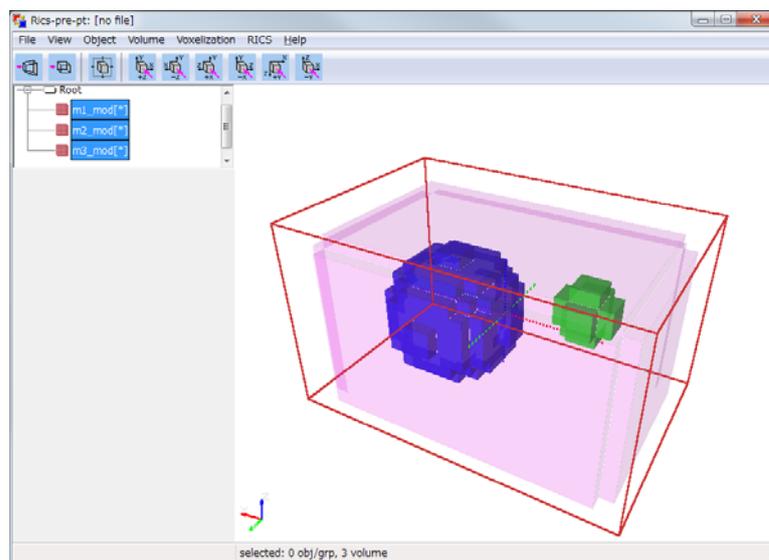
m3_mod を選択して shape props ボタンを押下して以下を設定

Volume rate threshold : 0.1
 edit color : ピンク
 Opacity : 0.2

m4_mod を選択して shape props ボタンを押下して以下を設定

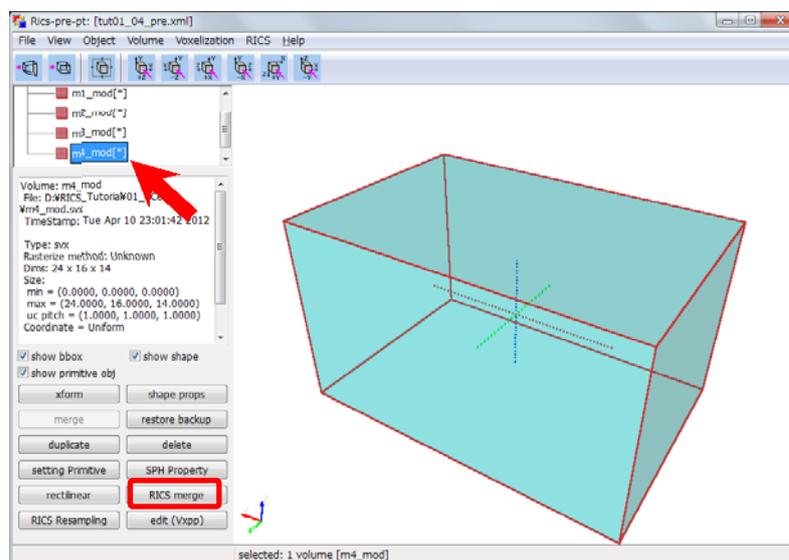
Volume rate threshold : 0.1
 Opacity : 0.1

下図は m4 を除く SVX を選択して表示



(2) 外部領域(m4)から内側の媒質(m3)部分を除く (RICS merge)

オブジェクトリツリーで m4_mod を選択して、RICS merge ボタンを押下します。



volume merge ダイアログで、以下の通り選択、および設定を行い、Apply ボタンを押下します。

Source Volume

m3_mod を選択

Merge Option

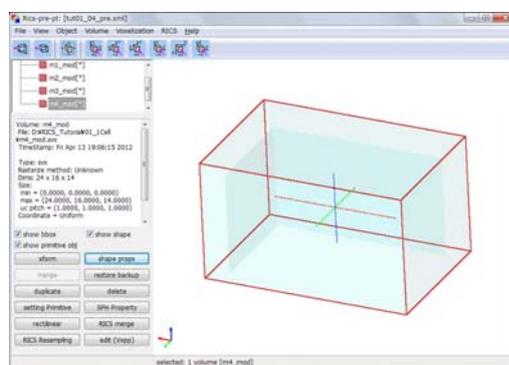
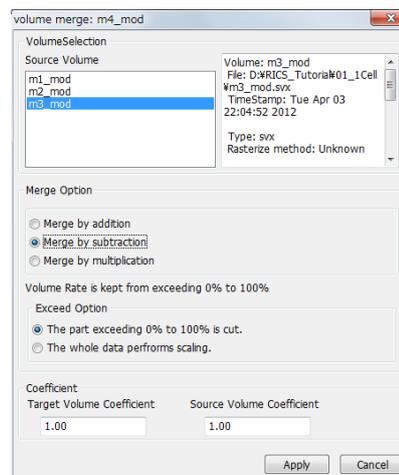
● Merge by subtraction を選択

Exceed Option

● The part exceeding 0% to 100% is out

元のデータ m4_mod.svx のバックアップするためのファイル名を入力して OK を押下します。

ここでは、m4_mod_backup.svx と入力します。



作成した外部領域

(3) 内側の媒質(m3)からオルガネラ部分(m1,m2)を除く (RICS merge)

同様にオブジェクトリツリーで m3_mod を選択して、RICS merge ボタンを押下して、Volume Merge ダイアログを表示します。

以下の通り選択、および設定を行い、Apply ボタンを押下します。

Source Volume

m1_mod、m2_mod を選択

Merge Option

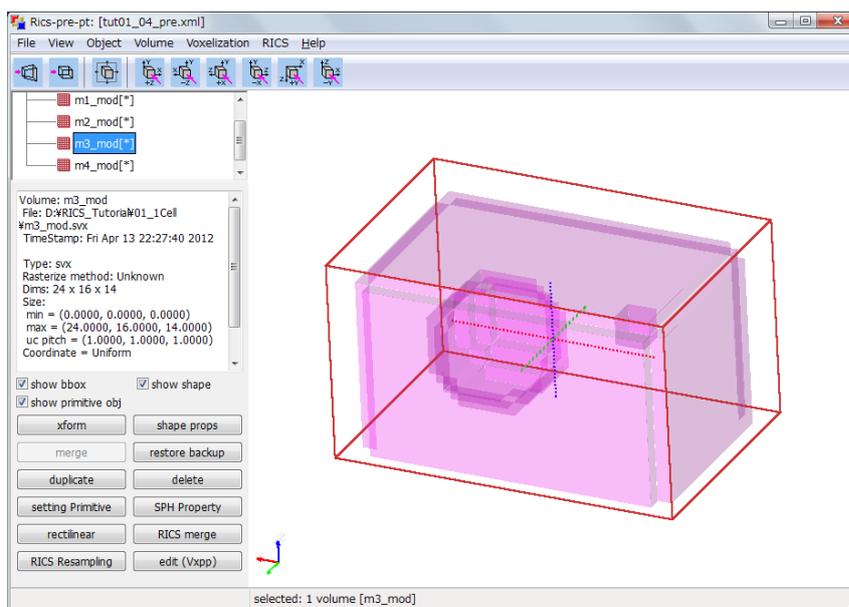
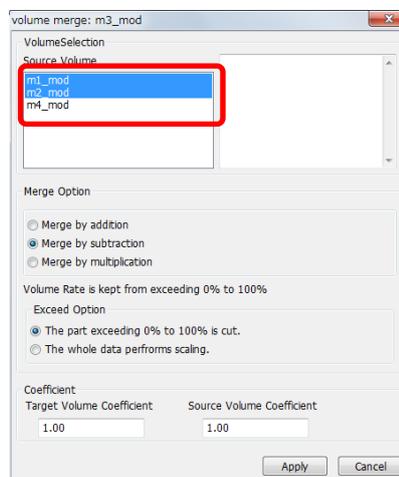
●Merge by subtraction を選択

Exceed Option

●The part exceeding 0% to 100% is out

m3_mod.svx のバックアップするためのファイル名を入力して OK を押下します。

ここでは、m3_mod_backup.svx と入力します。



作成した内側の媒質

[この段階のファイル]

ファイル名 : tut01_04_after_merge.xml (RICS-pre 用)

使用データ :

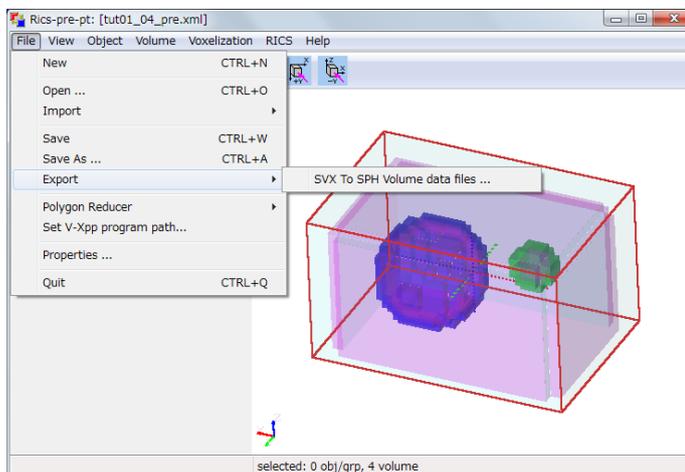
m1_mod.svx、m2_mod.svx、m3_mod.svx、m4_mod.svx

3.3.4. 開口率設定 SVX の作成 (RICS-pre Export SPH, Import SPH)

体積率から開口率を算出して、シミュレーション用の SVX を作成します。

(1) 体積率の出力 (Export SPH)

メインメニュー : File - Export - SVX To SPH Volume data files ...



全ファイルを選択して、体積率 (Volume Rate) のみの SPH ファイルを出力します。
File Name 欄で全ファイルを選択。

Choice Output Data で

●Volume Rate

が選択されていることを確認して、Output SPH ボタンを押下します。
元のファイル名に "VolumeRate" を付加したファイル名で SPH ファイルが出力されます。今回の場合は以下のファイルになります。

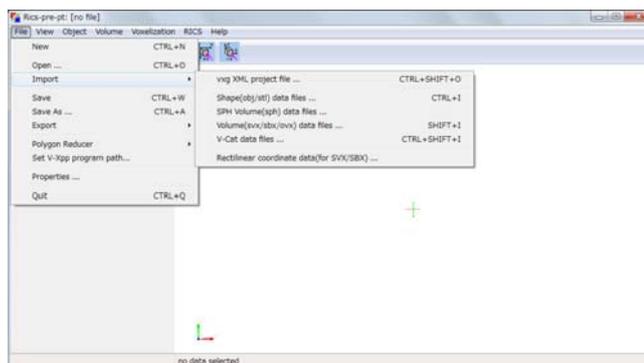
- m1_modVolumeRate.sph
- m2_modVolumeRate.sph
- m3_modVolumeRate.sph
- m4_modVolumeRate.sph



(2) 開口率設定 SVX の作成 (SPH 読み込み)

前項で出力したファイル (m*_mode*VolumeRate.sph) を読み込みます。

メインメニュー : File - Import - SPH Volume(sph) data files...



拡張子を SVX にしたファイル名で媒質用ファイル(体積率、開口率レコード)が作成されます。開口率は体積率から算出した開口率が設定されます。ここでは、以下のよう
にファイル名に VolumeRate が付与されてファイルが出力されます。

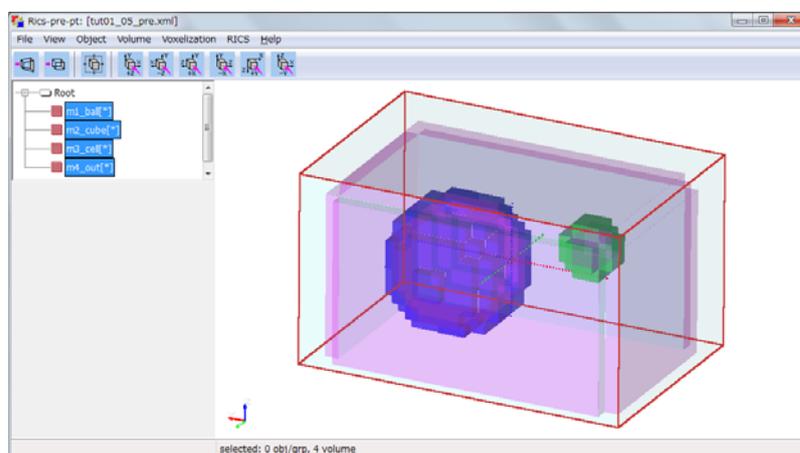
```
m1_modVolumeRate.svx  
m2_modVolumeRate.svx  
m3_modVolumeRate.svx  
m4_modVolumeRate.svx
```

(3) シミュレーション用形状データのコピー

作業性を良くするため、別フォルダに上記データをコピーし名前を変更します。

元のファイル名と修正後ファイル名

```
m1_modVolumeRate.svx → m1_ball.svx  
m2_modVolumeRate.svx → m2_cube.svx  
m3_modVolumeRate.svx → m3_cell.svx  
m4_modVolumeRate.svx → m4_out.svx
```



コピー先フォルダ : O1_1Cell_1model2

[この段階のファイル](フォルダ : O1_1Cell_1model2)

ファイル名 : tutO1_05_svx.xml(RICS-pre 用)

使用データ :

m1_ball.svx、m2_cube.svx、m3_cell.svx、m4_out.svx

3.3.5. 位置指定ファイルの作成 (RICS-pre VolumeMaker、VOI 抽出)

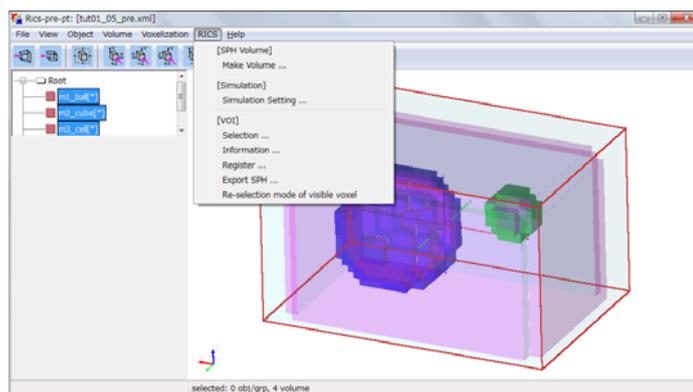
各種パラメータの空間での局在、位置情報を取得作成する方法をしめします。

(1) チャネル局在設定用データ作成 (RICS-pre Volume Maker)

膜輸送機能のチャンネル密度の設定を SPH ファイルにより行うことが可能です。

RICS の Volume Maker を使って作成します。Volume Maker を起動します。

メインメニュー : RICS - Make Volume...



円筒形状で密度 1000 を設定します。

- Primitive タブで 円筒(Cylinder)を選択し、以下の値を設定します。

Center Pos X : 22.0 Y : 8.0 Z : 4.0 配置形状の中心

●Make Cylinder(円筒形状)

Height : 4.0 Radius : 2.0 Direction : X

半径(Radius)と高さ(Height)、軸の向き(Direction)を設定

Volume Space Size(計算領域の寸法)

X : 24.0 Y : 16.0 Z : 14.0

Volume Space Division(Voxel 数)

X : 24 Y : 16 Z : 14

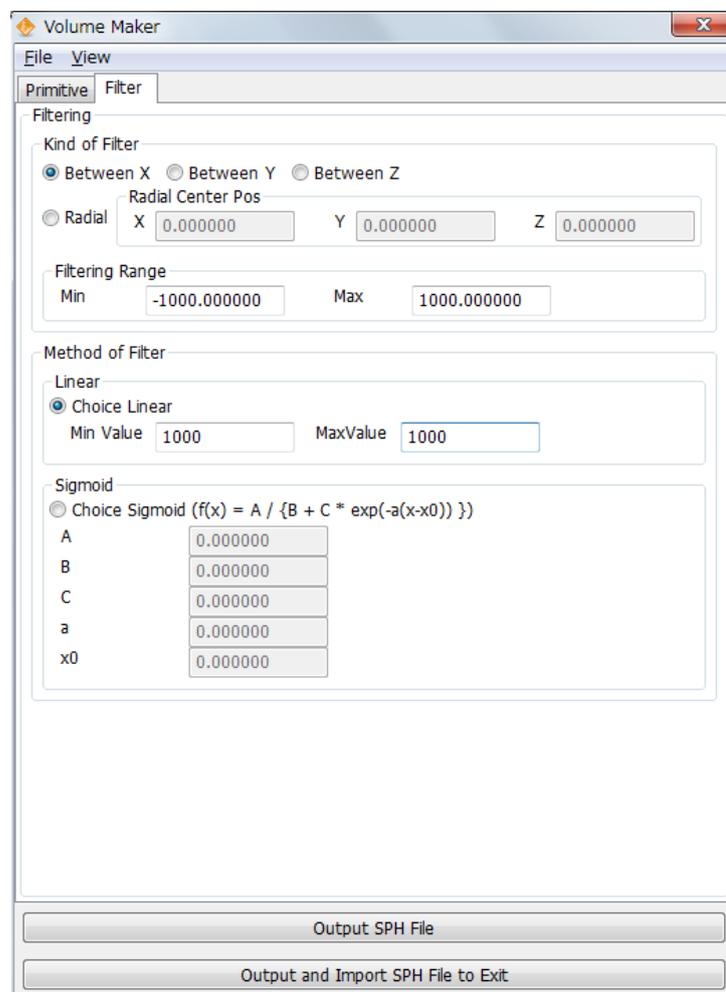


- Filter タブで密度を設定します。

以下の数値を設定します

- Choice Linear

Min Vaule 1000.0 MaxValue : 1000.0



- VolumeMaker 設定ファイルの保存
位置確認後や異なる位置に配置する等、次回の入力の手間を減らすため、設定ファイルを保存しておきます。

メインメニュー : File - Save Parameter XML
 ファイル名 : tut01_06_MakeVol_channel.xml(任意)
 ※次回、メニューから読み込むと設定した値が反映されます。
 メインメニュー : File - Open Parameter XML

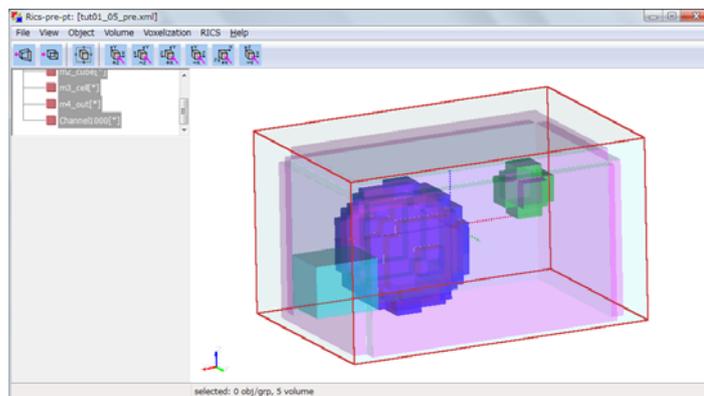
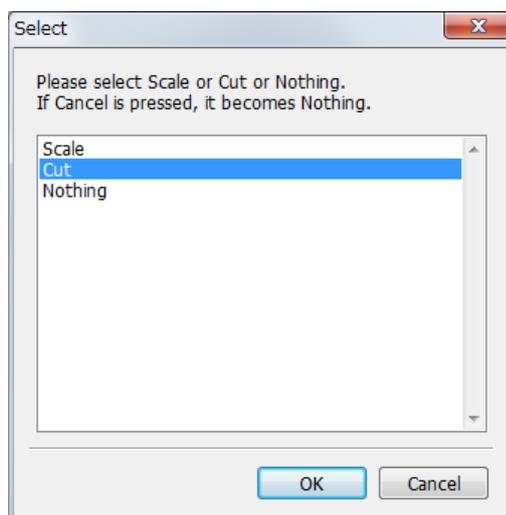
- SPH ファイル出力 & Rics-pre 読み込み

SPH ファイルの出力と同時に RICS-pre に読み込んで位置を確認します。

Output and Import SPH File to Exit ボタンを押下し、出力ファイル名を以下の通り指定します。

出力ファイル名：Channel1000.sph

RICS-pre で SPH ファイルを読み込む時、SVX に自動変換します。その時、入力する SPH の Voxel に 0~1.0 の範囲を超える値が入っている場合に、どのように処理するか、確認するダイアログが表示されます。位置の確認のためだけに読み込むので、ここでは Cut を指定して OK を押下します。



注) Volume Maker では各 Voxel について指定した基本形状(Primitive)が占める割合(体積率)を計算します。その後、Filter タブの Method of Filter で指定した値を係数としてかけた値を出力します。そのため、形状の境界付近の Voxel の値は指定した値とは異なる場合があります。すべての Voxel に同じ値を指定したい場合は、V-Xpp を使用して対象とする Voxel の体積率を 1.0 に修正し、RICS-pre の SPH 出力機能 (メインメニュー : File - Export - SVX To SPH Voume data files...) を使用して、ファイル出力時の設定で Magnification coefficient に係数を指定して出

力することで可能です。

[この段階のファイル]

ファイル名： tut01_07_with_channel.xml (RICS-pre 用)

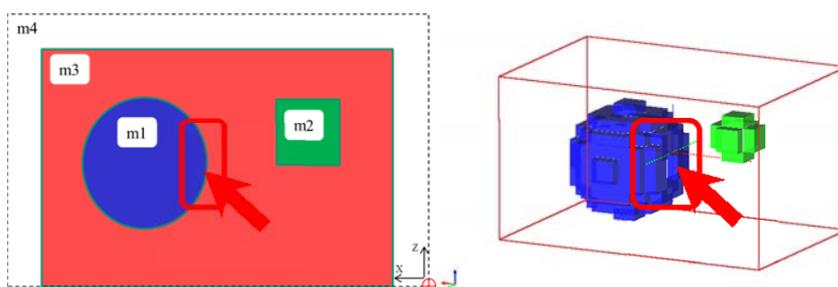
使用データ：

m1_ball.svx、 m2_cube.svx、 m3_cell.svx、 m4_out.svx

Channel1000.svx

(2) 膜反応局在設定用 SPH データ作成 (RICS-pre VOI 抽出、 SPH 出力機能)

m1 と m3 の媒質の間に膜反応の局在を設定します。



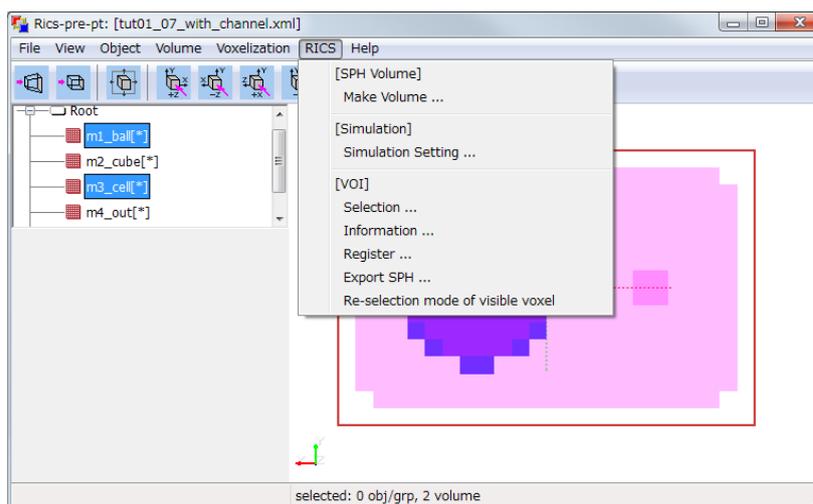
膜反応の局在を指定するために、RICS-pre の VOI 抽出機能を用いて、目的の場所の Voxel を選択し SPH 出力します。

- VOI Selection ダイアログの起動

オブジェクトツリーで対象となる SVX (m1_ball、 m2_cell) を選択します。 Ctrl キーを押しながら m1_ball、 m3_cell をクリックします。その後、

メインメニュー： RICS - [VOI] Selection

をクリックします。



- VOI Selection ダイアログで膜 Voxel を選択
以下の通り設定して、Do Select ボタンを押下します。

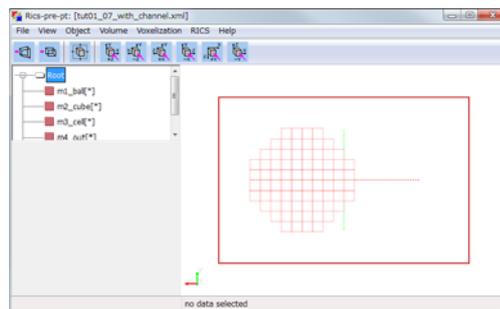
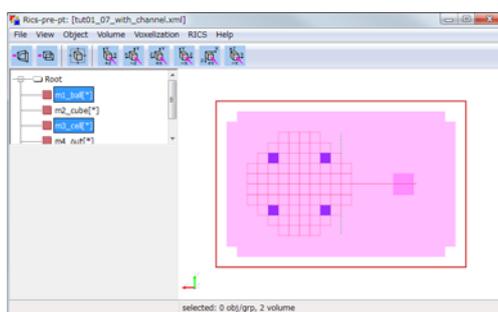
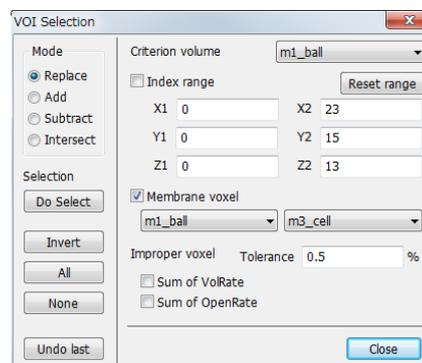
Mode の選択

● Replace

膜 Voxel のチェックボックスを On にし、
対象の媒質をリストから選択

■ Membrane voxel

m1_ball m3_cell

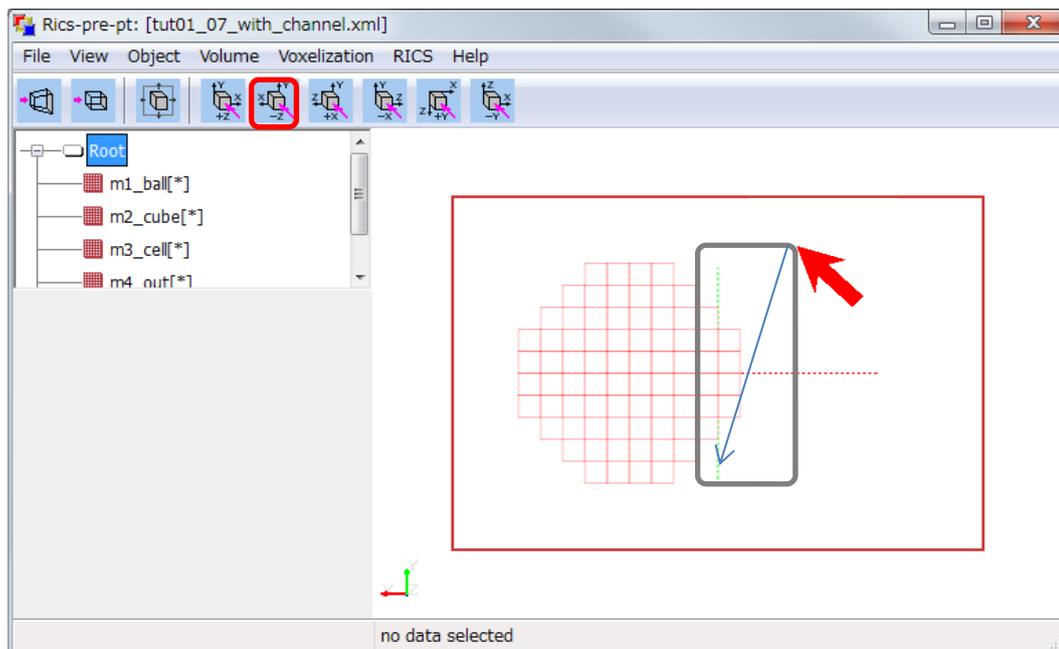


VOI 表示(左：媒質同時選択、右：媒質選択解除)

- ドラッグで対象 Voxel を選択して絞込み
VOI Selection ダイアログの設定は以下の通りにします。

Mode Replace

画面を真下(-Z)から表示後、画面で、Shift + Ctrl を押しながらドラッグで選択します。



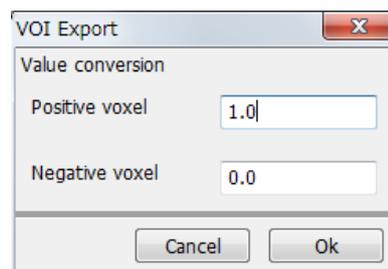
- 選択した Voxel を出力
出力ファイル名を指定して、対象 Voxel に数値を指定して出力します。

メインメニュー：RICS - [VOI] Export SPH...

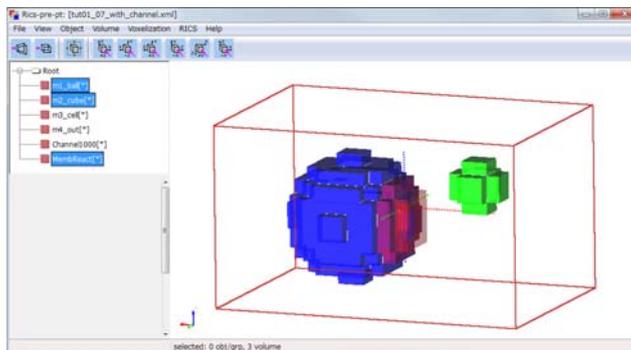
出力ファイル名：MembReact.sph

VOI Export ダイアログの指定値

Positive voxel : 1.0
Negative voxel : 0.0



確認のためファイルを読み込み、shape props ボタンで色を赤に変更します。



[この段階のファイル](フォルダ：O1_1Cell_1model2)
ファイル名：tutO1_08_MembReact.xml(RICS-pre 用)
使用データ：
m1_ball.svx、m2_cube.svx、m3_cell.svx、m4_out.svx
Channel1000.svx、MembReact.sph

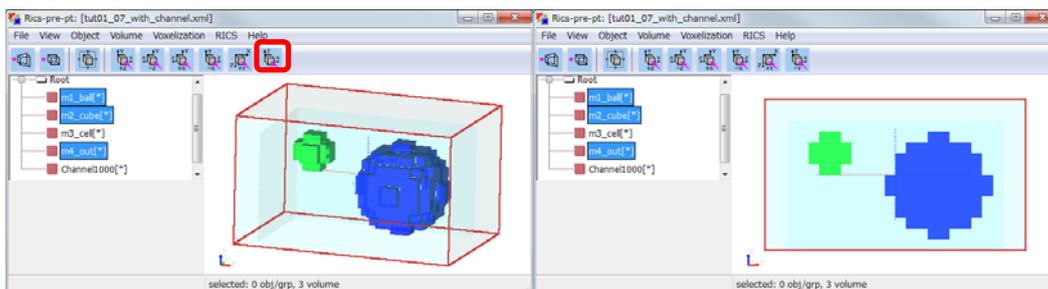
3.3.6. ワープ出入口の Voxel Index の情報出力 (RICS-pre VOI 情報表示)

m2 の上部の m4 の領域にワープの出口を設定します。ここでは、RICS-pre の VOI の Information 表示機能を使って Index 表示をします。まず、外部領域の出口（下図の矢印部分）の Index 情報を取得します。



(1) 選択準備

外部領域を選択するため、オブジェクトツリーで m4_out を選択します。他媒質との位置の確認をするために、m1_ball、m2_cube も Ctrl キーを押しながら選択することで、3 媒質を同時に表示後、VOI Selection ダイアログを起動します。表示を側面(-Y)表示にします。



メインメニュー：RICS - [VOI] Selection

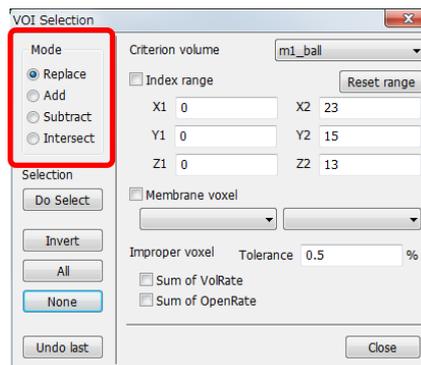
Mode：●Replace

[参考]

VOI Selection ダイアログの Mode について
Ctrl+Shift キーを押しながら画面で Voxel 選択した場合、VOI Selection ダイアログの Mode の設定にしたがって動作します。

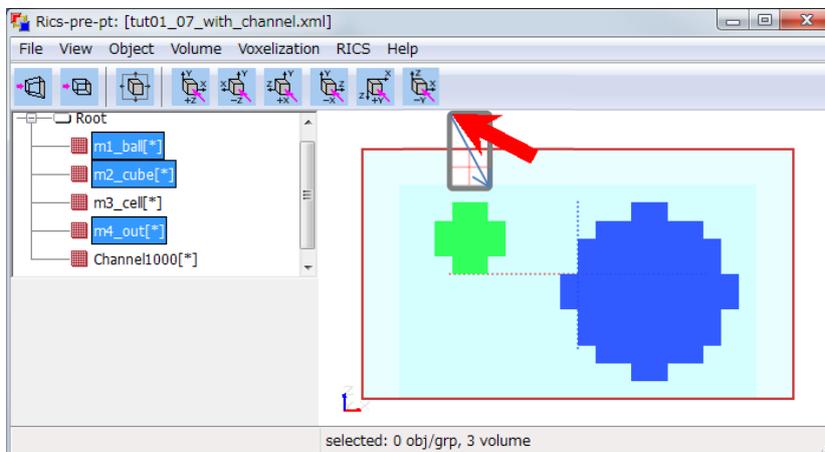
現在の表示に対して

置き換える場合は Replace
追加する場合は Add
取り除く場合は Subtract
重なる部分を選択する場合は Interact
を選択して行います。

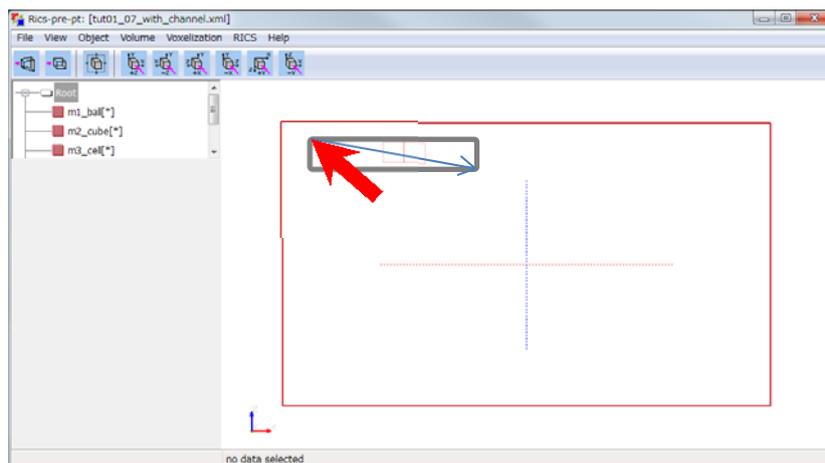


(2) 対象部分の選択、絞込み

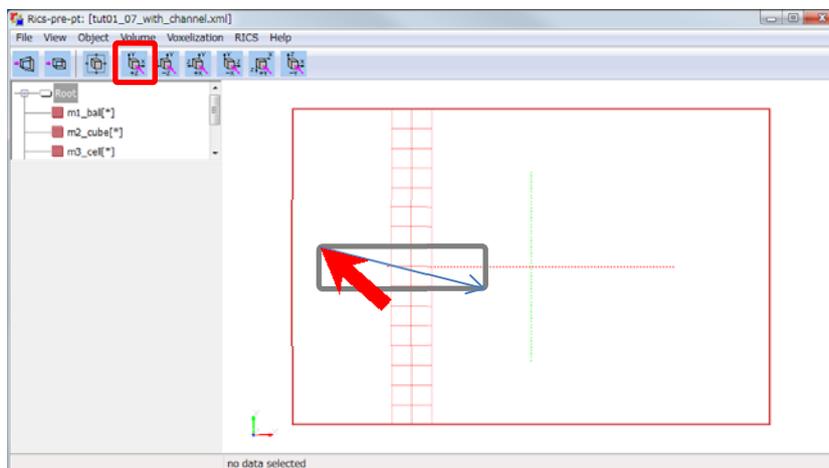
図のように Ctrl+Shift キーを押しながらドラッグします。



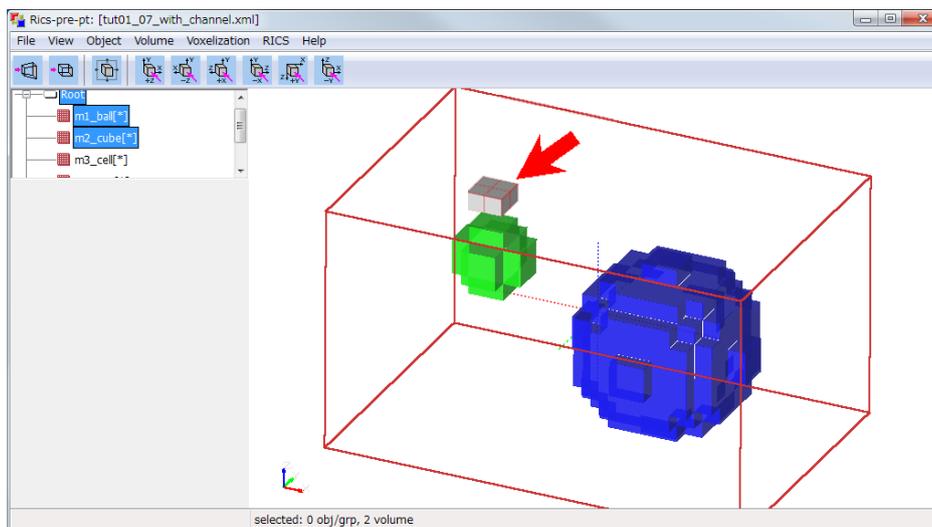
オブジェクトツリーの媒質選択をやめて(Root を選択)し、図のように Ctrl+Shift キーを押しながらドラッグします。



上面表示(+Z)に変更して、図のように Ctrl+Shift キーを押しながらドラッグします。



VOI 選択表示した状態（オブジェクトツリーで、m1_ball、m2_cube を選択）

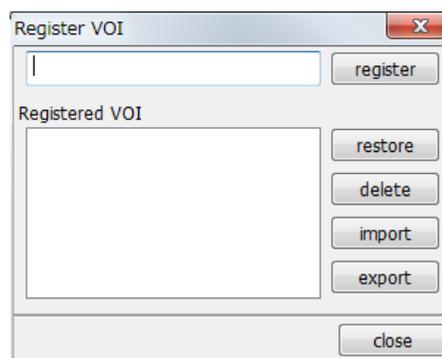


(3) VOI 選択部分の一時保存(参考)

後で確認、修正のため VOI 選択部分を一時的に保存しておきます。

メインメニュー：RICS - [VOI] Register

ここでは、WarpOut と入力して Register ボタンを押下して、Registered VOI にリストを追加します。restore で登録したリストから VOI 選択への復帰が可能です。export で VOI を sbx 形式で保存、import で出力したファイルを読み込むことができます。

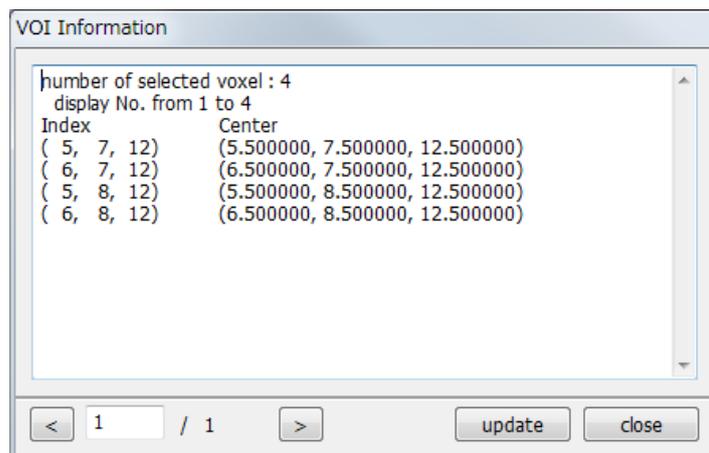


(4) VOI 選択部分の情報の表示、保存

選択 VOIxel の情報を表示します。

メインメニュー：RICS - [VOI] Information

VOI Information ダイアログが表示されるので、情報を選択してコピーします。



```

number of selected voxel : 4
display No. from 1 to 4
Index          Center
( 5, 7, 12)   (5.500000, 7.500000, 12.500000)
( 6, 7, 12)   (6.500000, 7.500000, 12.500000)
( 5, 8, 12)   (5.500000, 8.500000, 12.500000)
( 6, 8, 12)   (6.500000, 8.500000, 12.500000)

```

(5) 入口部分の Index 情報の取得

同様に、m2 の体積率 1.0 の部分の情報を表示します。

オブジェクトツリーで m2_mod を選択し、shape props ボタンを押下し、Volume rate threshold に 1.0 を設定します。

表示された Voxel を Ctrl+Shift キーを押しながらドラッグして Voxel を選択し、Information で Index の確認、および SPH ファイル出力をします。

```

number of selected voxel : 8
display No. from 1 to 8
Index          Center
( 5, 7, 8)    (5.500000, 7.500000, 8.500000)
( 6, 7, 8)    (6.500000, 7.500000, 8.500000)
( 5, 8, 8)    (5.500000, 8.500000, 8.500000)
( 6, 8, 8)    (6.500000, 8.500000, 8.500000)
( 5, 7, 9)    (5.500000, 7.500000, 9.500000)
( 6, 7, 9)    (6.500000, 7.500000, 9.500000)
( 5, 8, 9)    (5.500000, 8.500000, 9.500000)
( 6, 8, 9)    (6.500000, 8.500000, 9.500000)

```

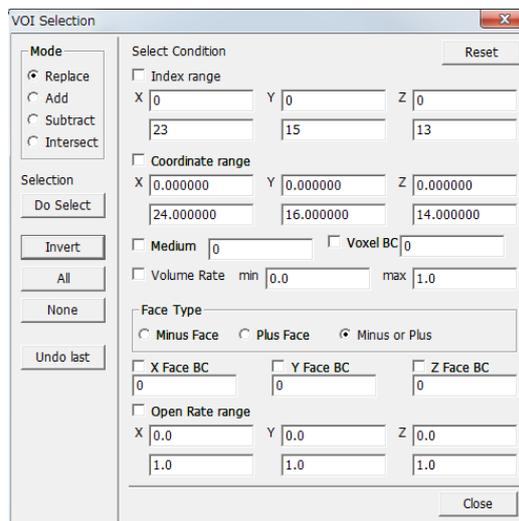
出力ファイル名 : WarpSource.sph

3.3.7. Probe 位置の情報取得 (V-Xpp)

Probe 位置の座標値を取得する方法として、V-Xpp を使用した方法を説明します。

RICS-pre のオブジェクトリツリーで m3_cell を選択後、edit(V-Xpp) ボタンを押して V-Xpp を起動後、VOI Selection ダイアログを起動します。

メインメニュー：VOI - Select VOI



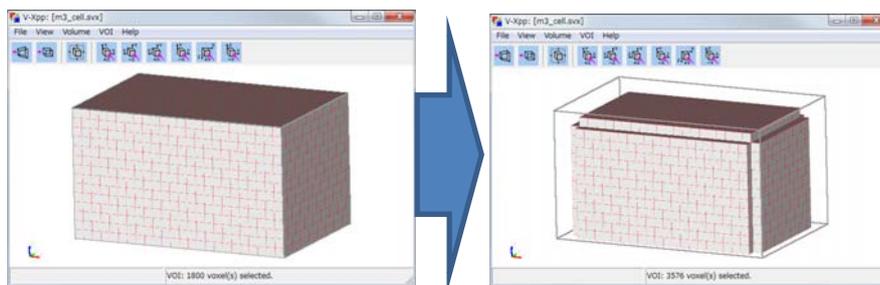
(1) 媒質が 0.0 以外を表示

VOI Selection ダイアログを以下の設定にして、Do Select ボタンを押下します。

Mode ●Replace

■Volume Rate min : 0.0 max : 0.0

Invert ボタンを押下します。



(2) 断面表示

表示している媒質のY-側を選択表示します。

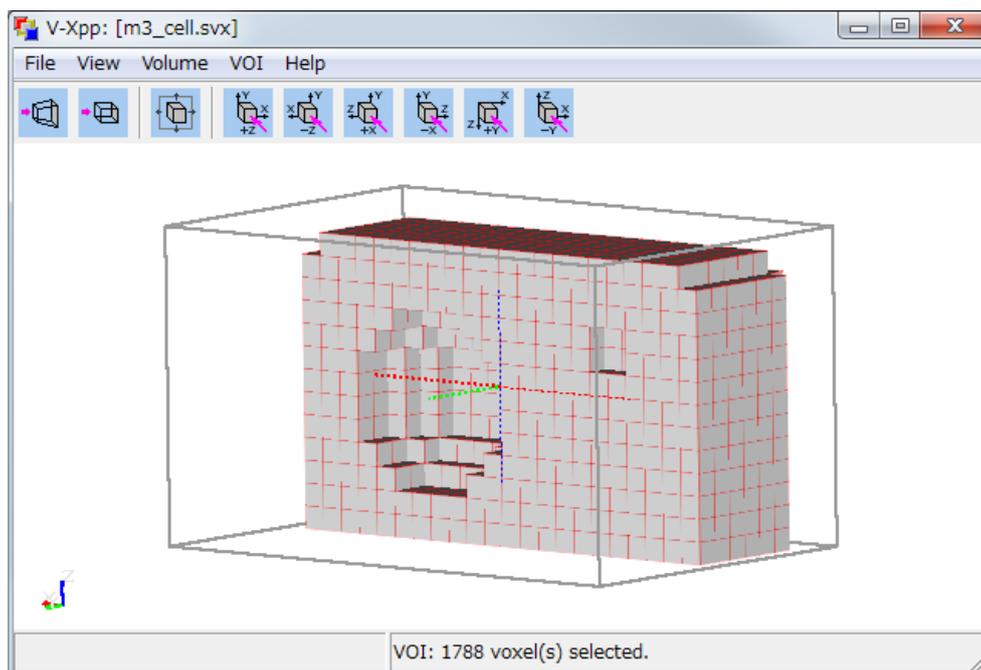
VOI Selection ダイアログを以下の設定にして、Do Select ボタンを押下します。

Mode Intersect

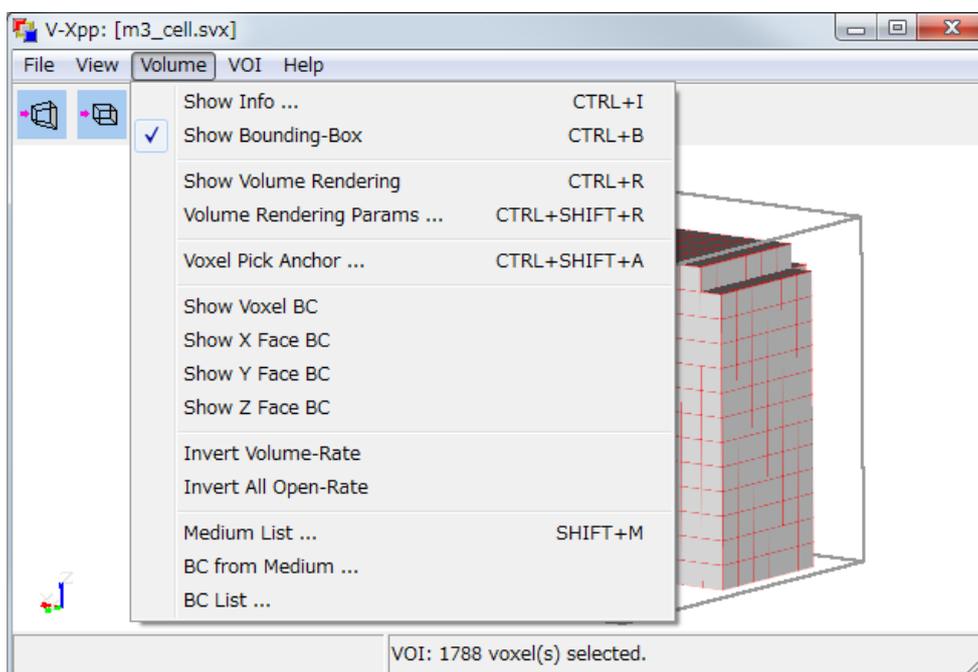
Index range

X: 0	Y: 0	Z: 0
23	7	13

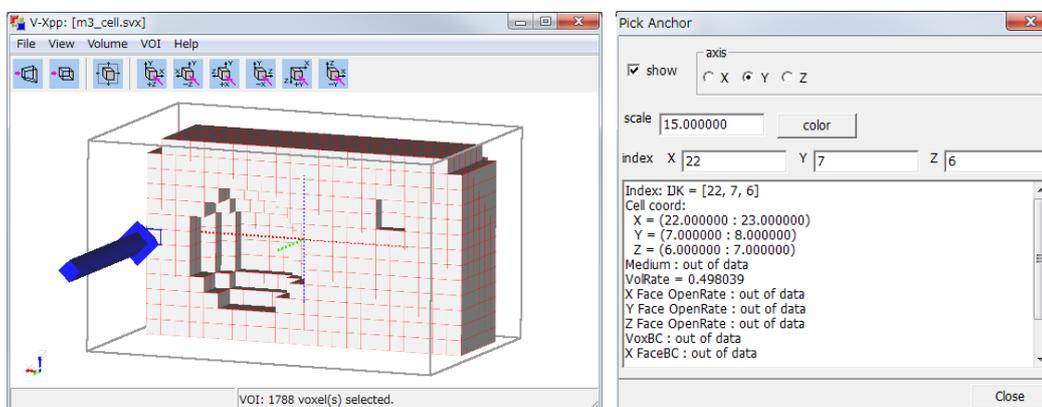
※Index range 以外のチェックボックスが On になっていないことを確認します。



- (3) Probe を設定する Voxel を選択して情報表示
 メインメニュー : Voxel Pick Anchor...



チャンネルの設定位置、膜反応の設定位置、m2_cube の下付近を適宜選択して Voxel の情報 (Index、座標値) をコピー&ペーストで取得します。



チャンネル設定位置

Index: IJK = [22, 7, 6]

Cell coord:

X = (22.000000 : 23.000000)

Y = (7.000000 : 8.000000)

Z = (4.000000 : 5.000000)

膜反応設定位置

Index: IJK = [11, 7, 6]

Cell coord:

X = (11.000000 : 12.000000)

Y = (7.000000 : 8.000000)

Z = (6.000000 : 7.000000)

m2_cube 下(膜 Voxel 部分)

Index: IJK = [6, 7, 7]

Cell coord:

X = (6.000000 : 7.000000)

Y = (7.000000 : 8.000000)

Z = (7.000000 : 8.000000)

外部領域(m2_cube)

Index: IJK = [6, 7, 12]

Cell coord:

X = (6.000000 : 7.000000)

Y = (7.000000 : 8.000000)

Z = (12.000000 : 13.000000)

3.3.8. 形状データのコピー（Setting 部でのデータ設定準備）

作成した形状データ、局在設定データを一つにまとめます。ここでは下記の構成の in/フォルダにコピーします。



媒質ファイル

m1_ball.svx、 m2_cube.svx、 m3_cell.svx、 m4_out.svx

チャンネルの局在（チャンネル密度）

Channel1000.sph

膜反応の局在（Pi の局在）

MembReact.sph

ワープ入口

WarpSource.sph

3.4. 解析条件設定

作成した SVX データ、SPH データ、座標 Index を元に解析条件の設定を行います。

Setting 部の起動には 2 種類の起動方法があります。

- Windows のメニュー、Simulation Setting で起動
- RICS-pre メインメニュー：RICS - Simulation Setting

3.4.1. EML の登録（メインメニュー：File - EML Setting）

使用する EML を設定します。

Add ボタンで使用する EML を追加します。

EML ファイル名： ./eml/A_B_for_1Cell_1Gnoe.eml

3.4.2. モデル規模、シミュレーション条件の設定 (Domain Info タブ)

以下の通り設定します。

VoxelOrigin(原点の設定) X: 0.0 Y: 0.0 Z: 0.0

VoxelSize(Voxel 数) X: 24 Y: 16 Z: 14

VoxelWidth(計算領域全体の長さ)/Pitch(1Voxel の長さ)

●Use VoxelPitch(1Voxel の長さの設定を選択して)

X: 1.0 Y: 1.0 Z: 1.0

Length Unit (長さの単位の設定)

Use Length Unit Unit: 1.0e-6

Time Unit (時間の単位の設定)

Use Time Unit Unit: 1.0

StartCondition(初期計算からかリスタートかの選択)

Condition: Initial

dt(時間ステップ)

●Use dt dt: 1.0e-5

Time Integration(時間発展手法の選択)

●Euler

CalculationSteps(計算する Step 数)

Step: 1000

3.4.3. 媒質・物質指定 (Cell & Molecular タブ)

各媒質の物質について下記の通りパラメータを指定します。

物質のパラメータ (初期濃度、拡散係数) (再掲: 最終値は 3.2 計算モデル を参照)

物質拡散係数		2.0e+4	0.0	2.0e+4	2.0e+4	0.0	2.0e+4
物質名(Full ID)		A	E1	B			
物質初期濃度	媒質名\物質名	X	E1	ATP	ADP	Pi	Y
	m1_ball	—	—	—	—	—	—
	m2_cube	—	—	—	—	—	0.0
	m3_cell	0.0	100.0	0.0	0.0	0.0	1.0e+3
	m4_out	1.0e+3	—	—	—	—	0.0

※物質名(FullID)は EML の物質名

(1) 媒質設定 (Cell)

Eml Dir (EML を保存するディレクトリのパス) : ./eml を入力。

Add ボタンで媒質を追加し、必要に応じて EML の設定を行います。

今回、膜反応を設定するだけなので、ここでは EML を設定せず、4つの媒質名を登録します。

m1_ball、m2_cube、m3_cell、m4_out

cell

Eml Dir

ID	Name	EML File	Fusion	Calc Thres...
1	m1_ball			
2	m2_cube			
3	m3_cell			
4	m4_out			

(2) 物質設定 (Molecular)

物質名を設定します。

Add ボタンで物質名を設定し、代謝で使用する物質については FullID を設定し、必要に応じて物質の拡散係数を設定します。

molecular

ID	Name	Full ID	DifCoef
5	X	Variable:/:A	1.000000e+000
6	E1	Variable:/:E1	0.000000e+000
7	ATP	Variable:/:B	1.000000e+000
8	ADP		5.000000e-001
9	Pi		5.000000e-001
10	Y		1.000000e+000

Display cell Selectet

設定後画面

- 物質設定ダイアログの起動
Add ボタンでダイアログを起動して物質を設定します。
- 物質名、FullID の設定
MolecularEntry タブで以下を設定します。
Name(物質名) : X
■ Use Full ID (EML 物質名)

Variable : / :A

※リスト(/、A)から選択

■Use Diffusion Coefficient : 1.0

Edit Molecular

MolecularEntry Initial

Molecular

Name X

ID 5

Molecular Entry

Full ID

Use Full ID

Full ID

Variable: / :A

Diffusion Coefficient

Use Diffusion Coefficient

Diffusion Coefficient 1.000000e+000

OK Cancel

• 各媒質毎の初期値設定(均一の濃度の場合)

Initial タブで各媒質の均一な初期濃度を設定します。

Edit Molecular

MolecularEntry Initial

Initial Concentration

	Name	Cell ID	MolConc
1	m1_ball	1	
2	m2_cube	2	
3	m3_cell	3	0.0
4	m4_out	4	1000

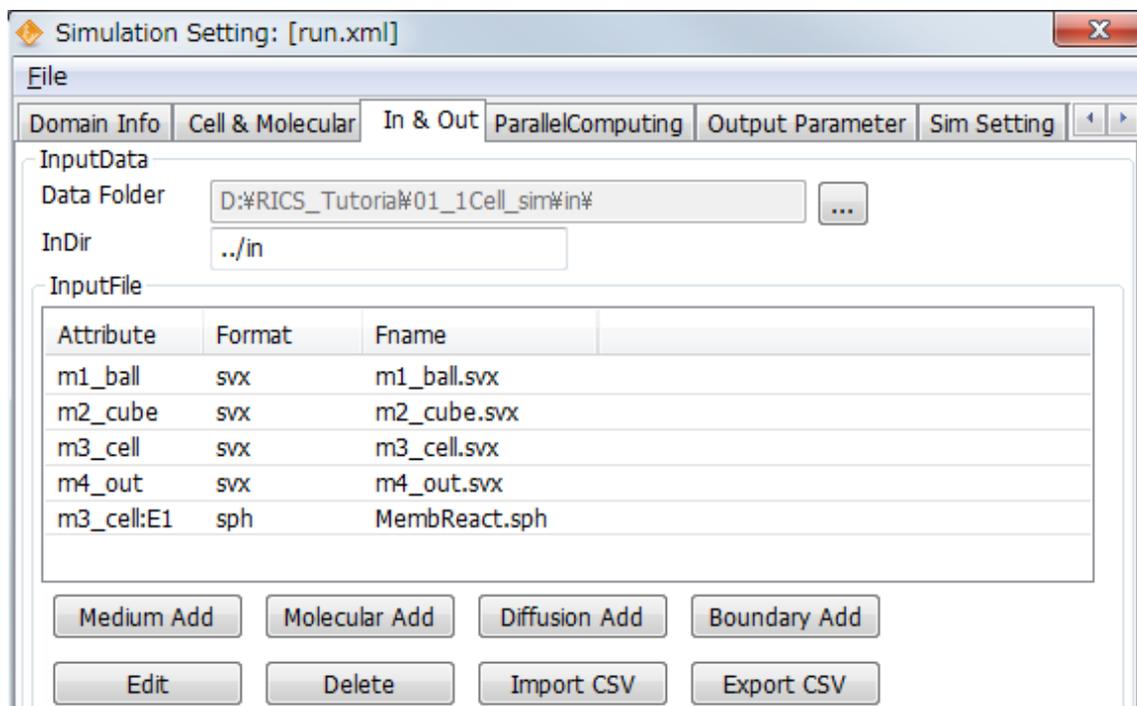
OK Cancel

同様に全物質を設定します。

3.4.4. 入出力ファイル指定 (In & Out タブ)

(1) 入力データ (InputData)

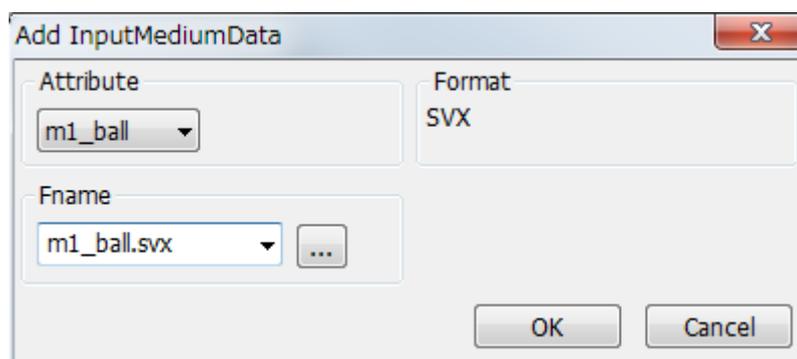
媒質形状データの設定、物質の初期濃度等、空間に分布を持たせる場合に設定します。



- 媒質データの設定

Medium Add ボタンで Add InputMediumData ダイアログを起動します。
作成済みの各媒質データを設定します。

媒質名を Attribute のリストから、対応するファイルを Fname のリストから選択して、OK ボタンを押します。



他の媒質についても同様に作業して、以下のリストの通り設定します。

Attribute	Fname
m1_ball	m1_ball.svx
m2_cube	m2_cube.svx

m3_cell	m3_cell.svx
m4_out	m4_out.svx

- 物質初期濃度の設定

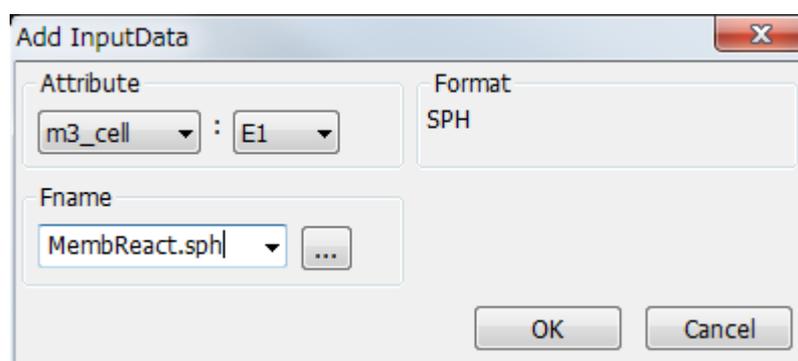
膜反応について Pi の初期濃度を設定することで膜反応の局在を設定します。

Molecular Add ボタンで Add InputData ダイアログを起動します。

Attribute、Fname に以下の通り設定します。

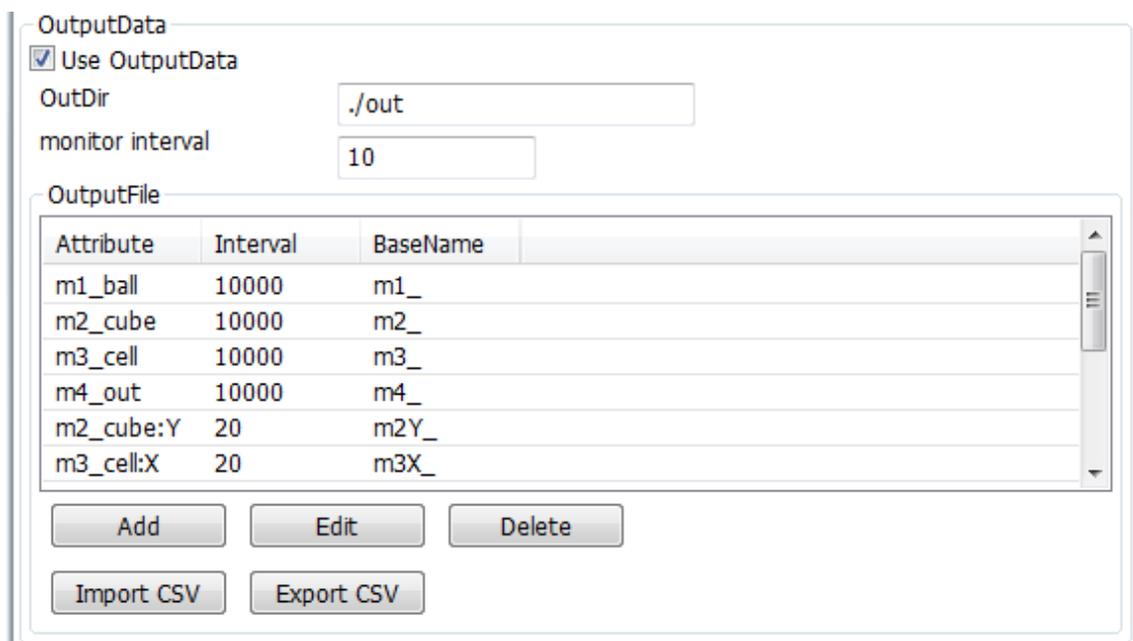
m3_cell : E1

Fname : MembReact.sph



(2) 出力データ (OutputData)

計算結果の出力に関する設定をします。



- 出力基本情報の設定

■ Use OutputData ファイル出力を行う場合にチェックします。

OutDir(バイナリデータ出力ディレクトリの指定) : ./out
 monitor interval(標準出力への出力 Step 間隔の指定) : 10

- バイナリデータ(SPH)出力の設定(OutputFile リストの作成)
 物質濃度分布等のバイナリ出力のための設定をします。

Add ボタンで Add OutputData ダイアログを起動します。

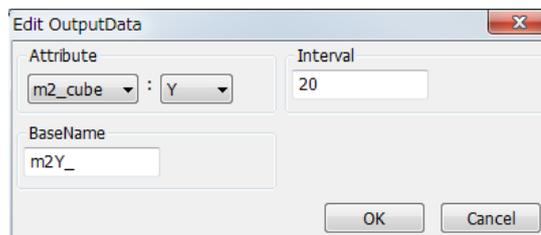
Attribute : 媒質名 : 物質名

BaseName : 出力ファイルのベース名

Interval : 出力間隔

BaseName とステップ数のファイル名

でバイナリファイル(SPH)が出力されます。



右記 Attribute に m2_cube:Y、Interval : 20 を指定した場合、

媒質 m2_cube の物質 Y の濃度分布が以下のファイル名で出力されます。

m2Y_0000000000.sph、m2Y_0000000020.sph、m2Y_0000000040.sph、
 m2Y_0000000060.sph、m2Y_0000000080.sph、・・・

※最終的な出力の有無は、OutputParameter タブで指定します。

ここに出カファイルのリストを作成することにより、上記以外に解析実行時に下記の処理が行われます。

Checkpoint Interval で指定した間隔毎にリストにあるファイルを出カ
 上記、m2_cube の設定後、Export CSV でリスト出力し媒質の設定を追加し、Import
 CSV で修正したファイルを読み込みます。

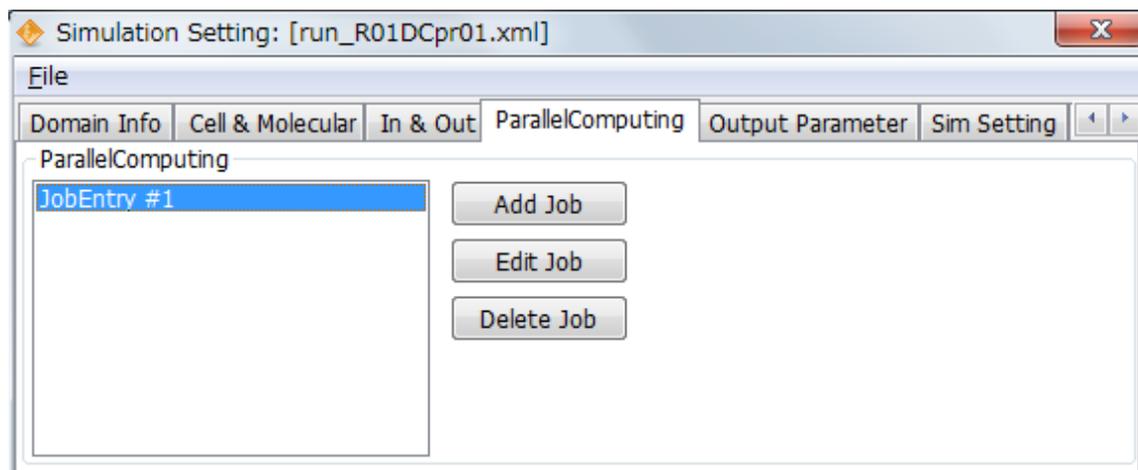
Attribute	Format	BaseName	Interval
m1_ball	sph	m1_	10000
m2_cube	sph	m2_	10000
m3_cell	sph	m3_	10000
m4_out	sph	m4_	10000
m2_cube:Y	sph	m2Y_	20
m3_cell:X	sph	m3X_	20
m3_cell:Y	sph	m3Y_	20
m3_cell:E1	sph	m3E1_	20
m3_cell:ATP	sph	m3ATP_	20
m3_cell:ADP	sph	m3ADP_	20
m3_cell:Pi	sph	m3Pi_	20
m4_out:X	sph	m4X_	20
m4_out:Y	sph	m4Y_	20

3.4.5. 並列化条件の設定 (Parallel Computing タブ)

MPI 並列時の並列条件を設定します。

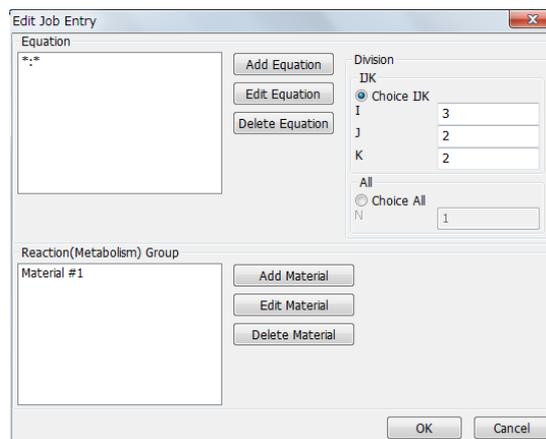
ここでは領域分割で、3x2x2 のプロセスで分割を指定します。

ParallelComputing のリストで JobEntry #1 を選択して、Edit Job ボタンを押下して Edit Job Entry ダイアログを起動します。



Equation に ** が表示されているのを確認して、Division に以下を設定して OK を押下します。

- Choice IJK
 - I : 3
 - J : 2
 - K : 2



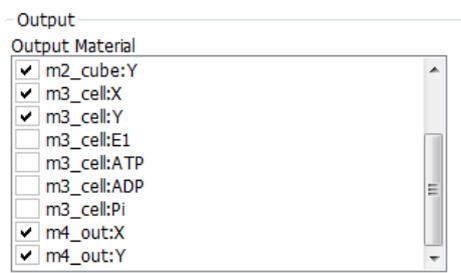
3.4.6. ファイル出力パラメータの設定 (Output Parameter タブ)

(1) 出力チェック (Output Material)

バイナリファイルとして可視化したいファイルにチェックを入れます。

ここでは Output Material の以下にチェックをします。

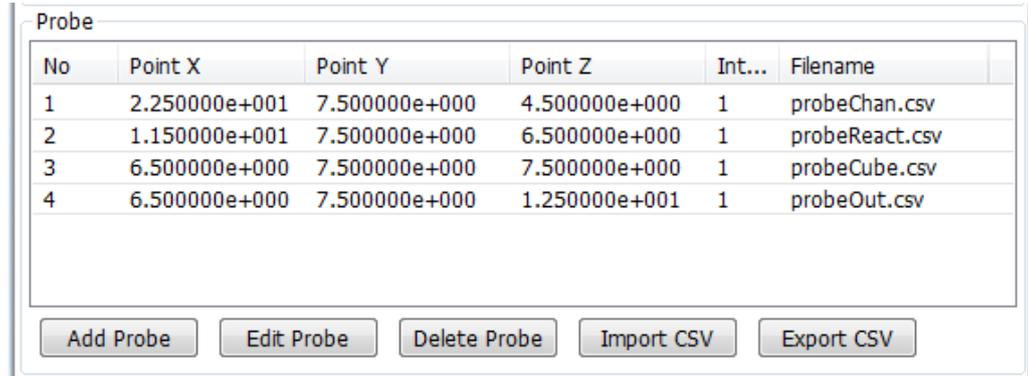
- m2_cube:Y
- m3_cell:X
- m3_cell:Y
- m3_cell:ATP
- m4_out:X
- m4_out:Y



(2) 数値観測点設定 (Probe)

空間上の指定点で物質濃度を CSV 形式で出力するための設定を行います。

Add Probe ボタンで点を入力するための行を追加し、その行を選択して、Edit Probe ボタンを押下します。



Edit Prob ダイアログで以下を設定します。

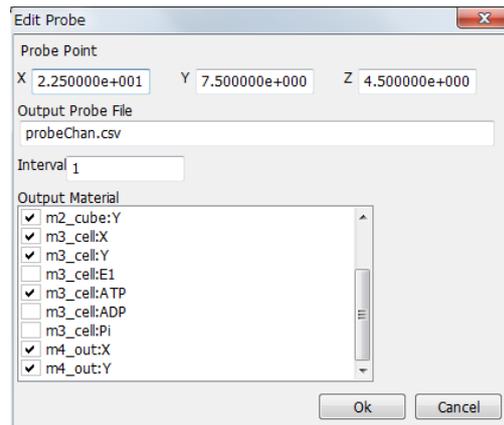
ProbePoint(出力する点の座標値)

Output Probe File(出力ファイル名)

Interval(出力間隔)

OutputMaterial(出力物質)

※出力物質はリストから選択



今回、以下の通り設定します (Interval(出力間隔)は全て 1 とします)。

ProbePoint(座標値)			Output Probe File	Output Material
X	Y	Z	出力ファイル名	出力物質名
22.5	7.5	4.5	probeChan.csv	m4_out:X, m3_cell:X,
11.5	7.5	6.5	probeReact.csv	m3_cell:X, m3_cell:ATP
6.5	7.5	7.5	probeCube.csv	m3_cell:ATP, m3_cell:ADP, m2_cube:Y
6.5	7.5	12.5	probeOut.csv	m4_cell:Y

3.4.7. 各機能の実行制御パラメータの設定 (SimSetting タブ)

反応、拡散、膜輸送の各ソルバを実行する/しないの設定を行います。

ここでは以下の通り設定します。

reaction(metabolism) 反応(代謝)機能の設定

■execution(代謝の実行)

Diffusion 拡散機能の設定

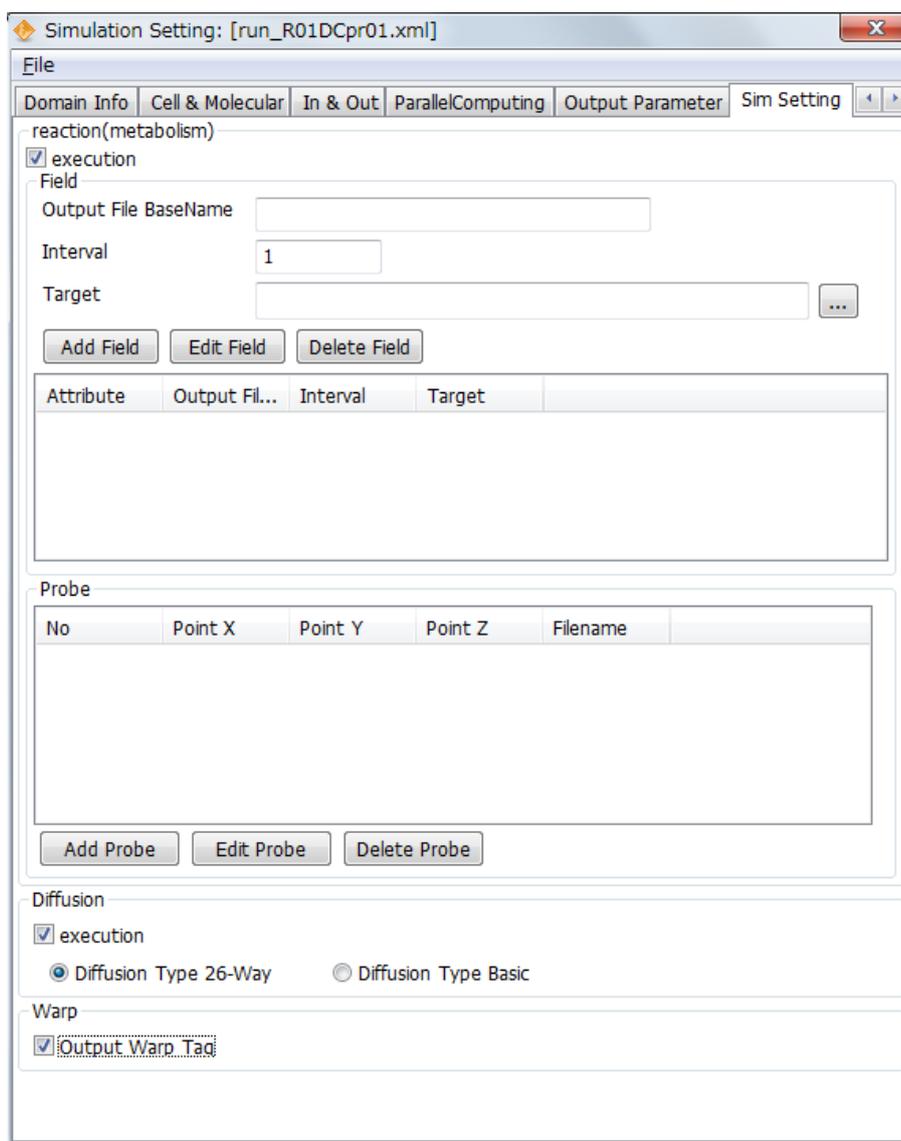
■diffusion(拡散の実行)

●Diffusion Type 26way(拡散手法斜め位置考慮)

○Diffusion Type Basic(直行 6 方向)

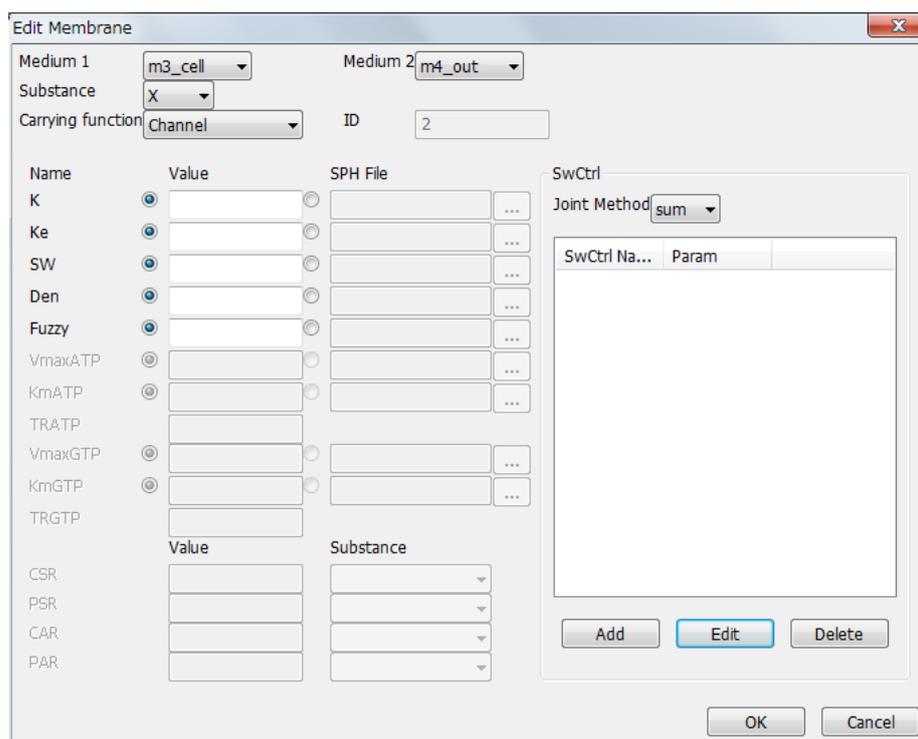
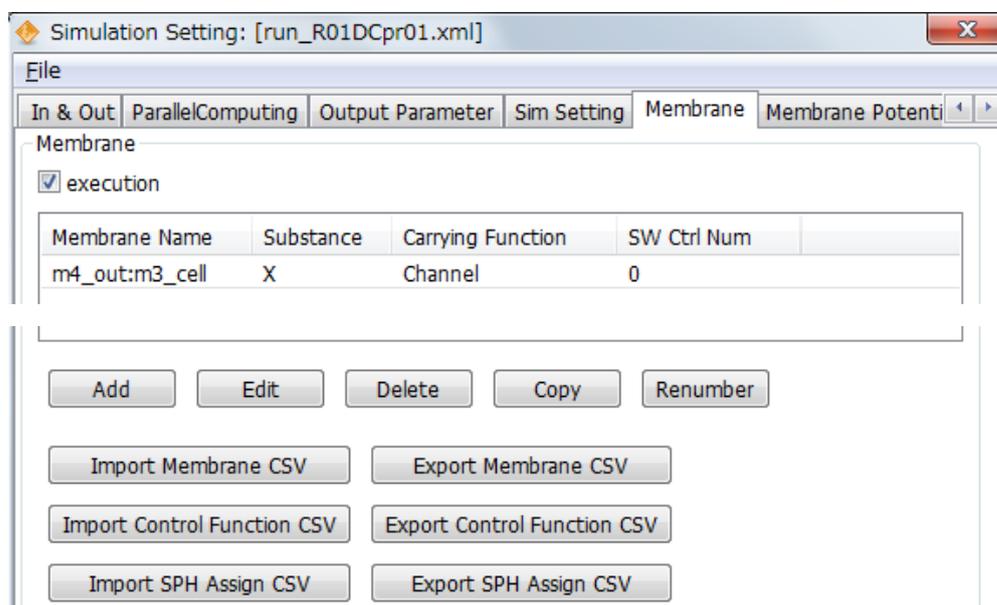
Warp ワープ機能の設定

■Output Warp Tag (Warp の実行)



3.4.8. 膜輸送機能の設定 (Membrane タブ)

膜輸送機能のパラメータの設定を行います。



(1) チャネルの設定

Add ボタンを押下して、Edit Membrane ダイアログを起動します。

媒質 m4_out(外部)と m3_cell の間にチャネルを設定します。

Medium1(媒質) : m3_cell Medium2(媒質) : m4_out

Substance(輸送物質名) : X

Carrying function(膜輸送機能の種類) : Channel

Name 輸送パラメータ

K : 0.5 SW : 1.0 Fuzzy : 1.0

OK ボタンを押下してチャンネルの設定を終了します。

(2) ポンプの設定

Membrane タブの Add ボタンを押下して、Edit Membrane ダイアログを起動します。通常の輸送パラメータの他に SW の値を動的に変更する SwCtrl 機能を使用します。媒質 m4_out(外部)と m3_cell の間にチャンネルを設定します。

• 輸送パラメータの設定

Medium1(媒質) : m3_cell Medium2(媒質) : m2_out

Substance(輸送物質名) : Y

Carrying function(膜輸送機能の種類) : Pump

Name 輸送パラメータ

SW : 0.0 Den : 1.0 Fuzzy : 1.0

VmaxATP : 20.0 KmATP : 2.0 TRATP : 1.0

• SwCtrl の設定

Joint Method : sum

(複数式を記述した時の式同士の計算方法)

Add で式を入力

Control Function : michaelis

Vmax : 1.0

Km : 1.0

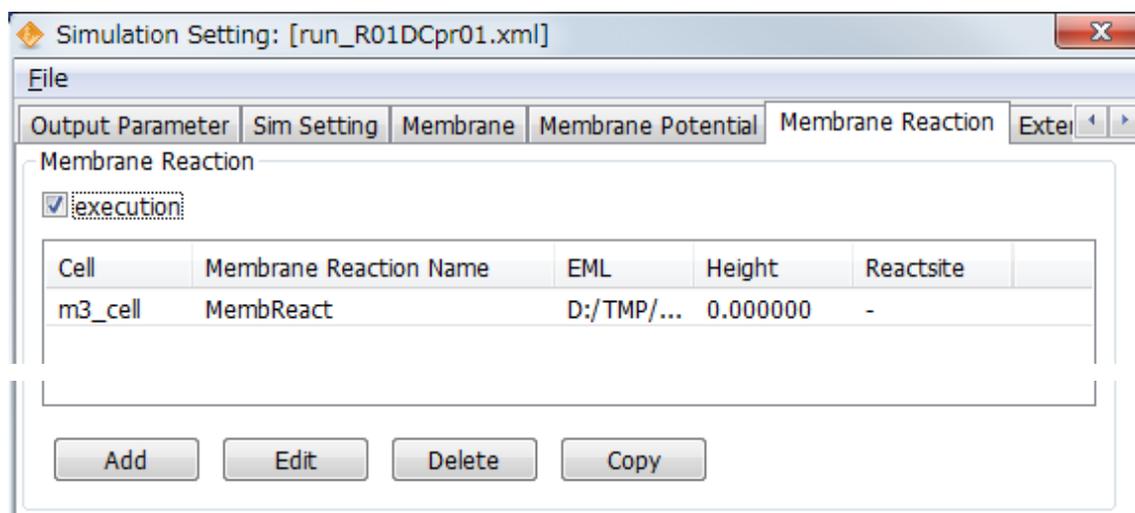
S : m3_cell:ATP(制御物質として使用する物質 媒質名:物質名)

3.4.9. 膜反応の設定 (Membrane Reaction タブ)

膜反応の EML、パラメータを設定します。

Membrane Reaction タブ以下を設定します。

- execution のチェックを On



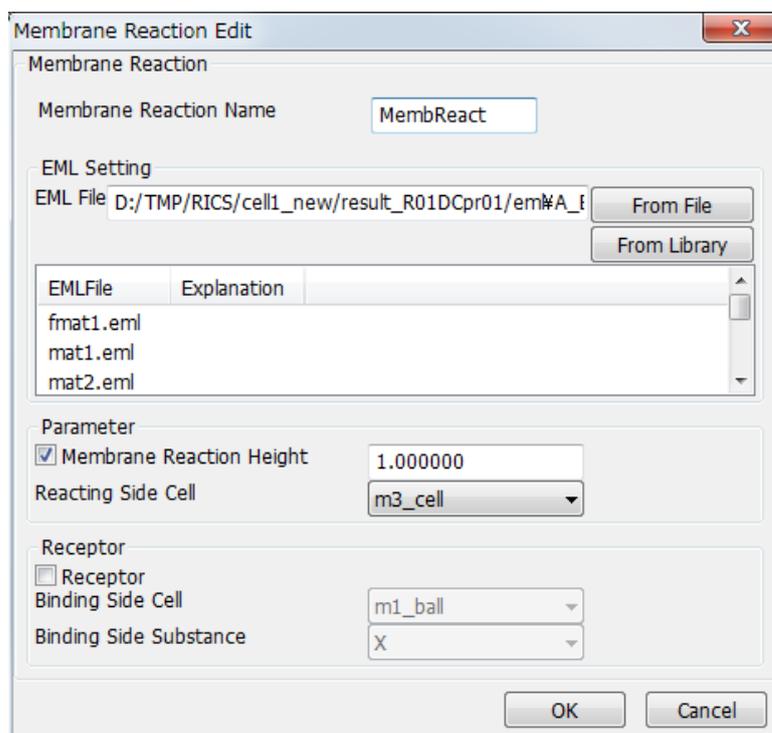
Add ボタンを押下して、Membrane Reaction Edit ダイアログを起動します。

Membrane Reaction Name : MembReact

EML Setting : A_B_20090917_2.eml

Parameter

- Membrane Reaction Height : 1.0
- Reacting Side Cell : m3_cell



3.4.10. ワープの設定

ワープはテキストエディター等を使ってXMLを作成、挿入します。

ここまで設定した解析条件のファイルを保存します。

メインメニュー：File - Save Simulation Setting File

保存するファイル名を指定して保存します。

出力ファイル名：run_cell1.xml

テキストエディターでファイルを開いて、以下のWarpの設定を挿入します。

ワープ元：m2_cube(Warpの制御する位置場所も同じ)

SPH指定(移動元、移動制御の判定を行う位置の指定)

File名：WarpSource.sph

ワープ先：m4_cellの下記Index

(5,7,12)、(6,7,12)、(5,8,12)、(6,8,12)

ワープ物質(制御(Trigger)物質)：m2_cube:Y

物質をワープするタイミング

指定したVoxelの物質m2_cube:Yの最小値が閾値：0.5以上になった時

上記の条件を設定したXMLファイル

<InputData basedir="./in">~</InputData>の間に追加

```
<InFile attr="WARP:src_pos" format="sph" fname="WarpSource.sph" multi="no" />
```

<Elem name="sim_setting">~</Elem>の間に追加

```
<Elem name="warp">  
<Param name="execution" dtype="STRING" value="true" />  
</Elem>
```

<Elem name="sim_setting">~</Elem>の後ろ (<Parameter>~</Parameter>の間)に追加

```

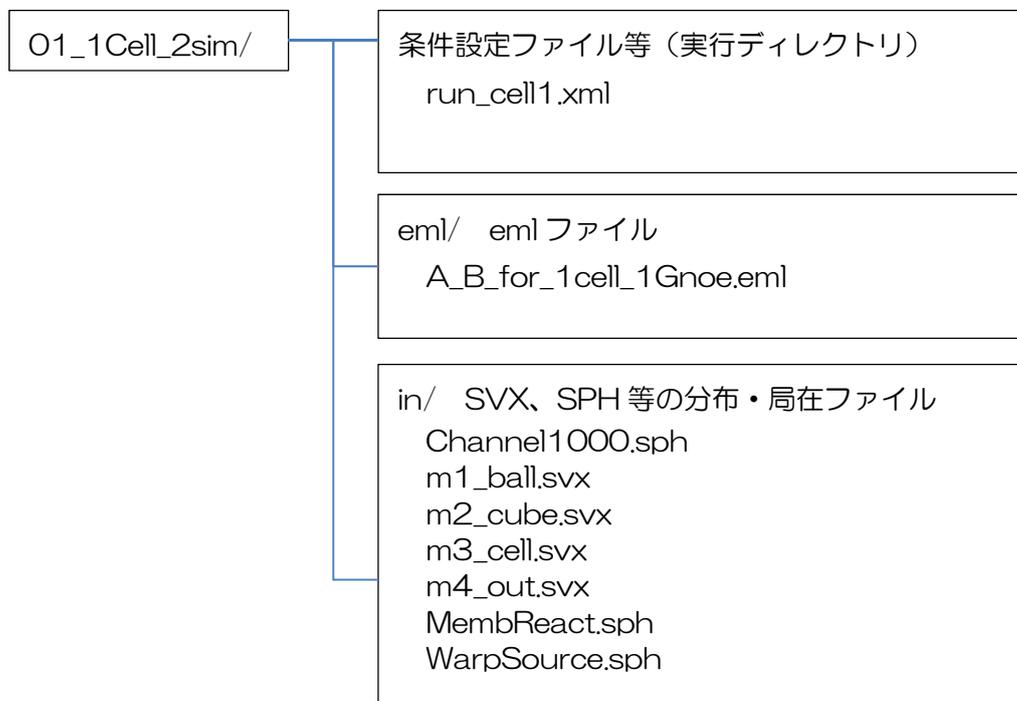
<Elem name="warp_setting">
  <Elem name="WarpGroup" id="1" comment="Warp Cube2Out">
    <Param name="type" dtype="STRING" value="Direct"/>
    <Elem name="TempArea" id="1">
      <Param name="TempAreaVolume" dtype="REAL" value="1.0"/>
    </Elem>
  <Elem name="WarpInfo" id="1">
    <Elem name="SourceInfo">
      <Param name="equation" dtype="STRING" value="m2_cube:Y"/>
      <Param name="ValueType" dtype="STRING" value="fixed"/>
      <Param name="WarpDensity" dtype="REAL" value="0.9"/>
      <Param name="ValueDefinition" dtype="STRING" value="DensityRatio"/>
      <Elem name="position">
        <Elem name="SPH">
          <Param name="attr" dtype="STRING" value="WARP:src_pos"/>
        </Elem>
      </Elem>
    </Elem> !SourceInfo
  <Elem name="SourceTrigger">
    <Param name="equation" dtype="STRING" value="m2_cube:Y"/>
    <Param name="OpType" dtype="STRING" value="min"/>
    <Param name="CompType" dtype="STRING" value="GreaterEqual"/>
    <Param name="ValueType" dtype="STRING" value="fixed"/>
    <Param name="threshold" dtype="REAL" value="0.5"/>
    <Elem name="position">
      <Elem name="SPH">
        <Param name="attr" dtype="STRING" value="WARP:src_pos"/>
      </Elem>
    </Elem>
  </Elem> !SourceTriger
  <Elem name="DistinationInfo">
    <Param name="equation" dtype="STRING" value="m4_out:Y"/>
    <Param name="ValueType" dtype="STRING" value="fixed"/>
    <Elem name="position">
      <Elem name="index">
        <Param name="I" dtype="INT" value="5"/>
        <Param name="J" dtype="INT" value="7"/>
        <Param name="K" dtype="INT" value="12"/>
        <Param name="I" dtype="INT" value="6"/>
        <Param name="J" dtype="INT" value="7"/>
        <Param name="K" dtype="INT" value="12"/>
        <Param name="I" dtype="INT" value="5"/>
        <Param name="J" dtype="INT" value="8"/>
        <Param name="K" dtype="INT" value="12"/>
        <Param name="I" dtype="INT" value="6"/>
        <Param name="J" dtype="INT" value="8"/>
        <Param name="K" dtype="INT" value="12"/>
      </Elem>
    </Elem>
  </Elem> !DistInfo
</Elem> !WarpInfo
</Elem> !WarpGroup
</Elem> !WarpSetting

```

3.5. 解析の実行

作成した XML を指定してジョブを実行します。

ディレクトリ構成と各ディレクトリのファイルは以下のようになります。



実行はコマンドプロンプトより実行します。

解析条件ファイルのあるディレクトリに移動し、以下のコマンドを実行します。

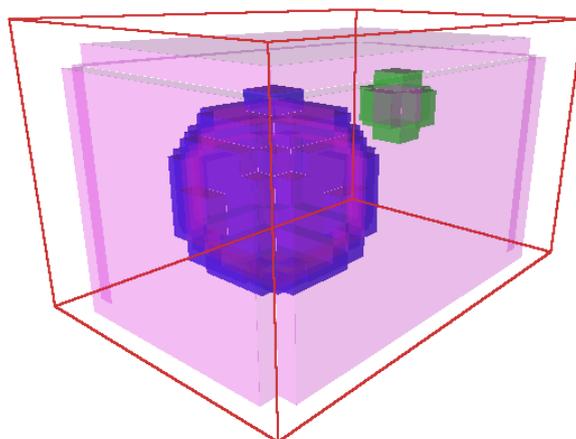
```
Prompt> rcellsim run.xml
```

また、並列処理で解析を行う場合は、以下のコマンドを実行します。

```
Prompt> mpirun -np 64 rcellsim run.xml
```

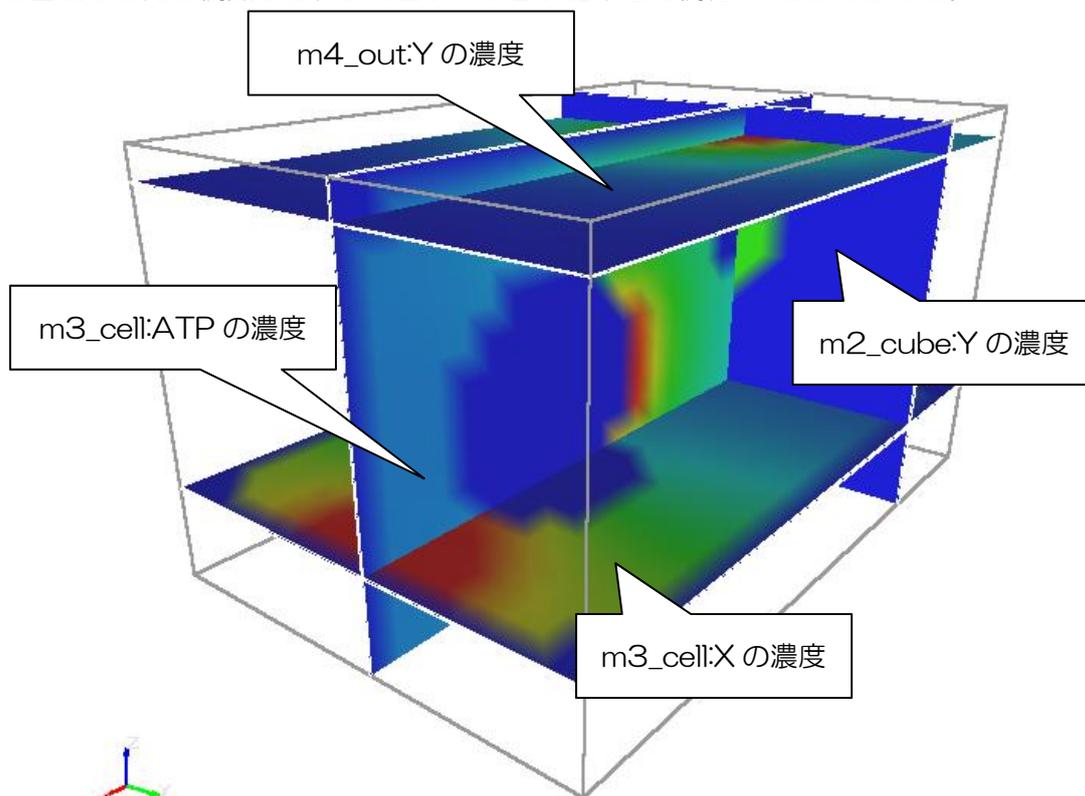
解析条件に誤りが無ければ、指定したディレクトリ (./out) に、解析結果が出力されます。

以下は元のSVXモデルをRICS-preで可視化した物



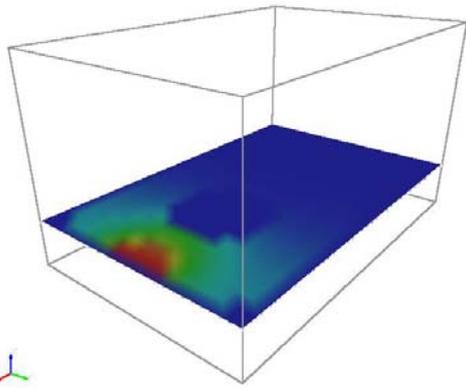
モデルデータ(RICS-pre)

上図とほぼ同じ視点から、シミュレーション結果を可視化(V-Isio)しました。

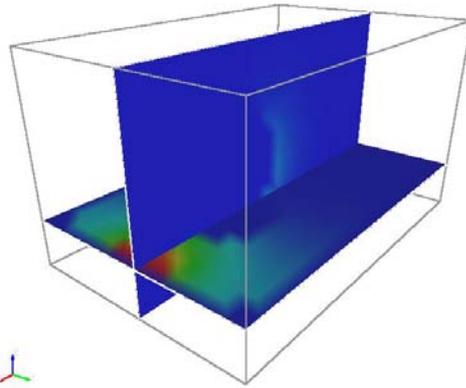


断面濃度(Step500)

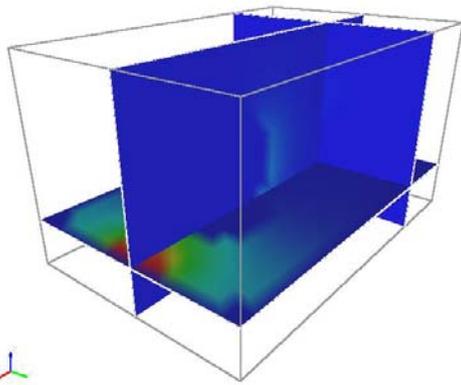
物質の変化(移動)の流れに沿って、物質の濃度をあらかず断面を順次追加しながら Step 毎の断面濃度を表示した結果を以下に示します。



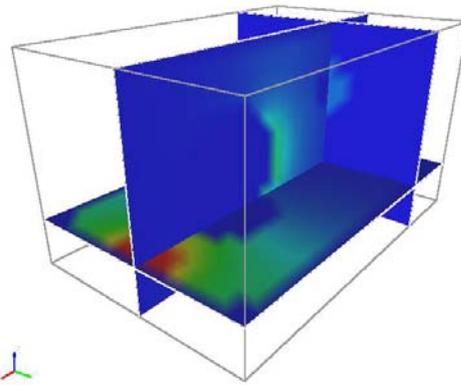
断面濃度 (M3_cell:X) Step.100



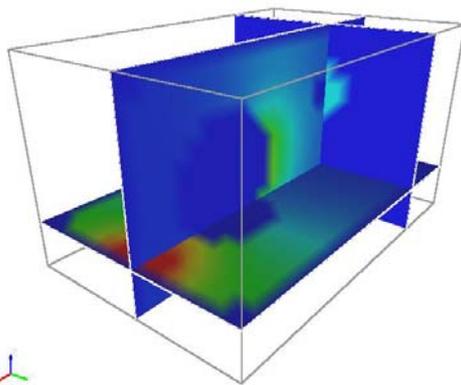
断面濃度 (M3_cell:ATP 追加) Step 100



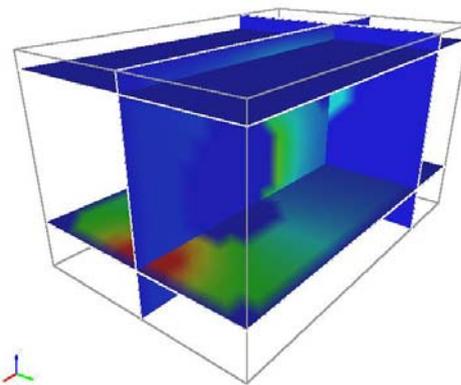
断面濃度 (M2_cube:Y) 追加 Step.100



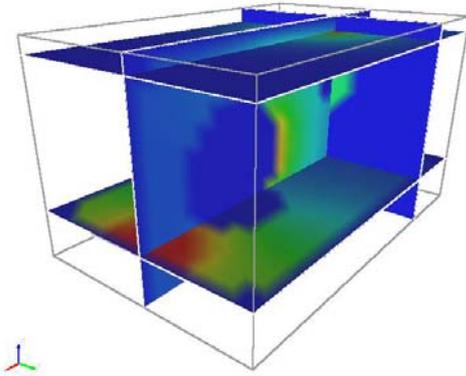
断面濃度 Step 200



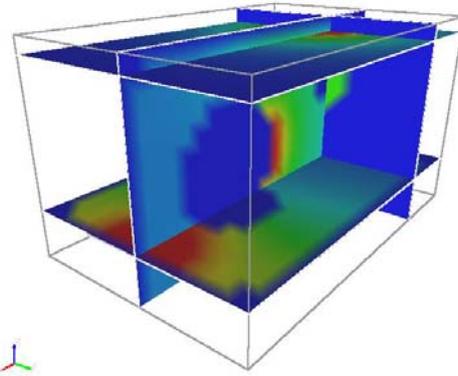
断面濃度 Step.300



断面濃度 (M4_out:Y) 追加 Step 300



断面濃度 Step.400



Step 500

4. 肝細胞モデル

肝細胞モデルでは、RICS の基本機能である拡散・膜輸送の2機能の他、移流拡散機能を使用しています。

RICS-pre は移流拡散に関する設定機能を有していないため、解析条件設定ファイルに追加して記述します。

4.1. 作業フロー

ここでは、ベースとなる楕円球を RICS-pre の VolumeMaker を使って作成後、V-Xpp で修正して核を作成します。その後、V-Xpp の VOI Selection の機能を使って、細胞質部分を反転作成、血管部分を作成します。



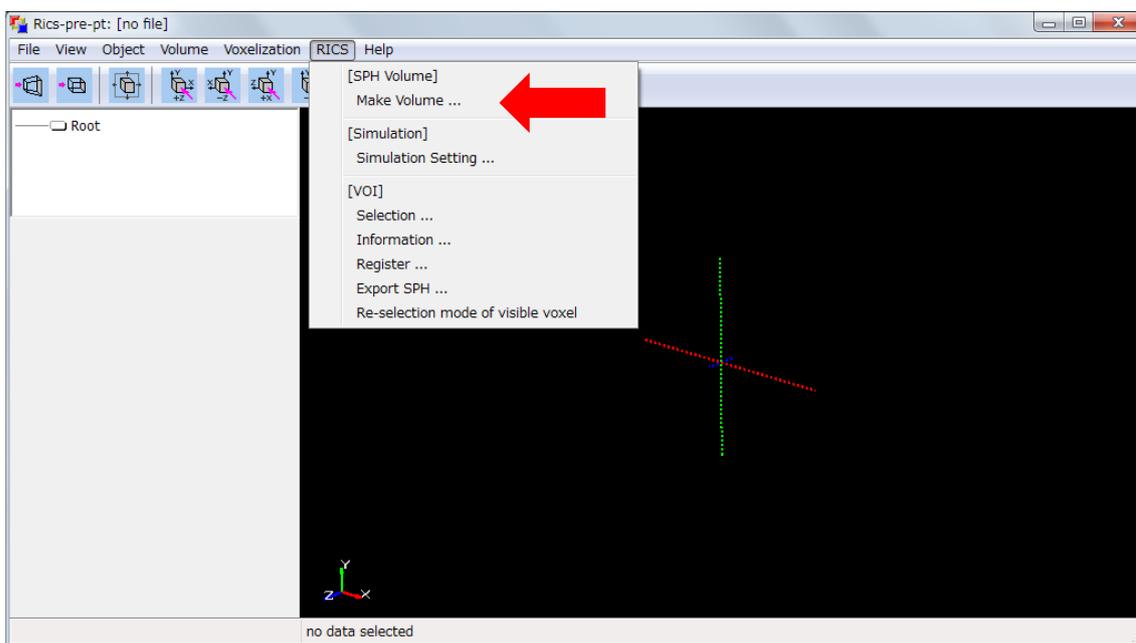
4.2. 形状データ作成

4.2.1. 楕円球の作成 (VolumeMaker)

まずは基本形状の作成から行います。

RICS プリシステムを起動し、VolumeMaker を起動します。

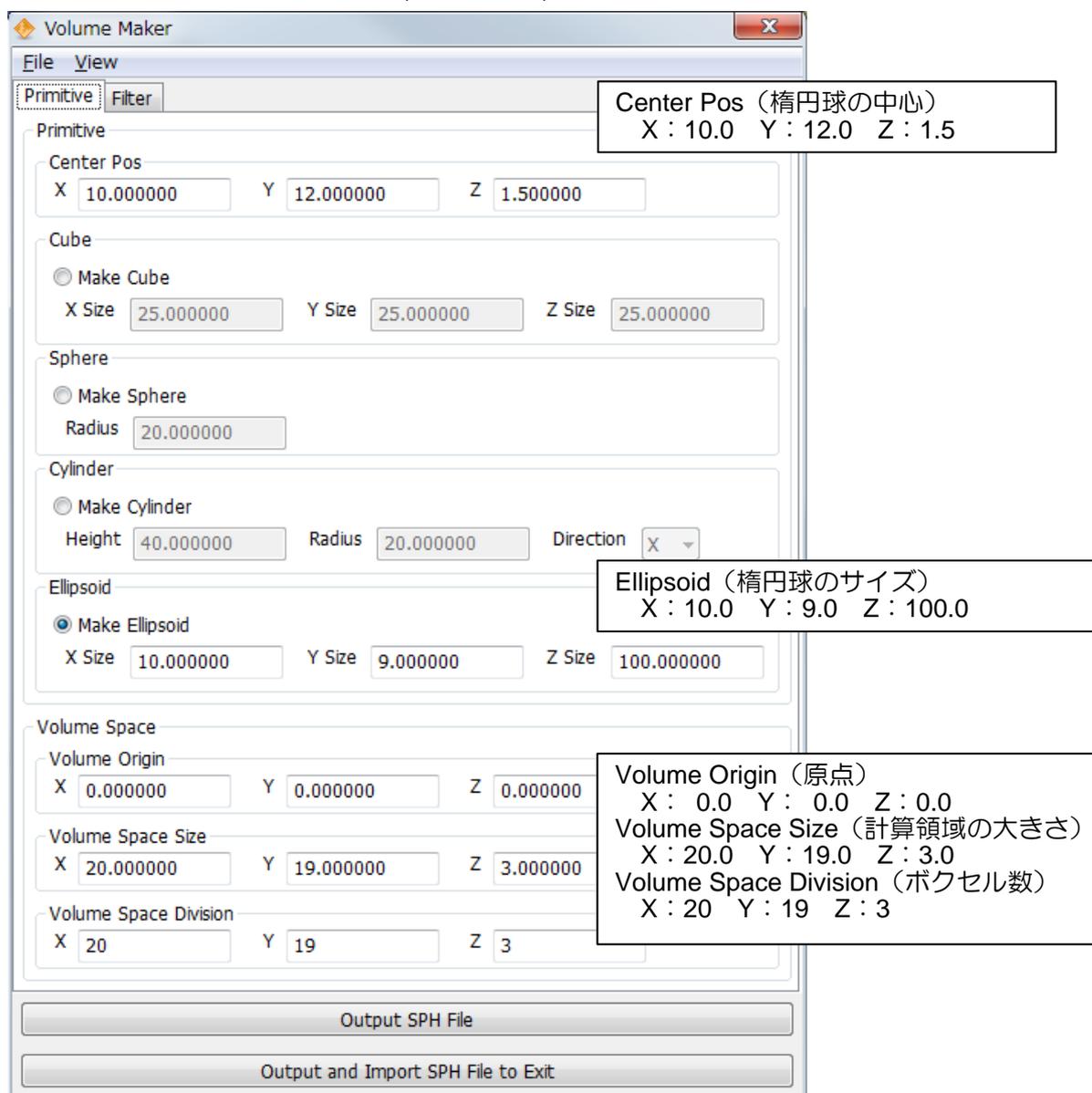
メインメニュー：RICS - [SPH Volume] Make Volume...



VolumeMaker の起動

VolumeMaker で楕円球を作成します。

以下のように設定し、最後に「Output and Import SPH to Exit」を押下してください。

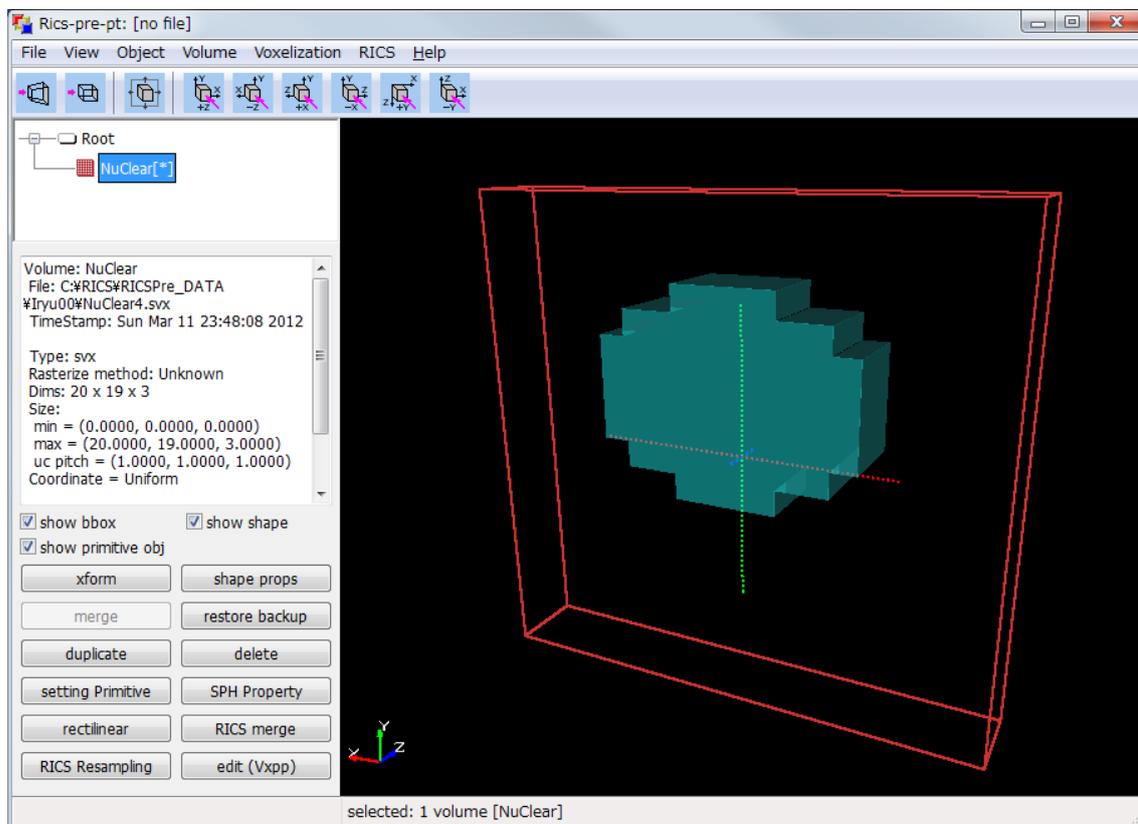


VolumeMaker 設定画面

「Save SPH file」ダイアログが出現します。任意の場所に VolumeMaker で作成した楕円球のデータを保存してください。

ここでは SPH ファイルが出力され、同名の SVX に変換された後、RICS プリシステムに自動的に読み込まれます。

楕円球のSVX読み込み後は以下のような画面に移行します。

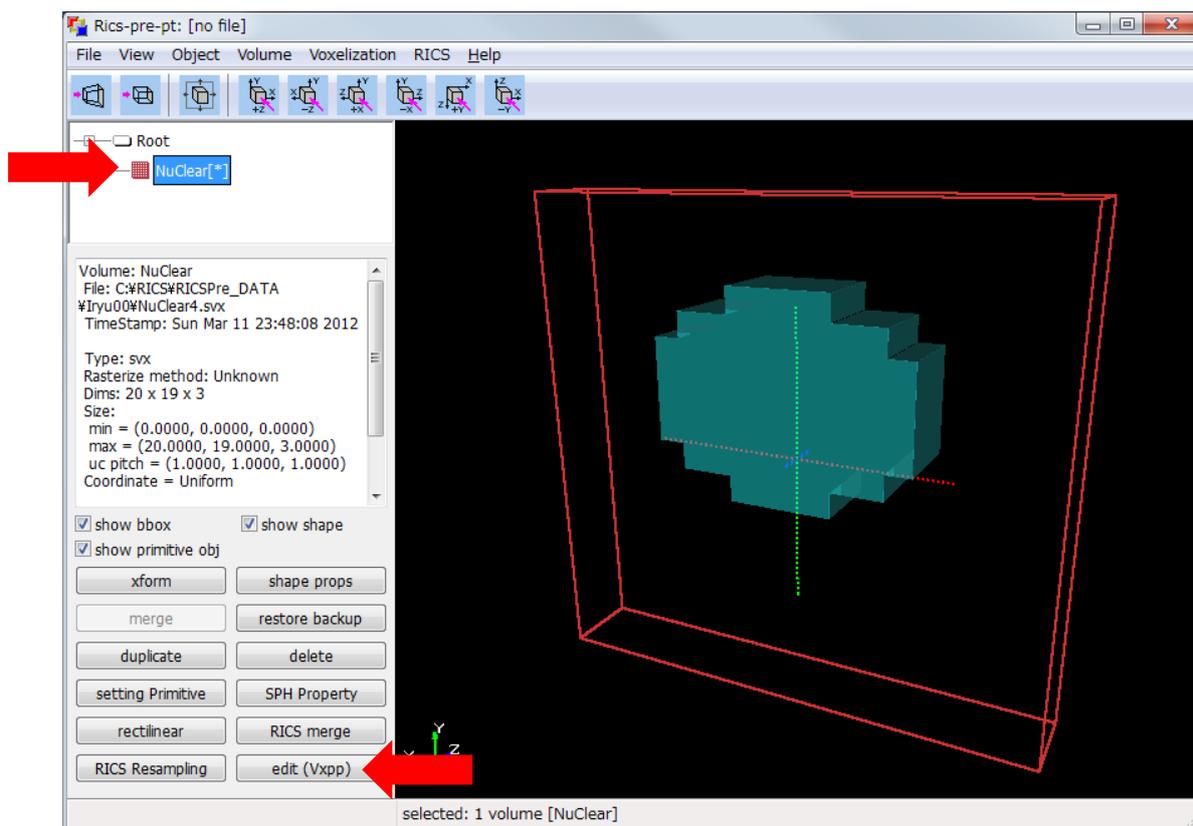


楕円球読み込み後の画面

4.2.2. 体積率の修正 (V-Xpp の起動)

RICS ソルバにおいて、複雑な連成計算を行った場合、エラーとなる可能性があります。その原因のひとつとして、作成した媒質データに微小な体積率が存在することが挙げられます。これを防ぐために、ここでは他責率を修正し、二値化 (1.0 or 0.0) する方法を紹介します。

RICS プリシステムのメイン画面のオブジェクトリツリーで、VolumeMaker で作成したデータを選択した状態にしてください。(下図、赤色矢印の状態)

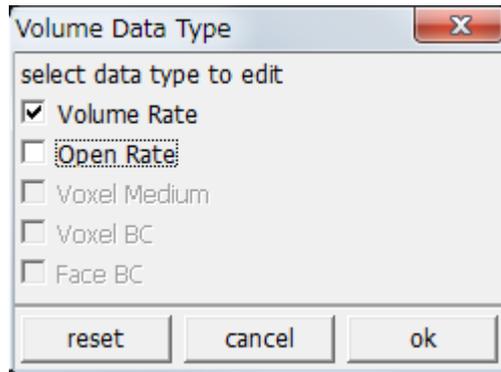


ボリュームデータの選択と V-Xpp の起動

この状態で、edit (V-Xpp) を押下します。

すると、V-Xpp が起動します。このとき、以下の画面が現れますので、VolumeRateのみチェックボックスがONの状態にしてOKを押下します。

ここでは体積率 (VolumeRate) のみ読み込んで編集します。開口率 (OpenRate) は別途再設定を行いますので、ここでは読み込みません。

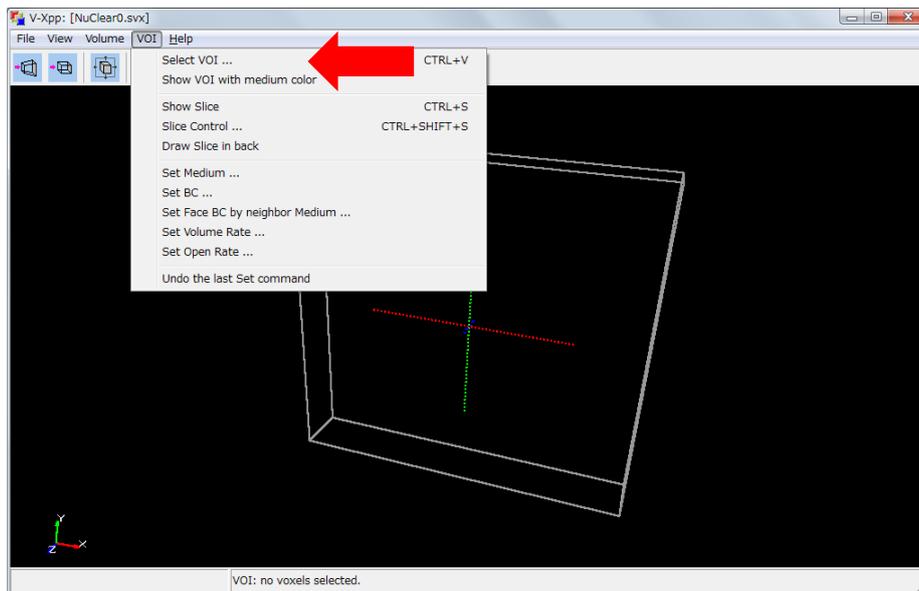


SVX データレコードの選択

4.2.3. 体積率の修正（核部分を作成）

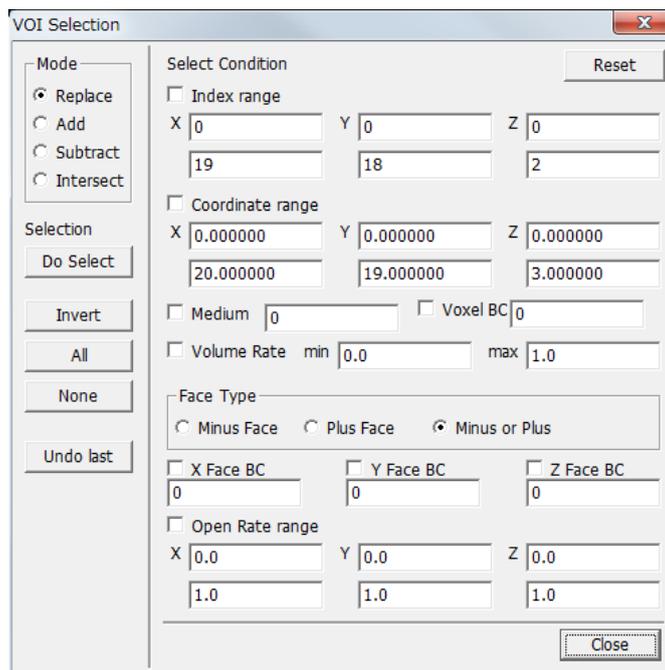
ここでは、核の内側の体積率を 1.0、外側の体積率を 0.0 に設定します。

まず、メインメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。（下図の矢印部分）



VOI 抽出機能の起動

すると、下図のような VOI Selection ダイアログが出現します。

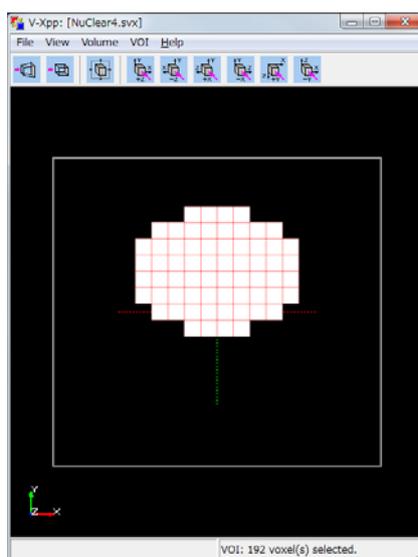


VOI Selection ダイアログ

ここで、以下のように設定し「Do Select」ボタンを押下してください。

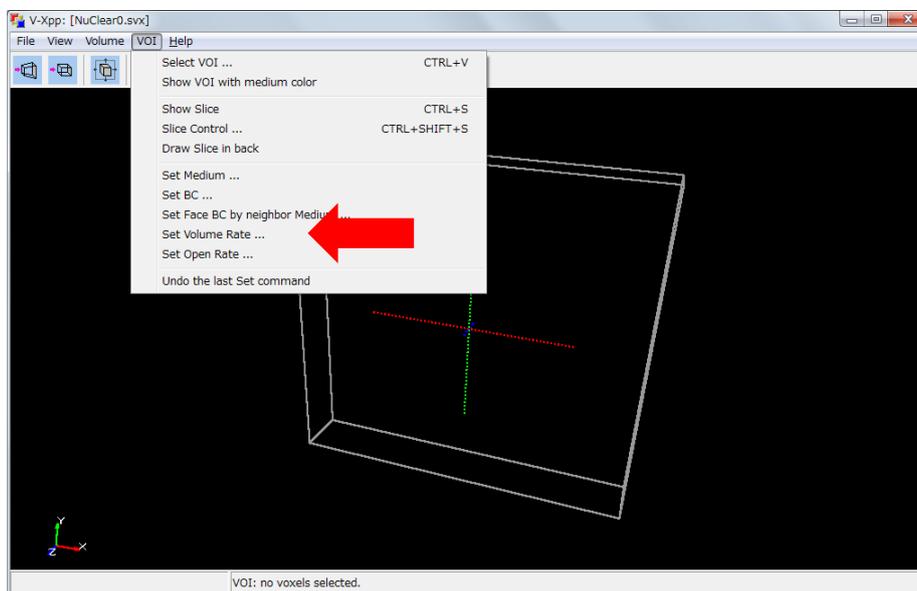
- Mode : Replace
- Volume Rate min : 0.5 max : 1.0

すると下図のように、体積率 0.5 から 1.0 のボクセルを選択した状態になります。



核部分選択状態

選択したボクセルに体積率 1.0 を設定します。メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下してください。（下図の矢印部分）



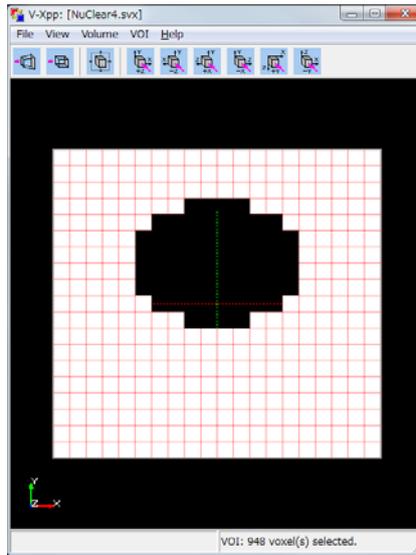
体積率設定ダイアログの起動

体積率設定ダイアログが起動しますので、1.0 を入力して OK を押下してください。選択したボクセルに体積率 1.0 が設定されます。

今度は選択状態を反転して、外側に体積率 0.0 を設定します。

そのままの状態でもainメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。VOI Selection ダイアログで「Invert」ボタンを押下します。すると、下図のように現在選択されているボクセルが選択されていない状態になり、現在選択されていないボクセルが選択されている状態になります。その状態で再び、メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下し、体積率設定ダイアログにて 0.0 を入力し、OK を押下してください。

外側に体積率 0.0 が設定されます。



核以外の部分を選択状態

設定が済みましたら、メインメニュー：File の Save を押下して設定した内容を保存します。

このまま、細胞質部分、血管部分の形状作成に入りますので V-Xpp は起動したままにしてください。

4.2.4. 細胞質部分を作成

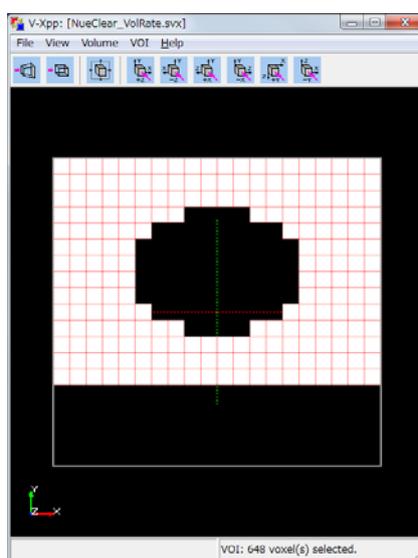
前項の状態から血管部分を取り除きます。メインメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。

VOI Selection ダイアログにおいて、Index 指定で血管部分を選択状態から外します。以下のように設定し「Do Select」ボタンを押下してください。

●Mode : Subtract

■Index Range X : 0 Y : 0 Z : 0
 X : 19 Y : 4 Z : 2

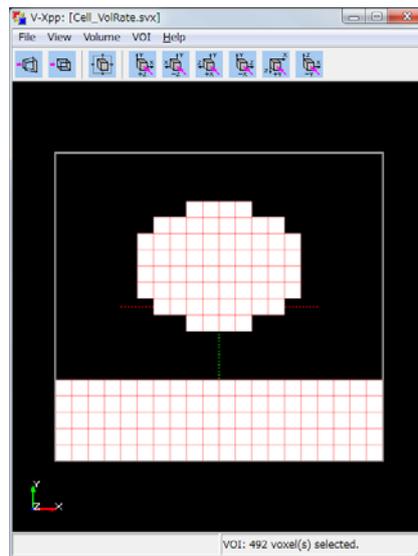
すると、下図のように、細胞質部分を選択した状態になります。



細胞質部分を選択状態

選択したボクセルに体積率 1.0 を設定します。核部分で体積率を設定したときと同様に、メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下し、1.0 を設定します。

更にそのままの状態メインメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。VOI Selection ダイアログで「Invert」ボタンを押下し、選択状態を反転した後、メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下し、0.0 を設定します。



細胞質以外の部分を選択状態

設定が済みましたら、メインメニュー：File の Save を押下して設定した内容を保存します。

4.2.5. 血管部分を作成

血管部分を選択します。メインメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。

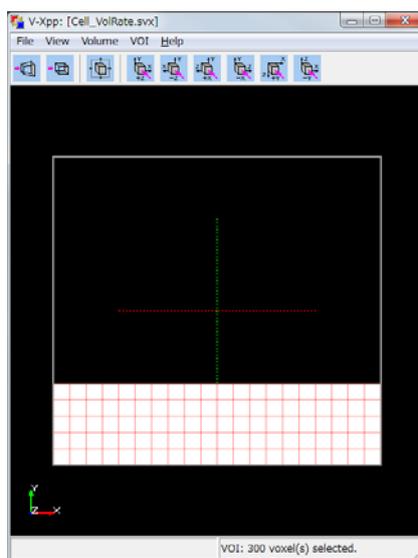
VOI Selection ダイアログにおいて、以下のように設定し「Do Select」ボタンを押下してください。

●Mode : Replace

■Index Range X : 0 Y : 0 Z : 0

 X : 19 Y : 4 Z : 2

すると、下図のように、血管部分を選択した状態になります。



血管部分を選択状態

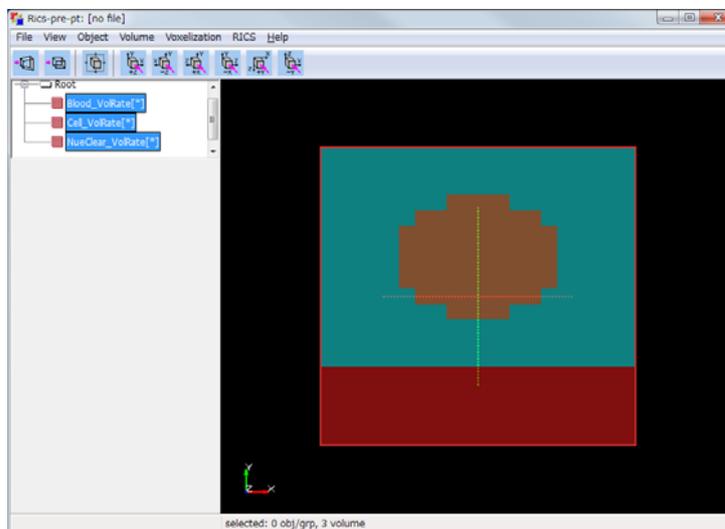
選択したボクセルに体積率 1.0 を設定します。核部分で体積率を設定したときと同様に、メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下し、1.0 を設定します。

更にそのままの状態メインメニュー：VOI の Select VOI を押下してください。VOI Selection ダイアログで「Invert」ボタンを押下し、選択状態を反転した後、メインメニュー：VOI の Set Volume Rate を押下し、0.0 を設定します。

設定が済みましたら、メインメニュー：File の Save を押下して設定した内容を保存します。

4.2.6. SVX 作成直後

SVX 作成直後の RICS プリは以下の図のような状態です。

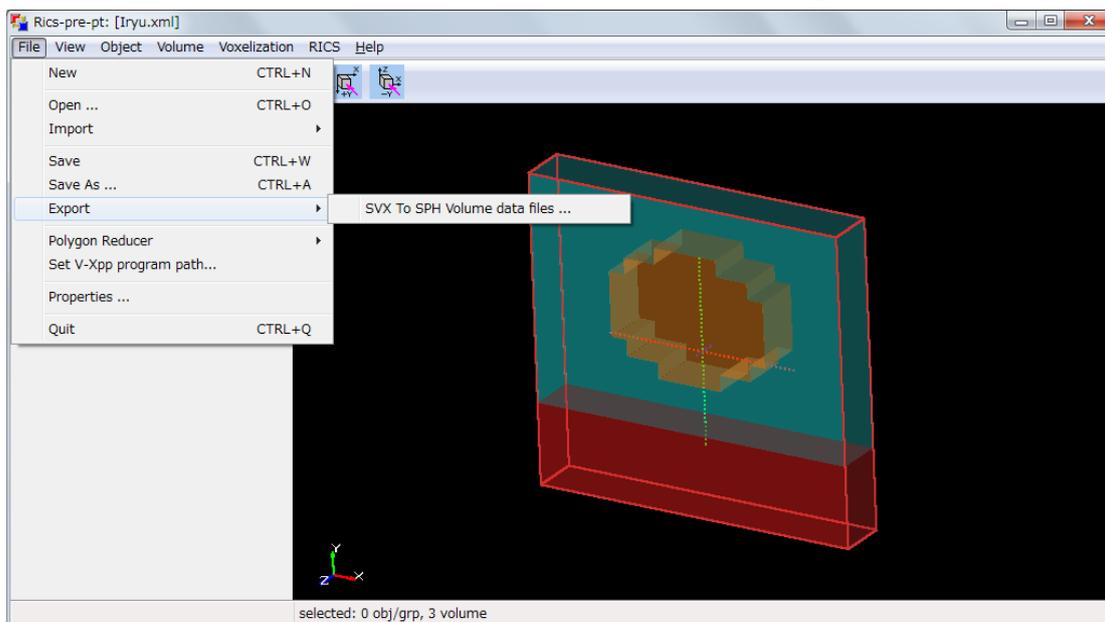


作成した SVX を読み込んだ状態

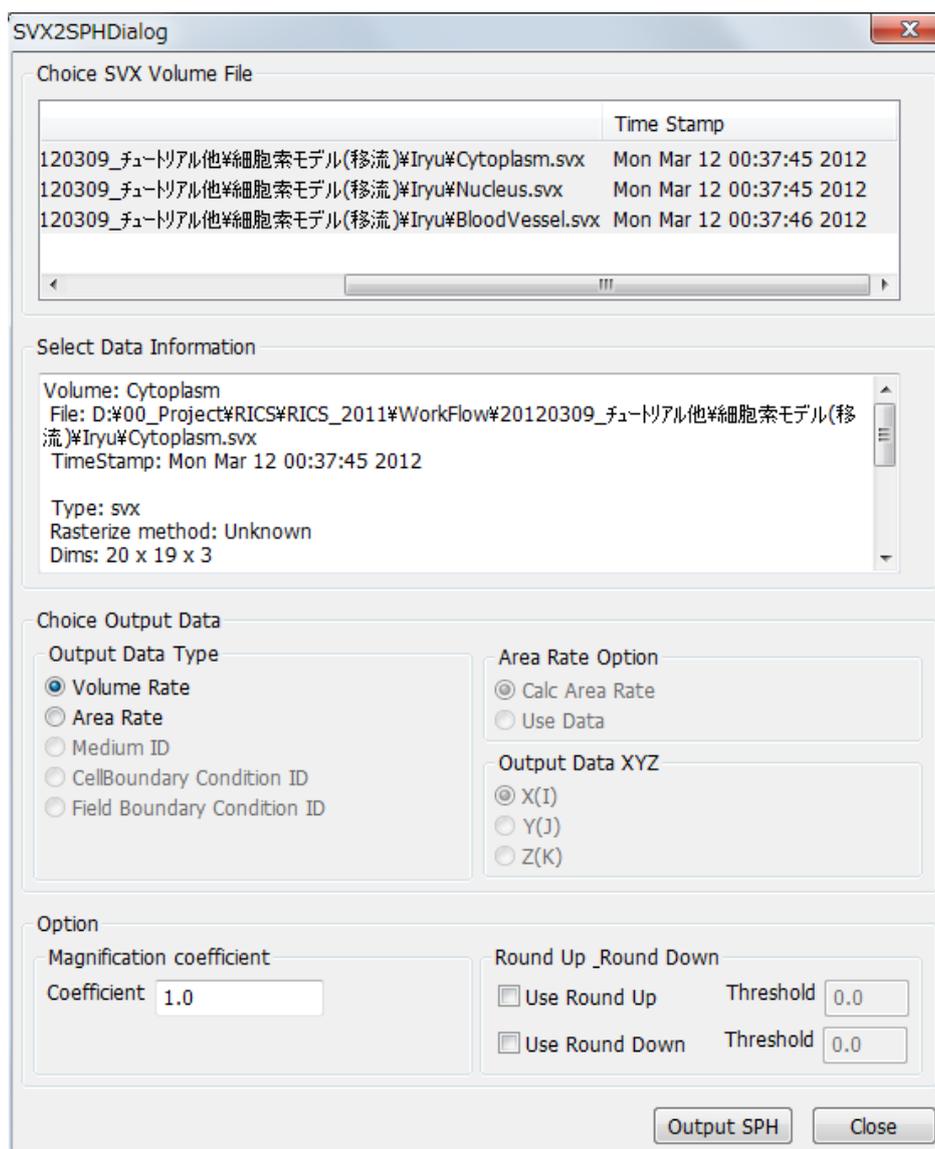
4.2.7. 開口率の設定（SPH ファイルの出力）

現状の SVX は体積率しかなく、開口率が設定されていません。体積率から開口率を算出し、RICS ソルバの入力データを作成します。

まず、SVX を SPH として出力します。下図のように、メインメニュー：File の Export の SVX to SPH Volume data files を押下し、SVX2SPHDialog を表示してください。



SVX to SPH Volume data files の選択



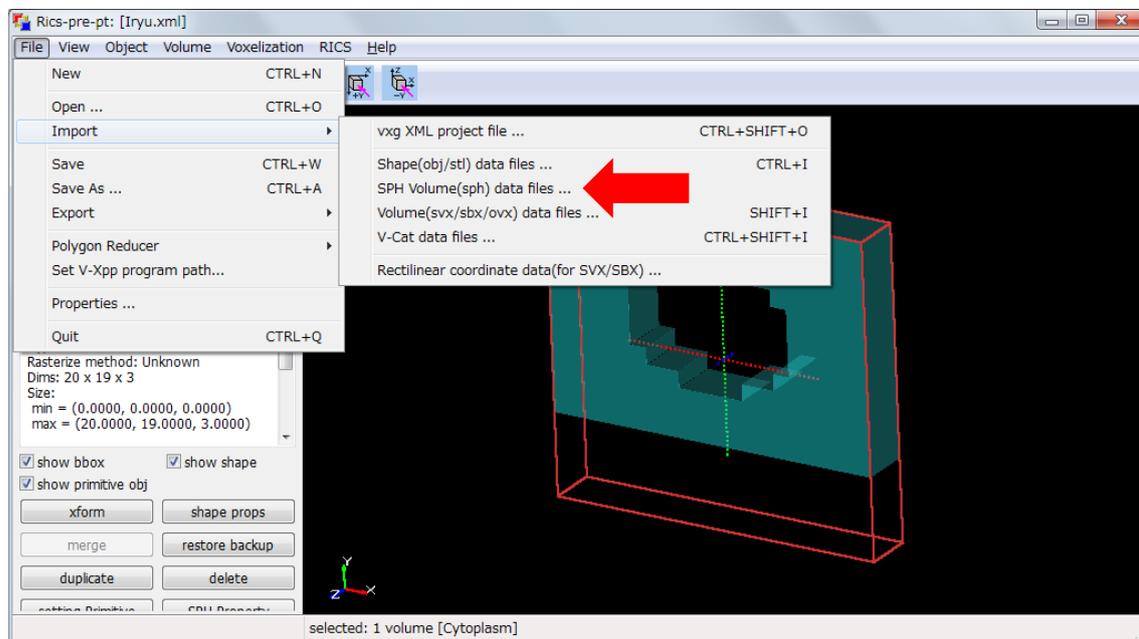
SVX2SPHDialog

変換するSVXを選択し、Output Data Typeの●Volume Rateを選択し、「Output SPH」ボタンを押下してください。SPHファイルが出力されます。

4.2.8. 開口率の設定 (SVX データの作成)

出力した SPH ファイルを取り込みます。

メインメニュー: File の Import の SPH Volume(sph) data files を押下してください。



SPH データの取り込み

すると、select Sph Volume data file(s) to import ダイアログが表示されますので、先程出力した SPH ファイルを選択して、「開く(O)」ボタンを押下し、取り込んでください。

SPH データを取り込む際に、自動的に開口率を計算します。それと同時に同名の SVX ファイルが作成されます。

これで基本となる形状（核、細胞質、血管）は完成となります。

4.2.9. 細胞のコピー

基本形状（核、細胞質、血管）に加えて、他ソルバ等で計算した速度の SPH（ベクトルデータ）を 1 つの細胞とし、細胞コピー機能を用いて細胞を横一列に並べます。

RICS の外部ツールである CellCopy の第一引数に parameter ファイルを渡して実行します。parameter ファイルには以下のように記述します。

```
<method>
Map

<output_dir>
../out/

<input_dir>
../in/

<input_files>
Cytoplasm.svx
Nucleus.svx

<same_mat_files>
BloodVessel.svx
vel.sph

<map_area>
5,1,1

<map>
:,1,1
```

細胞コピー機能の parameter ファイル

ここで、output_dir には任意の出力ディレクトリを指定します。input_dir には基本形状（核、細胞質、血管）と速度の SPH の存在するディレクトリを指定します。input_files、same_mat_files には入力データを記述しますが、ここでは以下のように名前を付けています。

核：	Nucleus.svx
細胞質：	Cytoplasm.svx
血管：	BloodVessel.svx
速度：	vel.sph

血管と速度はコピー後も同一ファイルとしたいため、same_mat_files に指定しています。

作成したパラメータファイルを第一引数として以下のように CellCopy を実行します。

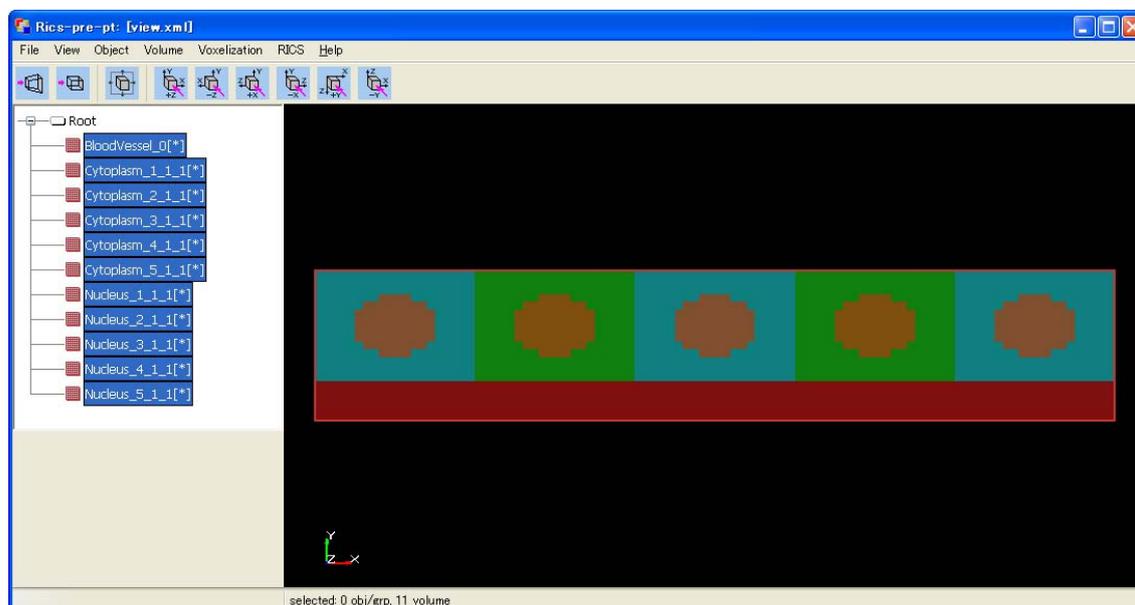
```
prompt>CellCopy parameter
```

すると、細胞コピー機能が実行され、出力ディレクトリに以下のようにファイルが生成されます。

名前	サイズ	種類
BloodVessel_0.svx	98 KB	SVX ファイル
Cytoplasm_1_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Cytoplasm_2_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Cytoplasm_3_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Cytoplasm_4_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Cytoplasm_5_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Nucleus_1_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Nucleus_2_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Nucleus_3_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Nucleus_4_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
Nucleus_5_1_1.svx	98 KB	SVX ファイル
parameter	1 KB	ファイル
vel_0.sph	134 KB	SPH ファイル

細胞コピー後のファイル一覧

出力ファイルを RICS プリシステムに読み込んで可視化した状態を以下に示します。



細胞コピー後の媒質

4.3. 解析条件設定

解析条件設定のため SimulationSetting を起動します。以下のいずれかの方法で SimulationSetting を起動してください。

- Windows のメニュー、Simulation Setting で起動
- RICS-pre メインメニュー：RICS - Simulation Setting

4.3.1. モデル規模、シミュレーション条件の設定 (Domain Info タブ)

以下の通り設定します。

VoxelOrigin(原点の設定) X : 0.0 Y : 0.0 Z : 0.0

VoxelSize(Voxel 数) X : 100 Y : 19 Z : 3

VoxelWidth(計算領域全体の長さ)/Pitch(1Voxel の長さ)

●Use VoxelWidth

X : 1.000000e+002 Y : 1.900000e+001 Z : 3.000000e+000

Length Unit (長さの単位の設定)

Use Length Unit Unit : 1.000000e-006

Time Unit (時間の単位の設定)

Use Time Unit Unit : 1.0

StartCondition(初期計算からかリスタートかの選択)

Condition : Initial

dt(時間ステップ)

●Use dt dt : 1.000000e-004

Time Integration(時間発展手法の選択)

●Euler

CalculationSteps(計算する Step 数)

Step : 10000

4.3.2. 媒質・物質指定 (Cell & Molecular タブ)

各媒質の物質について下記の通りパラメータを指定します。

(1) 媒質設定 (Cell)

Add ボタンで媒質を追加します。

M1~M11

(2) 物質設定 (Molecular)

物質名を設定します。

Add ボタンで物質名を設定します。

- 物質設定ダイアログの起動

Add ボタンでダイアログを起動して物質を設定します。

- 物質名の設定

MolecularEntry タブで以下を設定します。

Name(物質名) : B

- Use Diffusion Coefficient (拡散係数の設定)

Diffusion Coefficient : 1.000000e+002

Initial タブで以下を設定します。

媒質 M3 の MolConc (初期濃度) に 1.0 を設定

4.3.3. 入出力ファイル指定 (In & Out タブ)

(1) 入力データ (InputData)

媒質形状データを設定します。

詳細は 3.4.4 をご参照ください。

- 媒質データの設定

Medium Add ボタンで Add InputMediumData ダイアログを起動します。

作成済みの各媒質データを設定します。

媒質名を Attribute のリストから、対応するファイルを Fname のリストから選択して、OK ボタンを押します。

Attribute	Fname
M1	BloodVessel_0.svx
M2	Nucleus_1_1_1.svx
M3	Cytoplasm_1_1_1.svx
M4	Nucleus_2_1_1.svx
M5	Cytoplasm_2_1_1.svx
M6	Nucleus_3_1_1.svx
M7	Cytoplasm_3_1_1.svx
M8	Nucleus_4_1_1.svx
M9	Cytoplasm_4_1_1.svx
M10	Nucleus_5_1_1.svx
M11	Cytoplasm_5_1_1.svx

(2) 出力データ (OutputData)

計算結果の出力に関する設定をします。

詳細は 3.4.4 をご参照ください。

• 出力基本情報の設定

■Use OutputData チェックします。

OutDir(バイナリデータ出力ディレクトリの指定) : ./out

monitor interval(標準出力への出力 Step 間隔の指定) : 50

OutputFile

Attribute	Interval	BaseName
M1	1000000	M1_
M2	1000000	M2_
M3	1000000	M3_
M4	1000000	M4_
M5	1000000	M5_
M6	1000000	M6_
M7	1000000	M7_
M8	1000000	M8_
M9	1000000	M9_
M10	1000000	M10_
M11	1000000	M11_
M1:B	50	M1B_
M3:B	50	M3B_
M5:B	50	M5B_
M7:B	50	M7B_
M9:B	50	M9B_
M11:B	50	M11B_

4.3.4. 並列化条件の設定 (Parallel Computing タブ)

詳細は 3.4.5 をご参照ください。

ここでは、以下のように設定します。

Equation : **

●Choice All

N : 8

4.3.5. ファイル出力パラメータの設定 (Output Parameter タブ)

詳細は 3.4.6 をご参照ください。

(1) 出力チェック (Output Material)

バイナリファイルとして可視化したいファイルにチェックを入れます。

ここでは Output Material のすべてにチェックをします。

(2) 数値観測点設定 (Probe)

今回は設定しません。

4.3.6. 各機能の実行制御パラメータの設定 (SimSetting タブ)

反応、拡散、膜輸送、ワープの各ソルバを実行する/しないの設定を行います。

ここでは以下の通り、拡散のみチェックします。

reaction(metabolism) 反応(代謝)機能の設定

execution(代謝の実行)

Diffusion 拡散機能の設定

■diffusion(拡散の実行)

●Diffusion Type 26way(斜め位置考慮)

○Diffusion Type Basic(直行 6 方向)

Warp ワープ機能の設定

Output Warp Tag (Warp の実行)

4.3.7. 膜輸送機能の設定 (Membrane タブ)

膜輸送機能のパラメータの設定を行います。

詳細は O をご参照ください。

ここでは、以下のように設定します。

Medium1	Medium2	Substance	Carrying function
M1	M3	B	GapJunction
M1	M11	B	GapJunction
M5	M7	B	GapJunction
M7	M9	B	GapJunction
M9	M11	B	GapJunction

GapJunction の各パラメータは、いずれの膜輸送機能も同様の値で、以下のとおり設定します。

Name	Value
K	50.0
Ke	0.0
SW	1.0
Den	100.0
Fuzzy	1.0

4.3.8. 解析条件ファイルの保存

ここまで設定した解析条件のファイルを保存します。

メインメニュー：File - Save Simulation Setting File

保存するファイル名を指定して保存します。

出力ファイル名：run.xml

4.3.9. 移流の設定

パラメータ用の XML テキストエディター等を使って記述します。

テキストエディターで解析条件ファイルを開きます。

① 流れ場媒質の設定

今回、流れ場となる媒質は M1 ですので、以下のように記述してください。

```
Center Pos (楕円球の中心)
X : 10.0 Y : 12.0 Z : 1.5
```

“velocity” を媒質の Elem の中に定義することで、その媒質を流れ場媒質として扱います。

② 速度の入力ファイルの設定

あらかじめ用意してある速度ベクトルの SPH ファイルを、読み込む設定を記述します。InputData タグ内に以下のように記述してください。

```
<method>
Map

<output_dir>
../out/

<input_dir>
../in/

<input_files>
Cytoplasm.svx
Nucleus.svx

<same_mat_files>
BloodVessel.svx
vel.sph

<map_area>
5,1,1

<map>
;,1,1
```

InFile タグの attr に” 媒質名 : Vel” と記述することで、その媒質の速度ファイルとして読み込みます。

4.3.10. 境界条件の設定

パラメータ用の XML テキストエディター等を使って記述します。

テキストエディターで解析条件ファイルを開きます。

OuterBoundary タグ内に以下のように記述してください。

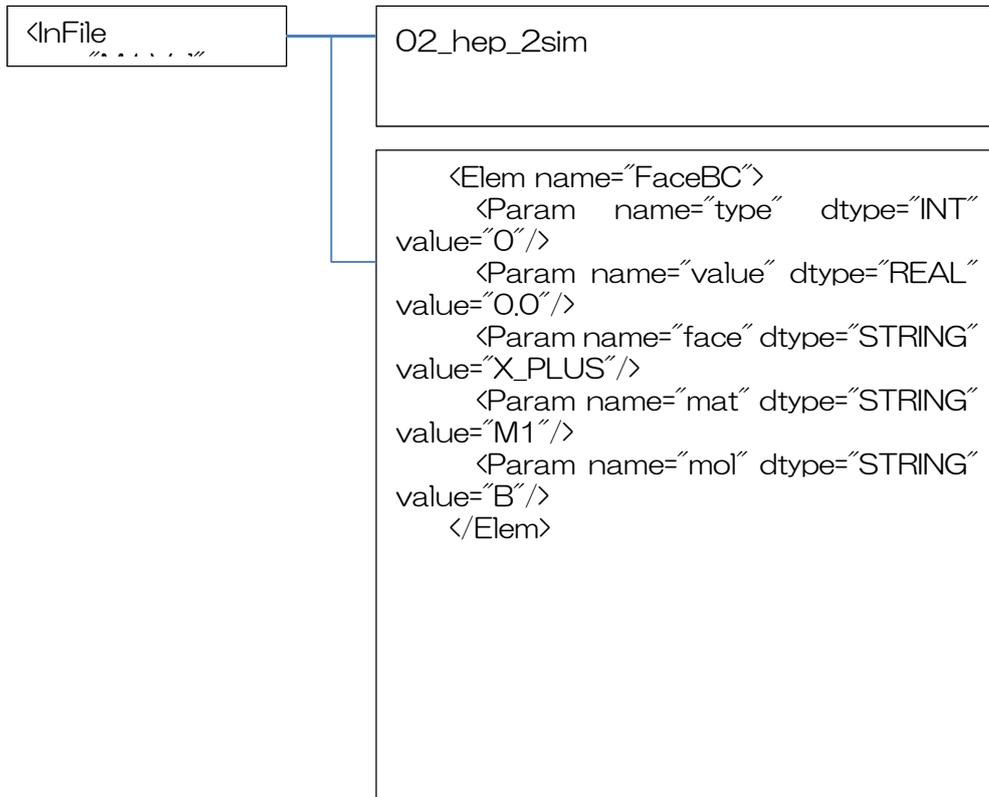
```
<Elem name="M1" id="101">  
  <Elem name="velocity">  
  
  </Elem>  
</Elem>
```

媒質 M1 の物質 B について、X のプラス側の境界条件に Dirichlet の境界条件で 0.0 を設定しています。これは、流出側の境界条件になります。

4.4. 解析の実行

作成した XML を指定してジョブを実行します。

ディレクトリ構成と各ディレクトリのファイルは以下のようになります。



実行はコマンドプロンプトより実行します。

解析条件ファイルのあるディレクトリに移動し、以下のコマンドを実行します。

```
Prompt> rcellsim run.xml
```

また、並列処理で解析を行う場合は、以下のコマンドを実行します。

```
Prompt> mpirun -np 8 rcellsim run.xml
```

解析条件に誤りが無ければ、指定したディレクトリ（./out）に、解析結果が出力されます。

以下は、Visio による可視化の一例です。



step = 10000

5. 神経細胞モデル

神経細胞モデルでは、RICS の基本機能である代謝・拡散・膜輸送の機能は使用していません。膜電位の機能を使用しています。

5.1. 作業フロー



5.2. 形状データ作成

5.2.1. 媒質データ、膜面積データの作成 (CalcMembareaVcat)

V-Cat データから媒質データ (SVX) と膜面積データ (SVV) を作成します。

RICS の外部ツールである CalcMembareaVcat の第一引数に入力ファイル(input.dat) を渡して実行します。入力ファイル (input.dat) には以下のように記述します。

End

膜面積計算プログラムの入力ファイル

ここで、1 行目には変換元となる V-Cat データ、5 行目には出力ディレクトリとベース名を指定します。前述の input.dat の意味は以下の通りです。

V-Cat データ	:	model_384x128x5.vcat
出力ディレクトリ	:	out
ベース名	:	ShinkeiZ5

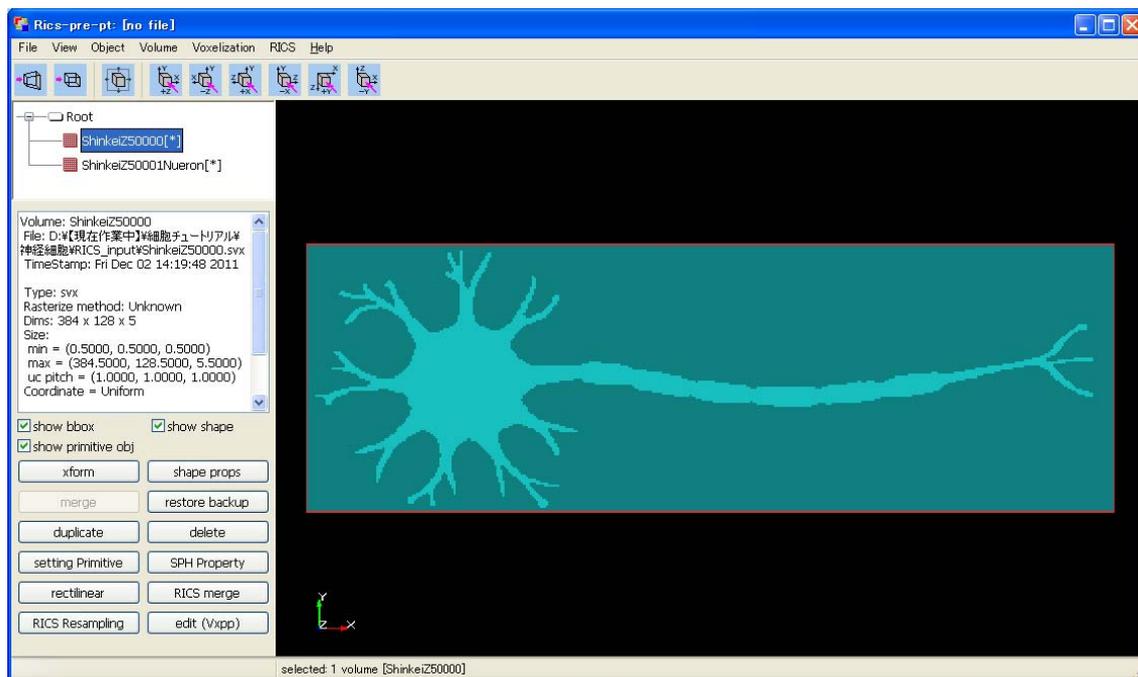
作成したファイル (input.dat) を第一引数として以下のように CalcMembareaVcat を実行します。

```
prompt> CalcMembareaVcat input.dat
```

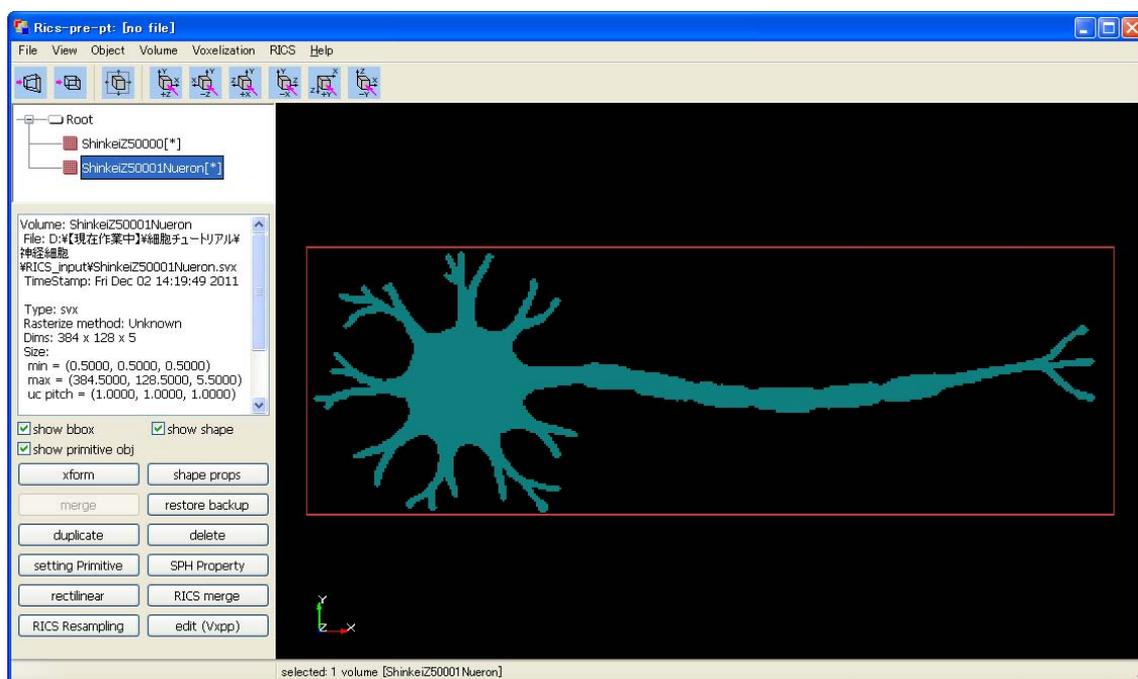
すると、膜面積計算プログラムが実行され、出力ディレクトリに以下のようにファイルが生成されます。

```
ShinkeiZ50000.svx  
ShinkeiZ50001Nueron.svx  
ShinkeiZ50000-0001.svx
```

出力ファイルを RICS プリシステムに読み込んで可視化した状態を以下に示します。



CalcMembareaVcat で変換した媒質データ (ShinkeiZ50000.svx)



CalcMembareaVcat で変換した媒質データ (ShinkeiZ50001Nueron.svx)

膜面積ファイル (SVV) は RICS プリシステムで読み込むことができません。

5.3. 解析条件設定

作成した SVX データを元に解析条件の設定を行います。

Setting 部の起動には2種類の起動方法があります。

- Windows のメニュー、Simulation Setting で起動
- RICS-pre メインメニュー：RICS - Simulation Setting

5.3.1. モデル規模、シミュレーション条件の設定 (Domain Info タブ)

以下の通り設定します。

VoxelOrigin(原点の設定) X: 0.0 Y: 0.0 Z: 0.0

VoxelSize(Voxel 数) X: 384 Y: 128 Z: 5

VoxelWidth(計算領域全体の長さ)/Pitch(1Voxel の長さ)

- Use VoxelPitch(1Voxel の長さの設定を選択して)

X: 5.000000e-001 Y: 5.000000e-001 Z: 5.000000e-001

Length Unit (長さの単位の設定)

Use Length Unit Unit: 1.000000e-006

Time Unit (時間の単位の設定)

Use Time Unit Unit: 1.0

StartCondition(初期計算からかリスタートかの選択)

Condition: Initial

dt(時間ステップ)

- Use dt dt: 5.000000e-003

Time Integration(時間発展手法の選択)

- Euler

CalculationSteps(計算する Step 数)

Step: 100000

5.3.2. 媒質・物質指定 (Cell & Molecular タブ)

各媒質の物質について下記の通りパラメータを指定します。

(1) 媒質設定 (Cell)

Add ボタンで媒質を追加します。

ShinkeiZ50000、ShinkeiZ50001Nueron

(2) 物質設定 (Molecular)

物質名を設定します。

Add ボタンで物質名を設定します。

- 物質設定ダイアログの起動

Add ボタンでダイアログを起動して物質を設定します。

- 物質名の設定

MolecularEntry タブで以下を設定します。

Name(物質名) : VO

5.3.3. 入出力ファイル指定 (In & Out タブ)

(1) 入力データ (InputData)

媒質形状データを設定します。

詳細は 3.4.4 をご参照ください。

- 媒質データの設定

Medium Add ボタンで Add InputMediumData ダイアログを起動します。

作成済みの各媒質データを設定します。

媒質名を Attribute のリストから、対応するファイルを Fname のリストから選択して、OK ボタンを押します。

Attribute	Fname
M1	ShinkeiZ50001Nueron.svx
M2	ShinkeiZ50000.svx

(2) 出力データ (OutputData)

計算結果の出力に関する設定をします。

詳細は 3.4.4 をご参照ください。

- 出力基本情報の設定

■Use OutputData チェックします。

OutDir(バイナリデータ出力ディレクトリの指定) : ./out

monitor interval(標準出力への出力 Step 間隔の指定) : 1000

OutputFile

Attribute : M1:VO

BaseName : M1VO_

Interval : 250

5.3.4. 並列化条件の設定 (Parallel Computing タブ)

詳細は 3.4.5 をご参照ください。

ここでは、以下のように設定します。

Equation : **

●Choice All

N : 64

5.3.5. ファイル出力パラメータの設定 (Output Parameter タブ)

詳細は 3.4.6 をご参照ください。

(1) 出力チェック (Output Material)

バイナリファイルとして可視化したいファイルにチェックを入れます。

ここでは Output Material の以下にチェックをします。

M1:VO

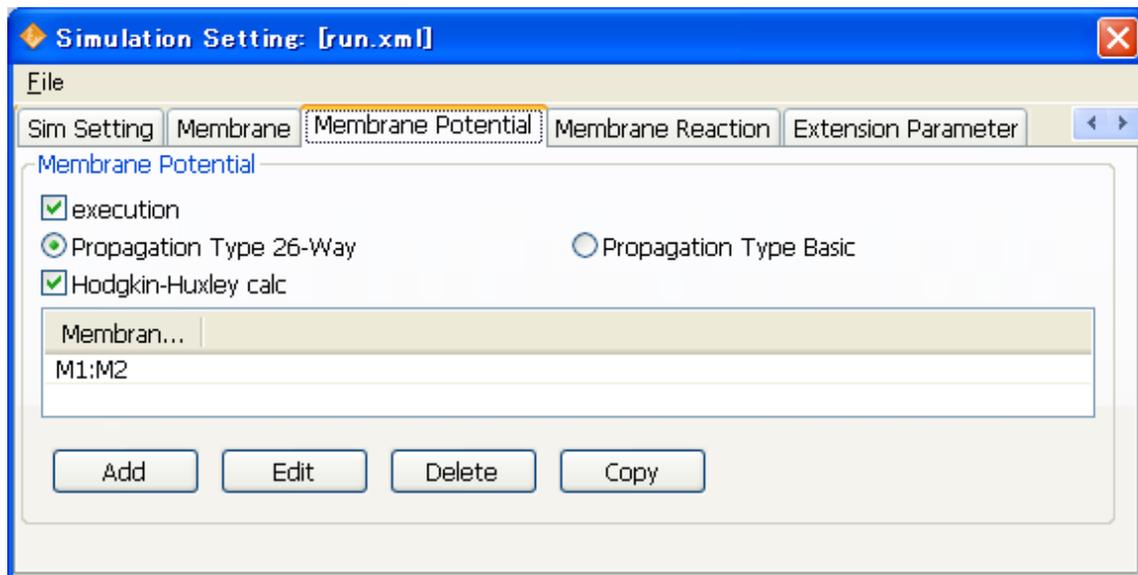
(2) 数値観測点設定 (Probe)

ここでは、以下の通り設定します (Interval(出力間隔)は全て 50 とします)。

ProbePoint(座標値)			Output Probe File	Output Material
X	Y	Z	出力ファイル名	出力物質名
23.75	1.75	1.0	probe0.csv	M1:VO
54.25	56.75	1.0	probe1_input.csv	M1:VO
55.25	35.25	1.0	probe2_ent.csv	M1:VO
113.75	30.25	1.0	probe3_mid.csv	M1:VO
159.75	34.75	1.0	probe4_exit.csv	M1:VO
187.25	37.25	1.0	probe5_end.csv	M1:VO

5.3.6. 膜電位の設定 (Membrane Potential タブ)

膜電位の設定をします。

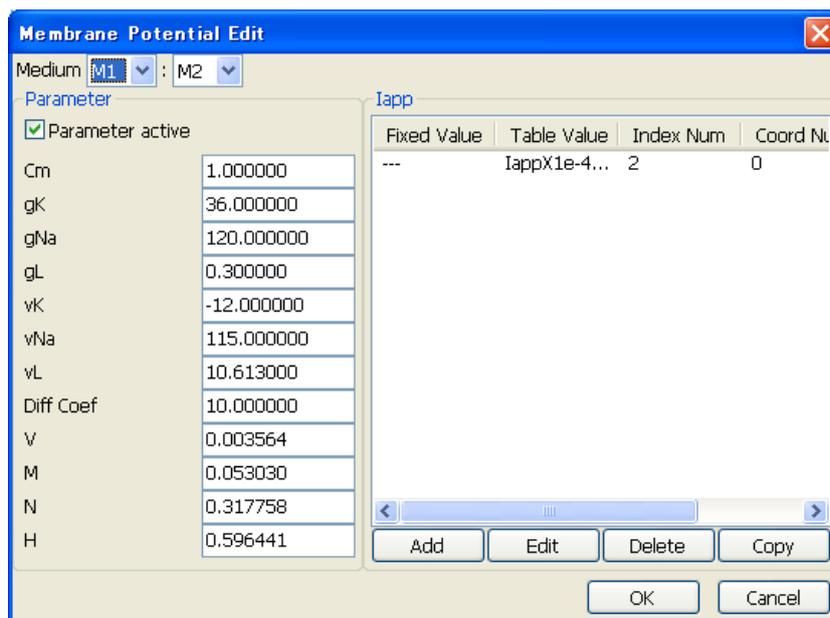


Membrane Potential 膜電位機能の設定

- execution (膜電位の実行)
 - Propagation Type 26way (斜め位置考慮)
 - Propagation Type Basic (直行 6 方向)
- Hodgkin-Huxley calc (Hodgkin-Huxley の計算実行)

Hodgkin-Huxley の設定

Add ボタンを押下します。すると、以下のような Membrane Potential Edit ダイアログが表示されます。



Medium(膜の選択) M1 : M2

Parameter

■Parameter active(Hodgkin-Huxley パラメータの設定)

Cm : 1.0
gK : 36.0
gNa : 120.0
gL : 0.3
vK : -12.0
vNa : 115.0
vL : 10.613
Diff Coef : 10.0
V : 0.003564
M : 0.053030
N : 0.317758
H : 0.596441

上記パラメータは以下の Hodgkin-Huxley の式のパラメータになります。

$$Cm \frac{dv}{dt} = -\bar{g}_k n^4 (v - v_k) - \bar{g}_{Na} m^3 h (v - v_{Na}) - \bar{g}_L (v - v_L) + I_{app}$$

lapp(lapp の設定)

Add ボタンを押下すると、以下のような lapp Edit ダイアログが表示されます。

I	J	K
47	3	1
47	3	2

Fixed Value(固定値)

■ Table Value(CSV ファイルの入力)

以下のような時間と電流の CSV ファイルを作成し、読み込みます。

解析条件の設定(RICS-pre)

■ Index Active (lapp を与えるインデックスの指定)

0 を参考に lapp を与える点を膜上に設定します。

Add ボタンを押下し、今回は以下の場所に設定します。

I	J	K
47	3	1
47	3	2

Coord Active (lapp を与える座標値の指定)

SPH Active (lapp を与える場所を SPH により指定)

5.3.7. 解析条件ファイルの保存

ここまで設定した解析条件のファイルを保存します。

メインメニュー：File - Save Simulation Setting File

保存するファイル名を指定して保存します。

出力ファイル名：run.xml

5.3.8. 膜電位物質の設定

パラメータ用の XML テキストエディター等を使って記述します。

テキストエディターで解析条件ファイルを開きます。

膜電位の設定を行うと物質 (Molecular) の中に以下の記述が含まれて出力されます。

```
./model_384x128x5.vcat  
0.5 0.5 0.5  
384 128 5  
384 128 5  
./out/ShinkeiZ5
```

この中の物質名 "MEMPOTE" を 5.3.2 で設定した物質名 "VO" に変更します。

その後、以下の記述を削除します。

```
0.00E+00,0.000
0.5000E+01,0.000
0.5000E+01,400.000
1.0000E+01,400.000
1.0000E+01,0.000
1.0500E+01,0.000
1.0500E+01,400.000
1.5500E+01,400.000
1.5500E+01,0.000
1.6000E+01,0.000
1.6000E+01,400.000
2.1000E+01,400.000
2.1000E+01,0.000
2.1500E+01,0.000
2.1500E+01,400.000
2.6500E+01,400.000
2.6500E+01,0.000
2.7000E+01,0.000
2.7000E+01,400.000
3.2000E+01,400.000
3.2000E+01,0.000
3.2500E+01,0.000
```

編集後、物質の設定は以下のようになります。

```
<Elem name="MEMPOTE" id="104">
  <Param name="Potential" dtype="STRING" value="true"/>
</Elem>
```

5.3.9. 膜面積ファイルの設定

パラメータ用の XML テキストエディター等を使って記述します。

テキストエディターで解析条件ファイルを開きます。

5.3.7 で保存した解析条件ファイルの InputData タグは以下のようになっています。

```
<Elem name="VO" id="103"/>
```

ここに、膜面積ファイルの読み込みに関する以下の記述を追加します。

```
<Elem name="molecular">
  <Elem name="VO" id="104">
    <Param name="Potential" dtype="STRING" value="true"/>
  </Elem>
</Elem>
```

ここでは、媒質 M1 と媒質 M2 の膜の面積を読み込むため attr には "M1:M2_MembArea" と記述します。

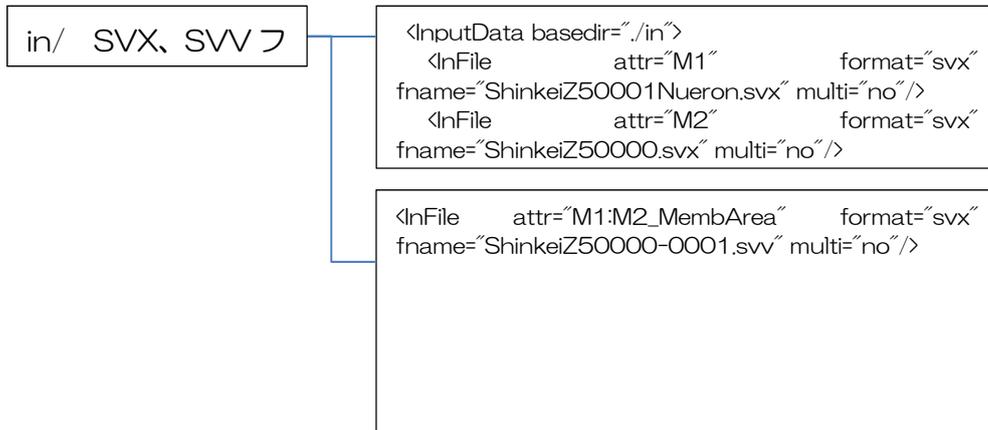
編集後、InputData タグは以下のようになります。

```
<InputData basedir="./in">  
  <InFile attr="M1" format="svx" fname="ShinkeiZ50001Nueron.svx" multi="no"/>  
  <InFile attr="M2" format="svx" fname="ShinkeiZ50000.svx" multi="no"/>  
</InputData>
```

5.4. 解析の実行

作成した XML を指定してジョブを実行します。

ディレクトリ構成と各ディレクトリのファイルは以下のようになります。



実行はコマンドプロンプトより実行します。

解析条件ファイルのあるディレクトリに移動し、以下のコマンドを実行します。

```
Prompt> rcellsim run.xml
```

また、並列処理で解析を行う場合は、以下のコマンドを実行します。

```
Prompt> mpirun -np 64 rcellsim run.xml
```

解析条件に誤りが無ければ、指定したディレクトリ（./out）に、解析結果が出力されます。

以下は、Visio による可視化の一例です。

