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

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

1.	はじめば		5
2.	共通争り 211	₹ BICS システムの概要	о 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
З.	単一細胞	泡モデル	11
3	8.1. ľ	F業フロー11	
e E	8.2. ii 8.3 ii	†算七テル12 ジボデータ作成 15	
U	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
З	8.4. 角	Q析条件設定	
	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
З	8.5. 角	発析の実行	
4.	肝細胞7	モデル	69
4	·.⊤. ĩ ·.2. ∄	r乗ッコ	
	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

日	次
	~ ~ ~

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		
4.2.5.	血管部分を作成		
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)		
4.2.9.	細胞のコピー		
4.3. 角	<b>犁析条件設定</b>	86	
4.3.1.	モデル規模、シミュレーション条件の設定(Domain Info タン	ブ)	
4.3.2.	媒質・物質指定(Cell & Molecular タブ)		
4.3.3.	入出力ファイル指定(In & Out タブ)		
4.3.4.	並列化条件の設定(Parallel Computing タブ)		
4.3.5.	ファイル出カパラメータの設定(Output Parameter タブ).		
4.3.6.	各機能の実行制御パラメータの設定(SimSetting タブ)		
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		
4.3.10	. 境界条件の設定		
4.4. 角	2杯の実行	94	
5. 神経細胞	包モデル	~~~	96
5.1. ľ	F業ノロー ジボデータ作成	96 97	
5.2.1.	- 媒質データ、膜面積データの作成(CalcMembareaVcat)		97
5.3. 角	释析条件設定	99	
5.3.1.	モデル規模、シミュレーション条件の設定(Domain Info タフ	ブ)	
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.	ファイル出カパラメータの設定(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. 角	2桁の実行	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
- 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)。



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方法

各シミュレーションのデータレコードと使用方法の概略を示します。 一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 一拡散シミュレーション 開口率(ボクセル間が連続している割合)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 一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と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

Start 形状データ作成・出力 解析条件の設定・出力 解析実行 End

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 Voxelizaion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(Segmentaion)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/	実行用ファイルー式

#### 02\_hep/

+—02_hep_1model/	VCAT 等の入力ファイル、	中間ファイル
+-02_hep_2sim/	実行用ファイルー式	

#### 03\_Shinkei/

+—03_Shinkei_1model/	VCAT 等の元ファイル、中間ファイル
+—03_Shinkei_2sim/	実行用ファイルー式

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。

・オブジェクトリ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 キーを組み合わせて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



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

	Translation			Scale				
	Х	Y	Z	Х	Y	Z	OBJファイル名	
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	
mЗ	12.0	8.0	6.0	21.0	13.0	13.0	Cube01x01x01.obj	
	Voxel Size			\	/oxel Pitcł	n	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)	А	E1	В			
物	媒質名乀物質名	Х	E1	ATP	ADP	Pi	Y
貝初	m1_ball	—		_	—		—
期濃	m2_cube	—		-	—	-	0.0
度	m3_cell	0.0	100.0	0.0	0.0	0.0	1.0e+3
	m4_out	1000.0			_		0.0

物質のパラメータ(初期濃度、拡散係数)

※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 ...

🔁 V	-Xgen: [no file]			- • ×
File	View Object Volume Vo	exelization Hel	2	
	New	CTRL+N	r 💱 🖪 🗐 🖪 🕲 💪	
	Open	CTRL+0		
	Import	•	vxg XML project file CTRL+SHIFT+O	
	Convert	۱.	Shape(stl/obj) data files CTRL+I	
	Save	CTRL+W	Shape tree directory CTRL+T	
	Save As	CTRL+A	Volume(svx/sbx/sph/ovx) data files SHIFT+I	
	Dolygon Roducor		V-Cat data files CTRL+SHIFT+I	
	Set V-Xpp program path	ĺ.	Non-Uniform Cartesian data file(for svx/sbx)	
	Properties			
	Quit	CTRL+Q		
		لر		
		No da	ata selected	4

ファイルのフィルターを WaveFront OBJ(\*.obj:\*.wfo) に変更して CubeO1xO1xO1.obj を2回 SphereO1xO1xO1.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 くなるバグが見つかっています(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。

Material list					×
ID (-)	Color		Label (-)		New
0		default			Delete
		mtl_1			Delete
		mtl_2			Check
		•			
-				•	
					Close

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

Choose color of the current Mtl	×
基本色(B):	•
	色合(\(E)、160 赤(R): 0
色の作成(D) >>       OK     キャンセル	鮮やかさ(S):         240         緑(G):         0           色   純色(O)         明るさ(L):         120         春(U):         255           色の追加(A)

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 入力值

	Translation			Scale			
	X	Y	Z	X	Y	Z	OBJファイル名
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
mЗ	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:tutO1\_O1\_Obj\_Xform.xml(V-Xgen用) 使用データ: obj¥CubeO1xO1xO1.obj、obj¥SphereO1xO1xO1.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。

	ペン
Voxelization properties	Voxelization properties
SV         OV         BCM         Setting           IV         © Coordinate Space         IV	SV OV BCM Setting
Polcy         ® Size and Min.         Min. and Max.         Use Handle in GFX view           Bbox Min.         X         -0.500000         Y         -0.500000         Z         -0.500000	voxelization Method ○ octree ■ Jacket Seating (JUDI) Implicit Function を選択
Bbox Max. X 0.500000 Y 0.500000 Z 0.500000 Bbox See X 1.000000 Y 1.000000 Z 1.000000	Implicit Function (MPU)     Implicit Function (SUELL)
Fitting Centering Update	
Image: Constraint of the second sec	I Show Guide Bbox I Show Grid Algnment I Global Algnment I Global Algnment
Update Update Update Create Empty Voxel Create Empty Voxel	Coordinates Fixed When Updated Min. Direction Center Coordinate Spaceの
Reference Ratio	- <sup>◎</sup> Max. Direction · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
SV タブに戻って Voxel 数等を語 ・Voxel Pitch を指定 ●Resolution を選択 ●Pitch を選択	ひxxelization properties Voxelization properties SV OV BCM Setting V Coordinate Space Policy ◎ Size and Min. Min. and Max. Use Handle in GFX view Bbox Min. X -0.500000 Y -0.500000 Z -0.500000 Bbox Max. X 0.500000 Y 0.500000 Z 0.500000 Bbox Size X 1.000000 Y 1.000000 Z 1.000000 Fitting Centering Update
■Uniform チェックボック Xの下の●を選択し、X:	スをOn 1.0 を設定 Vwisin X 1 Y 1 z 1 P Resolution P Dwisin X 1 Y 1 z 1 P Resolution V 1.00000 Y 1.000000 z 1.00000 Update
数値を入力後、Update ボタン	ンを押トし、数 Voxelization
字が黒くなるのを確認します。	Adjustment in Index Space

- ・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。

61/	_	ov 1 pg	• 1	Collins ]			
57		OV BO	M	Setting			
Coordin	ate	Space					
Policy @	Size	and Min. 💿 M	in. and	Max. 📃 Us	e Handle	in GFX view	
Bbox Min.	х	0.000000	Y	0.000000	z	0.000000	
Bbox Max.	х	24.000000	Y	16.000000	Z	14.000000	
Bbox Size	x	24.000000	Y	16.000000	z	14.000000	
			[	Fitting	Cent	ering Upd	ate
🗹 🔘 Resolut	tion						
Olvision	х	24	Y	16	Z	14	
@ Pitch	х	1.000000	Y	1.000000	z	1.000000	
Uniform		۲					
						Upr	late
Voxelizatio	n						
				Vo	xeize	Create Empty	Voxe
Adjustmen	t in J	index Space					

Voxelization を行います。

各オブジェエ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 mЗ m3.svx Voxelization properties × SV OV BCM Setting Z Ocordinate Space Detach Tree View z 0.000000 z 14.000000 Bbox Min. X 0.000000 Y 0.000000 Y 16.000000 Bbox Max. X 24.000000 Y 16.000000 Z 14.000000 Bbox Size X 24.000000 Fitting Centering Update Resolution min = (11.5000, 3.5000, 1.5000) Z 14 Y 16 O Division X 24 Y 1.000000 Z 1.000000 Pitch X 1.000000
 Show Valid Uniform 0 Update Xform Move to Dupicate Voxelization Cut by plane Fix mesh Voxelize Create Empty Voxel verse normals Reduction 1 🔲 Adjustment in Index Space Reference Ratio ted: 1 obj/grp [m1]

 ・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 で見つける必要があります。



[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:tutO1\_O2\_Voxelize.xml(V-Xgen用) 使用データ: obj¥CubeO1xO1xO1.obj、obj¥SphereO1xO1xO1.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

🐴 V-	Xpp: [r	n1.svx]		
File	View	Volume	WOI Help	
-Cl	•@	6	Select VOI Show VOI with medium color	CTRL+V
			Show Slice Slice Control Draw Slice in back	CTRL+S SHIFT+S
			Set Rockm Set Boo ED profiber Moltum Set Poone Rate Set Open Rate Undo the last Set command	
	Ĺ			

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



・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。

Voxelization p	prope	erties					×	
SV		ov	BCM		Setting			
🔽 🔘 Coordin	Coordinate Space							
Policy 🔘	Size	and Min	. 🔘 Min.	and	Max.	Use Handle	in GFX view	
Bbox Min.	Х	0.0000	00	Y	0.000000	Z	0.000000	
Bbox Max.	x	24.000	000	Y	16.00000	Z	14.000000	
Bbox Size	х	24.000	000	Y	16.000000	Z	14.000000	
				(	Fitting	Cent	ering Update	
🔽 🔍 Resolut	ion							
Division	Х	24		<b>Y</b>	16	Z	14	
Pitch	Х	1.0000	00	Y	1.000000	Z	1.000000	
<b>Uniform</b>			۲		$\odot$		0	
							Update	
Voxelizatio	n							
					<u>۱</u>	/oxelize	Create Empty Voxel	
Adjustmen	Adjustment in Index Space							
Reference	Ratio							

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



(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。

Volume Data Type									
select data type to edit           Image: Volume Rate									
🗖 Open Rate									
Voxel Medium									
Face BC									
reset cancel	ok								

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: tutO1\_O3\_before\_merge¥tutO1\_O3\_before\_merge.xml(RICS-pre用) 使用データ:(tutO1\_O3\_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

shap	e prop : m1_mod			×				
Volu	me rate threthold	0.20	00000					
			۲	>=				
					edit color			
Opac	tity		0.90	00000				
Crop	region				reset			
X1	0	×.	X2	23				
Y1	0	* *	Y2	15	×			
Z1	0	*	Z2	13				
🔳 sh	show voxel line							
					close			

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





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。

ilume merge: m3_mod		×
VolumeSelection		
Source Volume		*
m1_mod		
m2_mod		
		Ŧ
Merge Option		
<ul> <li>Merge by addition</li> </ul>		
Merge by subtraction		
Merge by multiplication		
Volume Rate is kept from exc Exceed Option The part exceeding 0% t The whole data perfromm	eeding 0% to 100% to 100% is cut. s scaing.	
Coefficient Target Volume Coefficient	Source Volume Coefficient	
1.00	1.00	

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 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...



32 Copyright © 2013 RIKEN All Rights Reserved.

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  $\rightarrow$  m1\_ball.svx m3\_modVolumeRate.svx  $\rightarrow$  m3\_cell.svx m4\_modVolumeRate.svx  $\rightarrow$  m4\_out.svx

コピー先フォルダ:01\_1Cell\_1model2

[この段階のファイル](フォルダ:O1\_1Cell\_1model2) ファイル名:tutO1\_O5\_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
🚸 Volume Maker 📃 🔀
<u>F</u> ile <u>V</u> iew
Primitive Filter
- Primitive
Center Pos
X 22.000000 Y 8.000000 Z 4.000000
Cube
Make Cube
Sphere
O Make Sphere
Radius 20.000000
Cylinder
Make Orlinder
Wake Cyllinger
Elipsoid
🔘 Make Ellipsoid
X Size 20.000000 Y Size 30.000000 Z Size 40.000000
Volume Space
Volume Origin
X 0.000000 Y 0.000000 Z 0.00000
Volume Space Size
^ 24.000000 ' 16.000000 2 14.000000
Volume Space Division
X 24 Y 16 Z 14
Output SPH File
Output and Import SPH File to Exit

・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

🎐 Volume Mal	ker	X
ile <u>V</u> iew		
Primitive Filte	r	
Filtering		
Kind of Filter		
Between	X 🔘 Between Y 🔘 Between Z	
Radial		
-Filtering Ra	nge	
Min	-1000.000000 Max 1000.000000	
Min Value	a 1000 MaxValue 1000	
Choice S A B	igmoid (f(x) = A / {B + C * exp(-a(x-x0)) }) 0.000000 0.000000	
C	0.000000	
а	0.000000	
X0	0.000000	
	0.00000	
	Output SPH File	
	Output and Import SPH File to Exit	

・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 : tutO1\_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 O~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。

	Select	
	Please select Scale or Cut or Nothing. If Cancel is pressed, it becomes Nothing.	
	Scale	
	Cut	
	Nothing OK Can	cel
Birs-ore-ot: [tut01_05	ore will	
File View Object Volu	me Voxelization RICS Help	(100,100)
-CI -B (B) (B)	<u>"" "" "" " " " " " " " " " " " " " " " </u>	
m4_cute(*) m4_cut(*) Channel1000(*)		
	selected: 0 obj/grp, 5 volume	

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 Volxel 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:tutO1\_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表示(左:媒質同時選択、右:媒質選択解除)

no data

・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。

Nics-pre-pt: [tut01_07_with_channel.xml]	
File View Object Volume Voxelization RICS Help	
- d - e to the total of total of the total of tota	
Image: Solution of the second seco	
no data selected	

・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

VOI Export	×
Value conversion	
Positive voxel	1.0
Negative voxel	0.0
Cance	l Ok





[この段階のファイル](フォルダ:01\_1Cell\_1model2) ファイル名:tut01\_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





(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。

Register VOI	×
[	register
Registered VOI	
	restore
	delete
	import
	export
	close

 (4) VOI 選択部分の情報の表示、保存 選択 Volxel 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。

humber of selection display No. fro	tted voxel : 4 m 1 to 4		^
( 5, 7, 12)	(5.500000, 7.5000	000, 12.500000)	
(6, 7, 12) (5, 8, 12)	(5.500000, 7.5000	00, 12.500000)	
(6, 8, 12)	(6.500000, 8.5000	000, 12.500000)	
			-
< 1	/ 1 >	update	close



(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 o display	f selected voxel : 8 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...

🔁 V->	Kpp: [r	n3_c	ell.svx]		
File	View	Volu	ume VOI Help		
-E1	-0		Show Info	CTRL+I	
	-	<	Show Bounding-Box	CTRL+B	
			Show Volume Rendering	CTRL+R	
			Volume Rendering Params	CTRL+SHIFT+R	
			Voxel Pick Anchor	CTRL+SHIFT+A	
			Show Voxel BC		
			Show X Face BC		
			Show Y Face BC		
			Show Z Face BC		
			Invert Volume-Rate		
			Invert All Open-Rate		
			Medium List	SHIFT+M	
7			BC from Medium		
¥4			BC List		
			VOI: 17	88 voxel(s) selected.	1.

チャネルの設定位置、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。



## チャネル設定位置

Index: IJK = [22, 7, 6] Cell coord: 

## 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:

外部領域(m2\_cube)

Index: IJK = [6, 7, 12]

Cell coord:

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 チャネルの局在(チャネル密度)

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 7:14 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) Y: 1.0 X:10 7:10 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) •Fuler 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)		А	E1	В			
物	媒質名乀物質名	Х	E1	ATP	ADP	Pi	Y
筫 初 期 濃	m1_ball	-	_	_	_		—
	m2_cube	_	—	_	_	-	0.0
度	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

Eml Dir				
ID	Name	EML File	Fusion	Calc Thres
1	m1_ball			
2	m2_cube			
3	m3_cell			
4	m4_out			
Add	Edit	Delete	Import	CSV Export CSV

(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。

11

	Name	Full ID	DifCoef	
5	Х	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	

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)

Copyright © 2013 RIKEN All Rights Reserved.

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	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
🗷 Use Full ID		
Full ID		
Variable:	•]:[A •	
Diffusion Coef	ficient	
Use Diffusio	on Coefficient	
Diffusion Coe	fficient 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 Concent	ration			
	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。

٠	Simulation	Setting: [run	n.xml]	
E	ile			
D	omain Info	Cell & Molecul	lar In & Out ParallelComputing Output Parameter Sim Setting	•
ſ	InputData —			
	Data Folder	D:¥RICS_T	utoria¥01_1Cell_sim¥in¥	
	InDir	/in		
lc.	InputFile			
	Attribute	Format	Fname	
	m1_ball	SVX	m1_ball.svx	
	m2_cube	SVX	m2_cube.svx	
	m3_cell	SVX	m3_cell.svx	
	m4_out	SVX	m4_out.svx	
	m3_cell:E1	sph	MembReact.sph	
	Medium A	dd Mole	cular Add Diffusion Add Boundary Add	
	Edit		Delete Import CSV Export CSV	

・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。

Add InputMediumData	×
Attribute	Format
m1_ball 🔻	SVX
Fname	
m1_ball.svx •	
	OK Cancel

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

Add InputData	×
Attribute	Format
[m3_cell ▼ : E1 ▼	SPH
Fname	
MembReact.sph -	
	OK Cancel

## (2) 出力データ(OutputData)

計算結果の出力に関する設定をします。

DutDir		./out		
nonitor interv	al	10		
OutputFile				 
Attribute	Interval	BaseName		-
m1_ball	10000	m1_		=
m2_cube	10000	m2_		
m3_cell	10000	m3_		
m4_out	10000	m4_		
m2_cube:Y	20	m2Y_		
m3_cell:X	20	m3X_		
Add		Edit Del	te	

・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。

55 Copyright © 2013 RIKEN All Rights Reserved. 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。

Edit OutputData	<b>X</b>
Attribute	Interval
m2_cube ▼ : Y ▼	20
BaseName m2Y_	
	OK Cancel

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\_000000000.sph、m2Y\_000000020.sph、m2Y\_0000000040.sph、 m2Y\_000000060.sph、m2Y\_000000080.sph、・・・ ※最終的な出力の有無は、OutputParameter タブで指定します。

ここに出力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力 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。

♦ Simulation Setting: [run_R01DCpr01.xml]
<u>F</u> ile
Domain Info       Cell & Molecular       In & Out       ParallelComputing       Output Parameter       Sim Setting         ParallelComputing       Add Job       Edit Job       Edit Job       Delete Job

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
  - 1:3
  - J:2
  - K:2

Equation			
*.*	Add Equation Edit Equation Delete Equation	Division DK © Choice DK I J K	3 2 2
		© Choice All	1
Reaction (Metabolism) G	TOUD		
Reaction(Metabolism) Gi Material #1	Add Material Edit Material Delete Material		

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	Output	
—	Output Material	
m3 cell:X	m2_cube:Y	*
	✓ m3_cell:X	
m3 cell:Y	✓ m3_cell:Y	
	m3_cell:E1	
m3 cell:ATP	m3_cell:ATP	
	m3_cell:ADP	=
m4 out:X	m3_cell:Pi	
In <u>_</u> oats (	✓ m4_out:X	
m4 out:Y	✓ m4_out:Y	*

57 Copyright © 2013 RIKEN All Rights Reserved. (2) 数值観測点設定(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。

No	Point X	Point Y	Point Z	Int	Filename
1	2.250000e+001	7.500000e+000	4.500000e+000	1	probeChan.csv
2	1.150000e+001	7.500000e+000	6.500000e+000	1	probeReact.csv
3	6.500000e+000	7.500000e+000	7.500000e+000	1	probeCube.csv
4	6.500000e+000	7.500000e+000	1.250000e+001	1	probeOut.csv

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

Edit Probe		×
Probe Point		
X 2.250000e+001	Y 7.500000e+000	Z 4.500000e+000
Output Probe File		
probeChan.csv		
Interval 1		
Output Material      m2_cube:Y     m3_cel:X     m3_cel:E1     m3_cel:E1     m3_cel:ATP     m3_cel:ADP     m3_cel:Pi     w m4_out:X     w m4_out:Y		A H
		Ok Cancel

11

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)。

Probe	ProbePoint(座標値)		Output Probe Flle	Output Material
Х	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)

ODiffusion Type Basic(直行 6 方向)

Warp ワープ機能の設定

■Output Warp Tag (Warp の実行)

Simulation Setting: [run_R01DCpr01.xml]						
<u>F</u> ile						
Domain Info	ell & Molecula	r In & Out Pa	rallelComputing	Output Paramete	er Sim Setting 💶 🕨	
reaction(metab	olism)					
Field						
Output File Ba	aseName					
Interval	1					
Target						
Add Field	Edit Field	Delete Field				
Attribute	Output Fil	Interval	Target			
Probe	1					
No	Point X	Point Y	Point Z	Filename		
Add Probe	Edit Pro	be Delete	Probe			
Diffusion						
execution						
Diffusion Type 26-Way     Diffusion Type Basic						
Warp						
Output War	rp Tag					

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。

Simulation Setting: [run_R01DCpr01.xml]					X			
File								
In & Out Membran	Para e tion	allelComputing	Ou	tput Parameter	Sim Setting	g Membrane	Membrane Poter	iti 🔸 🔸
Membrane Name         Substance         Carrying Function         SW Ctrl Num           m4_out:m3_cell         X         Channel         0								
Ado	d	Edit		Delete	Сору	Renumber	r	
Imp	oort I	Membrane CS\	/	Export M	embrane CS	V		
True of		the Direction	CCL		and Even attend	COL		
Import	t Cor	Itrol Function	LSV	Export Cont	rol Function	CSV		
Imp	ort 9	SPH Assian CS	v	Export SF	PH Assian CS	V		
Edit Membran	e						X	ſ
Medium 1	m	3_cell ▼	1	Medium 2 m4_out	•			
Substance	Substance X -							
Carrying funct	ion Ch	annel 👻	] 1	D 2				
Name		Value	SD	H Filo	SwCtrl			
K	۲	Value			loint Me	thod		
Ke	۲					sum 👻		
SW	۲				SwCtrl	Na Param		
Den	۲							
Fuzzy	۲							
VmaxATP	0							
KmATP	0							
TRATP	0							
VmaxGTP	0		ОГ					
KmGTP	0							
TRGTP				[				
		Value	Su	bstance				
CSR								
PSR				+				
CAR					Ad	d Edit	Delete	
PAR				-				

(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

Simulation Setting: [run_R01DCpr01.xml]							X
<u>F</u> ile							-
Output Paran	neter	Sim Setting	Membrane	Membrane Pot	tential Memb	rane Reaction	Exter 🔹 📩
-Membrane R	eactio	n					
execution	Ì						
Cell	Mer	mbrane React	ion Name	EML	Height	Reactsite	
m3_cell	Mer	mbReact		D:/TMP/	0.000000	-	
Add		Edit	Delete	Сору			

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		

Membrane Reaction Edit	×
Membrane Reaction	
Membrane Reaction Name MembReact	
EML Setting	
EML File D:/TMP/RICS/cell1_new/result_R01DCpr01/em¥A_t	From File
	From Library
EMLFile Explanation	<u> </u>
fmat1.eml mat1.eml mat2.eml	-
Parameter	
Membrane Reaction Height 1.000000	
Reacting Side Cell m3_cell -	
Receptor Binding Side Cell Binding Side Substance X	
ОК	Cancel

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

<i>n n</i>
<elem name="warp_setting"></elem>
<elem comment="Warp Cube2Out" id="1" name="WarpGroup"></elem>
<param dtype="STRING" name="type" value="Direct"/>
<elem id="1" name="TempArea"></elem>
<param dtype="REAL" name="TempAreaVolume" value="1.0"/>
<elem id="~1~" name="~WarpInfo~"></elem>
<pre> {Elem pame="SourceInfo"&gt;</pre>
<pre>{Param pame="equation" dtype="STBING" value="m2 cube;Y"/&gt;</pre>
(Param pame-"Waly opporting" dtype="STRING" value-"DensityBatio" ()
Celem name= SPH >
(Param name= attr dtype= STRING value= WARP.src_pos /)
!SourceInfo
<elem name="SourceTrigger"></elem>
<param dtype="STRING" name="equation" value="m2_cube:Y"/>
<param dtype="STRING" name="OpeType" value="min"/>
<param dtype="STRING" name="CompType" value="GreaterEqual"/>
<param dtype="STRING" name="ValueType" value="fixed"/>
<param dtype="REAL" name="threshold" value="0.5"/>
⟨Elem name=″position″>
<pre> <flem name="SPH"></flem></pre>
(Param pame="attr" dtype="STRING" value="WARP:src pos"/>
(Persent ended) (http://www.com/org/co
(Paraminame- value) ype dype-Sthing value- fixed //
Celem name= position >
<pre><elem <br="" name="index">index / index / index</elem></pre>
(Param name   dtype= INI value= 5 />
(Param name= J dtype= IN] value= ( / >
(Param name=K, dtype=INI value=12/)
<param 6"="" dtype=" N  i=value=" name="  "/>
<param dtype="INT" name="J" value="7"/>
<param dtype="INT" name="K" value="12"/>
<param dtype="INT" name="I" value="5"/>
<param dtype="INT" name="J" value="8"/>
<param dtype="INT" name="K" value="12"/>
<param dtype="INT" name="l" value="6"/>
<param dtype="INT" name="J" value="8"/>
<param dtype="INT" name="K" value="12"/>
!DistInfo
!WarpInfo
WarpGroup
<pre></pre> <pre>(/Elem&gt; lWarnSetting</pre>

# 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。

01_1Cell_2sim/	条件設定ファイル等(実行ディレクトリ) run_cell1.xml
	eml/ emlファイル A_B_for_1cell_1Gnoe.eml
	in/ SVX、SPH 等の分布・局在ファイル Channel1000.sph m1_ball.svx m2_cube.svx m3_cell.svx m4_out.svx MembReact.sph WarpSource.sph

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。



物質の変化(移動)の流れに沿って、物質の濃度をあらわす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。







# 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。

Volume Maker	x
<u>F</u> ile <u>V</u> iew	
Primitive Filter	Center Pos(楕円球の中心) X:10.0 Y:12.0 Z:1.5
Center Pos	
X 10.000000 Y 12.000000 Z 1.500000	
Cube	
Make Cube	
X Size 25.000000 Y Size 25.000000 Z Size	25.000000
Sphere	
Make Sphere	
Radius 20.000000	
Cylinder	
Make Ovlinder	
Height to occord Radius an occord Direct	
110gire 40.000000 100000 20.000000 Direct	
Ellipsoid	Ellipsoid (楕円球のサイス)
Make Ellipsoid	X · 10.0 F · 9.0 Z · 100.0
X Size 10.000000 Y Size 9.000000 Z Size	100.000000
Volume Space	
Volume Origin	
X 0.000000 Y 0.000000 Z 0.00000	Volume Origin (原点) X·00 V·00 Z·00
- Volumo Space Size	Volume Space Size(計算領域の大きさ)
	X : 20.0 Y : 19.0 Z : 3.0
× 20.00000 · 19.00000 · 2 3.00000	Volume Space Division(ボクセル数)
Volume Space Division	X : 20 Y : 19 Z : 3
X 20 Y 19 Z 3	
Output SPH File	
Output and Import SPH File to Exit	

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。

#### 🍢 Rics-pre-pt: [no file] File View Object Volume Voxelization RICS Help •0]•0 C Root NuClear[\* Volume: NuClear File: C:¥RICS¥RICSPre\_DATA ¥Iryu00¥NuClear4.svx TimeStamp: Sun Mar 11 23:48:08 2012 Type: svx Rasterize method: Unknown Dims: 20 x 19 x 3 Size: min = (0.0000, 0.0000, 0.0000) max = (20.0000, 19.0000, 3.0000) uc pitch = (1.0000, 1.0000, 1.0000) Coordinate = Uniform show bbox show shape show primitive obj xform shape props merge restore backup duplicate delete setting Primitive SPH Property rectilinear RICS merge z Žz RICS Resampling edit (Vxpp) selected: 1 volume [NuClear]

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。

Volume Data Type 📃 💌					
select data type to edit					
Volume Rate					
🗖 Open Rate					
Voxel Medium					
🗖 Voxel BC					
Face BC					
reset cancel ok					

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)

V-Xpp: [NuClear0.svx]		
File View Volume VC	I] <u>H</u> elp	
••	Select VOI CTRL+V Show VOI with medium color	
	Show Slice CTRL+S	
	Slice Control CTRL+SHIFT+S	
	Draw Slice in back	
	Set Medium	
	Set BC	
	Set Face BC by neighbor Medium	
	Set Open Rate	
	Lindo the last Set command	
Y		
z		
	VOI: no voxels selected.	

VOI 抽出機能の起動

VOI Selection	×
Mode Replace	Select Condition Reset
C Add C Subtract C Intersect	X 0 Y 0 Z 0 19 18 2
Selection Do Select	X         0.000000         Y         0.000000         Z         0.000000           20.000000         19.000000         3.000000
Invert	Medium 0 Voxel BC 0
All	Volume Rate min 0.0 max 1.0
None	Face Type
Undo last	X Face BC     Y Face BC     Z Face BC       0     0
	X         0.0         Y         0.0         Z         0.0           1.0
	Close

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)

🐴 V-X	pp: [N	uClear0.	svx]			
File \	View	Volume	VOI	<u>H</u> elp		
đ	•	Þ		Select VOI Show VOI with medium color	CTRL+V	
				Show Slice Slice Control Draw Slice in back	CTRL+S CTRL+SHIFT+S	
				Set Medium Set BC Set Face BC by neighbor Mediu Set Volume Rate Set Open Rate		
				Undo the last Set command		/
	Į,	×				
				VOI: no voxels select	ted.	

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	Х:	0	Υ:Ο	Ζ:Ο
	$\sim$	U	1.0	2.0

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でメインメニュー: 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でメインメニュー: 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

andice by a volume rile		
	Time Stamp	
120309_チュートリアル他¥細胞索モデル(移流)¥ 120309_チュートリアル他¥細胞索モデル(移流)¥ 120309_チュートリアル他¥細胞索モデル(移流)¥	Iryu¥Cytoplasm.svx Mon Mar 12 00:37:45 20 Iryu¥Nucleus.svx Mon Mar 12 00:37:45 20 Iryu¥BloodVessel.svx Mon Mar 12 00:37:46 20	12 12 12
•		•
Select Data Information		
Volume: Cytoplasm File: D:¥00_Project¥RICS¥RICS_2011¥V 流)¥Iryu¥Cytoplasm.svx TimeStamp: Mon Mar 12 00:37:45 201 Type: svx Rasterize method: Unknown Dims: 20 x 19 x 3	VorkFlow¥20120309_チュートリアル他¥細胞索モデル(≉ 2	A
Choice Output Data		
Choice Output Data Output Data Type	Area Rate Option	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate	Area Rate Option <ul> <li>Calc Area Rate</li> <li>Use Data</li> </ul>	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID	Area Rate Option <ul> <li>Calc Area Rate</li> <li>Use Data</li> </ul> Output Data XYZ	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID CellBoundary Condition ID Field Boundary Condition ID	Area Rate Option © Calc Area Rate © Use Data Output Data XYZ © X(I) © Y(J) © Z(K)	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID CellBoundary Condition ID Field Boundary Condition ID	Area Rate Option © Calc Area Rate Ouse Data Output Data XYZ © X(I) Y(J) Z(K)	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID CellBoundary Condition ID Field Boundary Condition ID Dption Magnification coefficient	Area Rate Option <ul> <li>Calc Area Rate</li> <li>Use Data</li> </ul> <li>Output Data XYZ <ul> <li>X(I)</li> <li>Y(J)</li> <li>Z(K)</li> </ul> </li> <li>Round Up _Round Down</li>	
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID CellBoundary Condition ID Field Boundary Condition ID Option Magnification coefficient Coefficient 1.0	Area Rate Option <ul> <li>Calc Area Rate</li> <li>Use Data</li> </ul> <li>Output Data XYZ <ul> <li>X(I)</li> <li>Y(J)</li> <li>Z(K)</li> </ul> </li> <li>Round Up _Round Down <ul> <li>Use Round Up _Threshold 0</li> </ul> </li>	.0
Choice Output Data Output Data Type Volume Rate Area Rate Medium ID CellBoundary Condition ID Field Boundary Condition ID Option Magnification coefficient Coefficient 1.0	Area Rate Option Calc Area Rate Cuse Data Output Data XYZ XII Y(J) Y(J) Z(K) Round Up _Round Down Use Round Up Threshold Use Round Down Threshold O	.0

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。

🍢 Ri	cs-pre-p	ot: [Iryu.	xml]					
File	View	Object	Volume	Voxelization	RICS	<u>H</u> elp		
	New			CTRL+	-N	T <sup>×</sup> tox		
	Open			CTRL+	-0 📙			
	Import				×	vxg XML project file	CTRL+SHIFT+O	
	Save			CTRL+	W	Shape(obj/stl) data files	CTRL+I	
	Save A	s		CTRL+	⊦A	SPH Volume(sph) data files		
	Export				•	Volume(svx/sbx/ovx) data files	SHIFT+I	
	Polygor	Reducer	r		•	V-Cat data files	CTRL+SHIFT+I	
	Set V->	(pp progr	am path.			Rectilinear coordinate data(for SV	X/SBX)	
	Propert	ies						
	Quit			CTRL+	-Q		man	
Ras Dim Size mi ma	terize m s: 20 x 1 : n = (0.0 x = (20.	ethod: Ur L9 x 3 000, 0.00 .0000, 19	iknown 00, 0.000 .0000, 3.0	0) 0000)				
▼ sh	ow bbo: ow prim	x itive obj	✓ show	shape				
	xform	n	shap	e props				
	merg	e )	restor	e backup				
	duplica	ite	d	elete	ľ	-×		
	tting Dr	imitivo	C011	Dranarty	<b>~</b>			
					selected	d: 1 volume [Cytoplasm]		

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。



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
G 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ー覧

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) •Fuler 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
МЗ	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_
MЗ	1000000	МЗ_
M4	1000000	M4_
M5	1000000	M5_
M6	1000000	M6_
M7	1000000	M7_
M8	1000000	M8_
M9	1000000	M9_
M10	1000000	M10_
M11	100000	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)
  ODiffusion 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0をご参照ください。

Medium1	Medium2	Substance	Carrying function
M1	MЗ	В	GapJunction
M1	M11	В	GapJunction
M5	M7	В	GapJunction
M7	M9	В	GapJunction
M9	M11	В	GapJunction

ここでは、以下のように設定します。

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
К	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</method>		
<output_dir> /out/</output_dir>		
<input_dir> /in/</input_dir>		
<input_files> Cytoplasm.svx Nucleus.svx</input_files>		
<same_mat_files> BloodVessel.svx vel.sph</same_mat_files>		
<map_area> 5,1,1</map_area>		
<map> :,1,1</map>		

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>

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 O.O 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。

(Elem name="FaceBC"> (Param name="type" dtype="INT" value="0"/> (Param name="value" dtype="REAL" value="0.0"/> (Param name="face" dtype="STRING" value="X_PLUS"/> (Param name="mat" dtype="STRING" value="M1"/> (Param name="mot" dtype="STRING" value="B"/> (/Elem>

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

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.svv

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 VoxelSize(Voxel 数) X: 384 Z: 0.0 Z: 5 Y: 0.0 Ý: 128 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:5,00000e-001 Y:5,00000e-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) dt: 5.00000e-003 ●Use dt 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。
     物質認定ダイアログのお動
    - ・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

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

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 Flle	Output Material	
Х	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。

<sup>(2)</sup> 数值観測点設定(Probe)

Simulation Setting: [run.xml]	
Eile	
Sim Setting Membrane Membrane Potential Membrane Reaction Extension Parameter	< >
Membrane Potential	
✓ execution	
Propagation Type 26-Way     OPropagation Type Basic	
V Hodgkin-Huxley calc	
Membran	
M1:M2	
Add Edit Delete Copy	

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)

OPropagation 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。

Membrane Potent	ial Edit				
Medium M1 💙 : M2	2 😽				
Parameter		Iapp			
Parameter active		Fixed Value	Table Value	Index Num	Coord Nu
Cm	1.000000		IappX1e-4	2	0
gK	36.000000				
gNa	120.000000				
gL	0.300000				
vК	-12.000000				
vNa	115.000000				
٧L	10.613000				
Diff Coef	10.000000				
V	0.003564				
м	0.053030				
N	0.317758	<			>
Н	0.596441	Add	Edit	Delete	Сору
				ок	Cancel

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
$\vee$	: 0.003564
M	: 0.053030
Ν	:0.317758
Н	: 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。

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

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。

Iapp Edit								X
Fixed Value Table Value	e	0.000000 IappX1e-4Y1.0.c:						
Index Act	ive		:	I				
I	J	к	Π.	J				
47	3	1		<				
4/	3	2		Add		Edit	Delete	]
Coord								
Coord Act	tive		:	K				
X	Y	Z						
				Add		Edit	Delete	
SPH								
SPH Activ	e		1	SPH Name	MEMP	POTE:	 	
SPH Name	SPH	File	-	SPH File			 	
				Add		Edit	Delete	
						ОК	Cano	:el

□Fixed Value(固定值)

■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)

103 Copyright © 2013 RIKEN All Rights Reserved. ■Index Active(lapp を与えるインデックスの指定)

O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。

	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+01,400.000 1,5500E+01,0.000
1.6000E+01,0.000
1.6000E+01,400.000 2.1000E+01,400.000
2,1000E+01,0000
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。

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="V0" 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>
<elem id="104" name="V0"></elem>
<pre><param dtype="STRING" name="Potential" value="true"/></pre>

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。

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。

in/ SVX、SVVフ	<pre><inputdata basedir="./in"></inputdata></pre>
	<infile <br="" attr="M1:M2_MembArea" format="svx">fname="ShinkeiZ50000-0001.svv" multi="no"/&gt;</infile>

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。

