

CADLIVE Ver.2.75

操作説明書

目次

1. CADLIVE	1
2. 動作環境	2
3. インストール方法	3
3-1 CADLIVE のインストール	3
4. 起動方法	4
4-1 CADLIVE の起動	4
4-2 新規ネットワーク作成	5
4-3 既存ネットワークのロード	8
5. Network Constructor	9
5-1 Network Constructor 上の各オブジェクトの説明	9
5-1-1 パネル	9
5-1-2 Modifier パレット	9
5-1-3 Reaction パレット	9
5-1-4 Virtual Reaction パレット	9
5-1-5 Species パレット	9
5-1-6 Gene パレット	10
5-1-7 WhiteBox パレット	10
5-1-8 BlackBox パレット	10
5-1-9 Compartment 表示ボックス	10
5-1-10 Equation 表示ボックス	10
5-1-11 Synchronize ボタン	10
5-1-12 Edit Compartment ボタン	10
5-1-13 Expand ボタン	11
5-1-14 Zoom Out ボタン	11
5-1-15 Zoom In ボタン	12
5-1-16 Zoom 倍率表示ボックス	12
5-2 Symbol の配置	13
5-2-1 Species の配置	13
5-2-2 Reaction の配置	14
5-2-3 Modifier の配置	15
5-2-4 Gene の配置	16
5-2-5 WhiteBox の配置	16
5-2-6 BlackBox の配置	17
5-2-7 VirtualReaction の配置	17
5-2-8 Option の配置	17
5-2-9 Domain の配置	20
5-2-10 InnerLink の配置	20
5-2-11 ExchangeComplexReaction の配置	21
5-2-12 ExchangeModifiedReaction の配置	22

5-3	Symbol の移動.....	23
5-3-1	Species の移動.....	23
5-3-2	Reaction の移動.....	23
5-3-3	Modifier の移動.....	23
5-3-4	Gene の移動.....	23
5-3-5	WhiteBox の移動.....	23
5-3-6	BlackBox の移動.....	23
5-3-7	VirtualReaction の移動.....	23
5-3-8	Domain の移動.....	23
5-3-9	InnnerLink の移動.....	23
5-3-10	ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction の移動.....	24
5-3-11	Symbol の折り曲げ.....	24
5-3-12	複数 Symbol の同時移動.....	24
5-3-13	方向キーによる Symbol 移動.....	24
5-4	Symbol の削除.....	25
5-4-1	Species の削除.....	25
5-4-2	Reaction の削除.....	25
5-4-3	Modifier の削除.....	25
5-4-4	Gene の削除.....	25
5-4-5	WhiteBox の削除.....	25
5-4-6	BlackBox の削除.....	26
5-4-7	VirtualReaction の削除.....	26
5-4-8	Domain の削除.....	26
5-4-9	InnerLink の削除.....	26
5-4-10	ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction の削除.....	27
5-5	Symbol の結合.....	27
5-5-1	Reaction、Modifier、VirtualReaction と Species の結合.....	27
5-5-2	Gene と Species の結合.....	28
5-5-3	Modifier と Reaction の結合.....	28
5-5-4	VirtualReaction と VirtualNode、Domain の結合.....	28
5-5-5	InnerLink と Species、VirtualNode との結合.....	28
6.	Data Editor.....	29
6-1	DataEditor 上のオブジェクトの説明.....	29
6-1-1	Species スプレッドシート.....	29
6-1-2	Reaction スプレッドシート.....	29
6-1-3	Save ボタン.....	29
6-2	Species 項目の説明.....	30
6-3	Reaction 項目の説明.....	32
7.	Framework Editor.....	34
7-1	Framework Editor 上のオブジェクトの説明.....	34
7-1-1	Domain スプレッドシート.....	34
7-1-2	Species スプレッドシート.....	35
7-1-3	VirtualNode スプレッドシート.....	36
7-1-4	VirtualReaction スプレッドシート.....	36
7-2	Domain 項目の説明.....	37
7-3	Species 項目の説明.....	37
7-4	VirtualNode 項目の説明.....	37
7-5	VirtualReaction 項目の説明.....	38

8. WhiteBoxTreeWindow.....	39
8-1 WhiteBoxTreeWindow 画面.....	39
8-2 WhiteBoxTreeWindow の操作説明.....	40
8-2-1 WhiteBox の展開.....	40
8-2-2 WhiteBox の格納.....	40
8-2-3 WhiteBox の名称編集.....	41
8-2-4 WhiteBox の削除.....	42
9. PathwayViewer.....	43
9-1 PathwayViewer の起動方法.....	43
9-1-1 CADLIVE 上での起動.....	43
9-1-2 PathwayViewer の単体での起動.....	43
9-2 PathwayViewer 上のオブジェクトの説明.....	44
9-2-1 Model.....	44
9-2-3 Select ボタン.....	45
9-2-4 Start コンボボックス.....	45
9-2-5 End コンボボックス.....	45
9-2-6 MaximumLength コンボボックス.....	45
9-2-7 Include Loop ラジオボタン.....	45
9-2-8 Pathway Only ラジオボタン.....	45
9-2-9 Search ボタン.....	45
9-2-10 ROOT パネル.....	45
9-2-11 Pathway スプレッドシート.....	45
9-2-12 Tree パネル.....	46
9-2-13 Export ボタン.....	46
9-2-14 Zoom Out ボタン.....	46
9-2-15 Zoom In ボタン.....	46
9-2-16 Zoom 倍率表示ボックス.....	46
9-2-17 BrowseNC ボタン.....	46
9-2-18 Close ボタン.....	47
9-3 無視する分子設定画面オブジェクト説明.....	47
9-3-1 スプレッドシート.....	48
9-3-2 OK ボタン.....	48
9-3-3 Cancel ボタン.....	48
10. KnockOutViewer.....	49
10-1 KnockOutViewer の起動方法.....	49
10-1-1 CADLIVE 上での起動.....	49
10-1-2 KnockOutViewer の単体での起動.....	49
10-2 KnockOutViewer 上のオブジェクトの説明.....	50
10-2-1 Model.....	50
10-2-2 Select ボタン.....	50
10-2-3 Select KnockOut Gene スプレッドシート.....	50
10-2-4 ListOfDeletedSpecies スプレッドシート.....	51
10-2-5 ListOfDeletedReactions スプレッドシート.....	51
10-2-6 KnockOut ボタン.....	51
10-2-7 BrowseNC ボタン.....	51
10-2-8 PathwayViewer ボタン.....	52
10-2-9 Export ボタン.....	52
10-2-10 Close ボタン.....	52

11. Menu 項目の説明	53
11-1 File メニュー	53
11-1-1 New	53
11-1-2 Open	53
11-1-3 Save	53
11-1-4 SaveAs	54
11-1-5 Rename	55
11-1-6 Delete	56
11-1-7 Import	56
11-1-8 Export	57
11-1-9 Print	57
11-1-10 Search	58
11-1-11 Exit	59
11-2 Edit メニュー	60
11-2-1 EditCompartment	60
11-3 Window メニュー	61
11-3-1 DataEditor	61
11-3-2 NetworkConstructor	61
10-3-3 WhiteBoxTreeWindow	61
11-3-4 FrameworkEditor	61
11-3-5 PathwayViewer	61
11-3-6 KnockOutViewer	61
11-4 View メニュー	62
11-4-1 Standard	62
11-4-2 Domain	62
11-4-3 Normal	62
11-4-4 Simple	62
11-4-5 Normal	63
11-4-6 AntiAlias	63
11-5 Config メニュー	64
11-5-1 SmallMolecule	64
11-5-2 SymbolColor	65
11-6 Help メニュー	66
11-6-1 About CADLIVE	66

1. CADLIVE

CADLIVEとは、生命ネットワーク（代謝、遺伝子発現ネットワーク）解明のために、GUIを用いてネットワークを構築し、シミュレータと連携可能な形式でデータベースに保存することができるシステムです。複雑な分子間相互作用をもつ生命ネットワークを化学反応式によって記述することができます。

2. 動作環境

ハードウェア構成

CPU : Pentium3 1GHz 以上推奨
Memory : 256MB 以上推奨
HDD : 1Gb 以上推奨

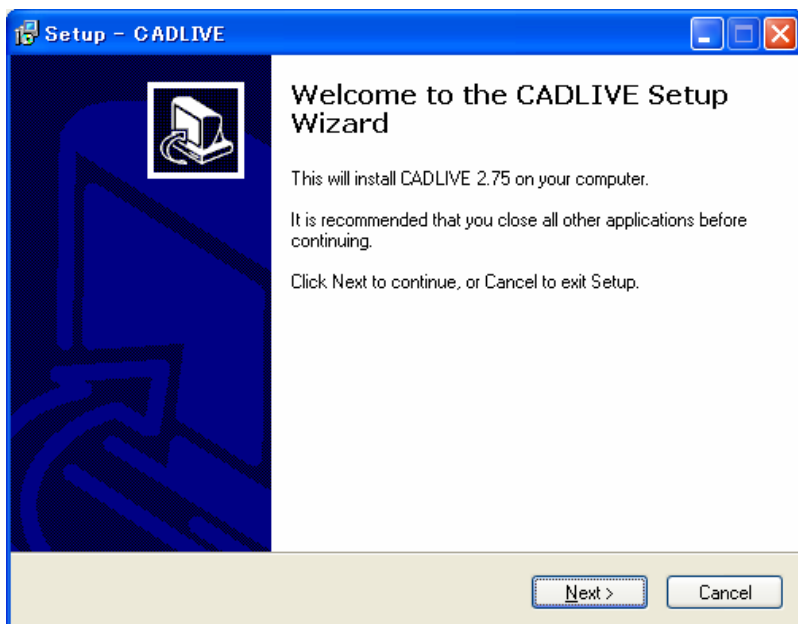
ソフトウェア構成

Windows 98、NT4.0、2000、XP
Java™ 2 Runtime Environment 1.3

3. インストール方法

3-1 CADLIVE のインストール

CD-ROM 上にある `setup.exe` をダブルクリックしてください。
インストーラーの指示に従って任意のディレクトリにインストールして下さい。
(NEXT ボタンと Install ボタンを押すだけで C ドライブの直下にインストールできます)
このとき、Java™ 2 Runtime Environment も同時にインストールされます。

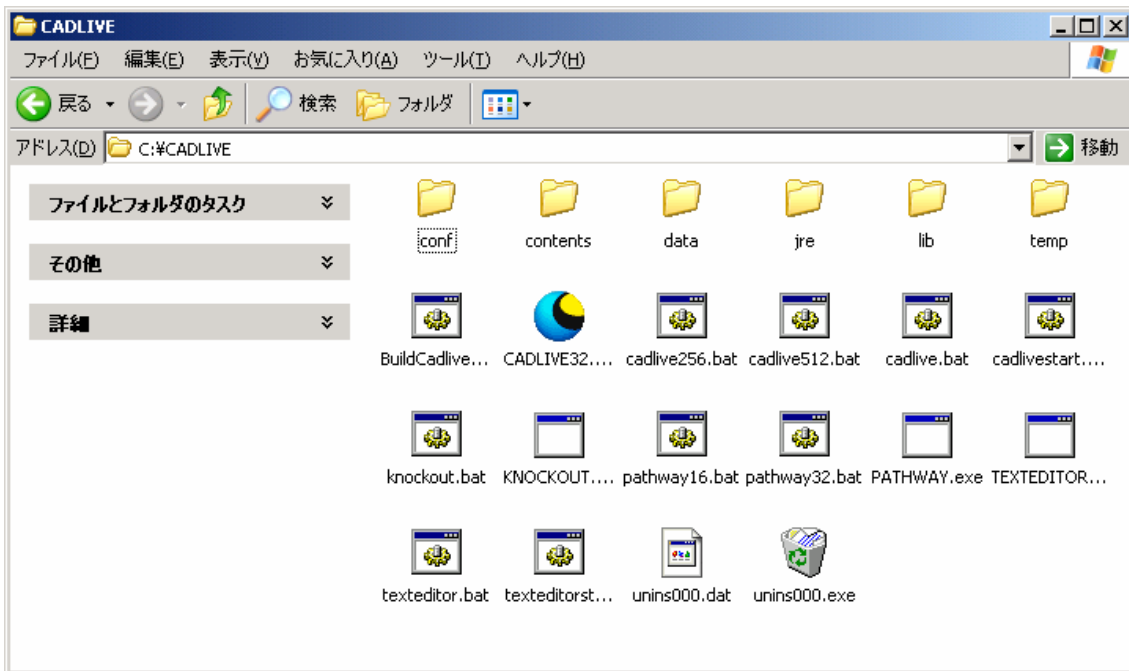


CADLIVE のアンインストールを行う時は、インストールされたディレクトリ上の `unins000.exe` をダブルクリックしてください。
アンインストール時には、インストール時に存在したファイルは全て削除されます。アンインストールを実行するとネットワークデータも全て削除されてしまいますので、ネットワークデータが必要な場合には、必ずバックアップを別のディレクトリに保存した上でアンインストールを実行してください。

4. 起動方法

4-1 CADLIVE の起動

Java™ 2 Runtime Environment (1.3) がインストールされていることを確認して下さい。
プログラムメニューの CADLIVE を選択するか、CADLIVE をインストールしたディレクトリ上 (C:¥CADLIVE) にある"CADLIVE32.exe"をダブルクリックして下さい。

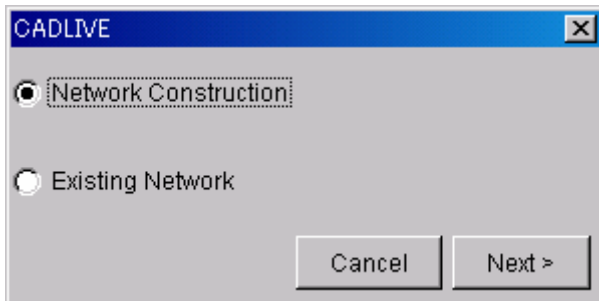


起動画面



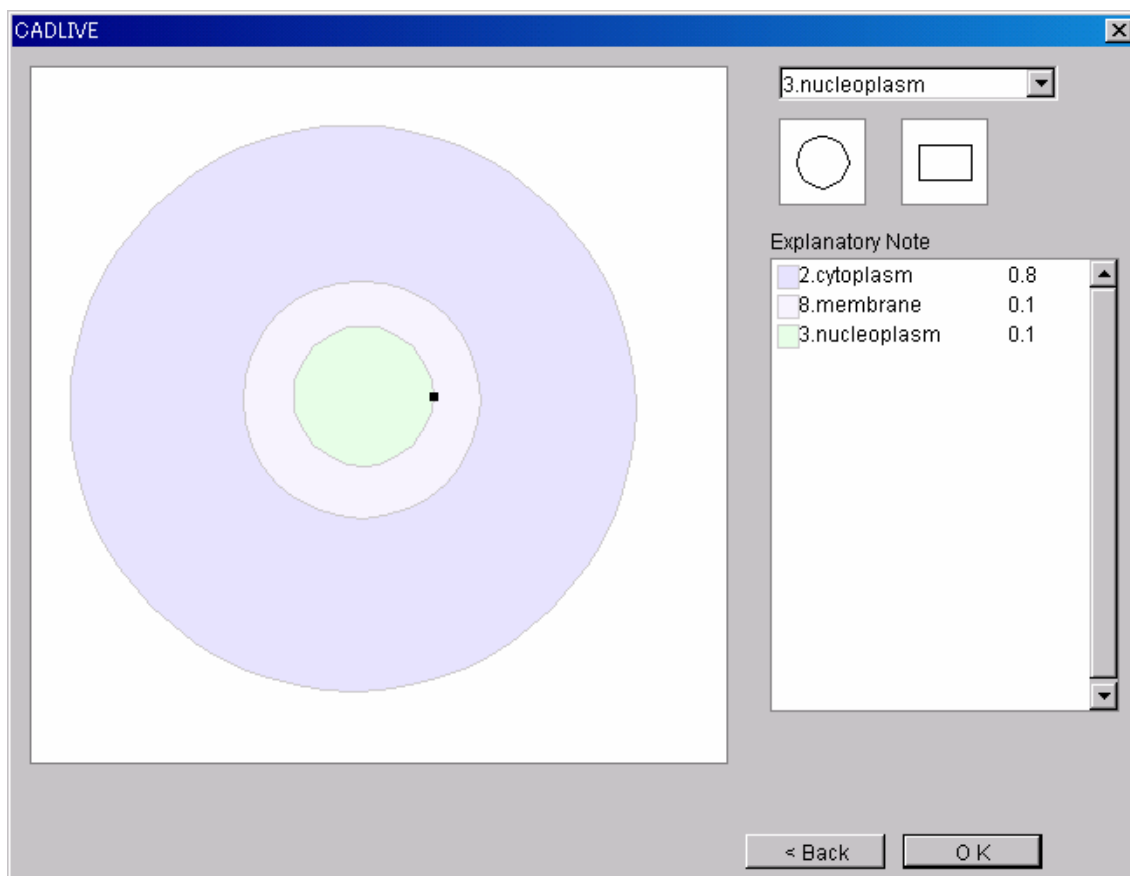
4-2 新規ネットワーク作成

- OpeningDialog



新規にネットワークを作成する場合は Network Construction を選択し、
[Next>] ボタンをクリックして下さい。

・ダイアログによる Compartment の配置



セレクトボックスから配置する Compartment を選択して下さい。

*配置できる Compartment の種類は Environment、Cytoplasm、Nucleoplasm、ER、Mitochondria、Golgi、Chloroplast、Membrane、Others の 9 種類です。

*Others を選択したばあい、任意に名前を編集することが可能です。

形状（円もしくは長方形）を選択して下さい。

パネルをクリックすると指定の Compartment、指定の形状でオブジェクトが配置されます。

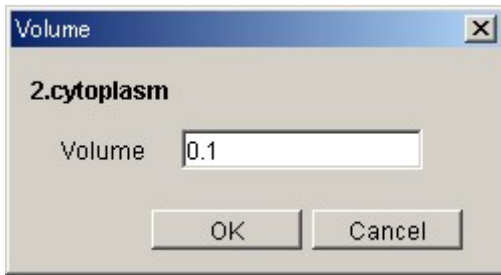
*オブジェクトをドラッグすることによりオブジェクトを配置する場所の移動が可能です。

*オブジェクト上のトルグボタンをドラッグすることによりオブジェクトの大きさの変更が可能です。

*オブジェクトが重なっているときは後から配置されたオブジェクトが優先となり、先に配置したオブジェクトの重なり部分は無効となります。

*オブジェクトを右クリックし Delete を選択することでオブジェクトを消去できます。

・ VolumeDialog



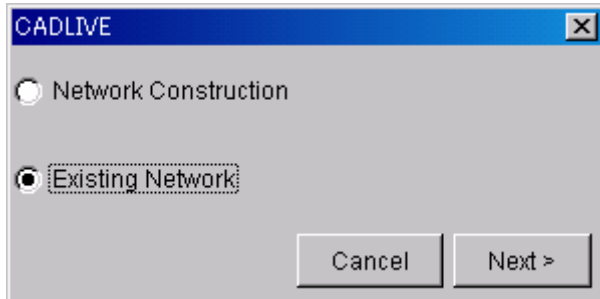
Compartment の Volume を定義する場合は、指定する Compartment を選択し、右クリックメニューから Volume をクリックしてください。
図のダイアログ中の Volume 欄に数値を入力し、[OK]ボタンをクリックして下さい。

*同一の名称の Compartment については一度 Volume を設定するとすべての Compartment の Volume が変更されます。

全ての Compartment を配置し終わったら [OK] ボタンをクリックして下さい。

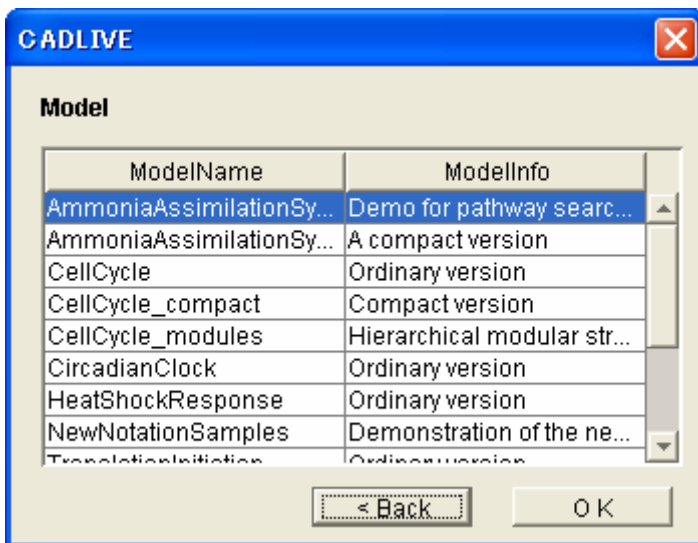
4-3 既存ネットワークのロード

• OpeningDialog



既存のネットワークを開く場合は Existing Network を選択し、[Next>] ボタンをクリックして下さい。

• OpenNetWorkDialog

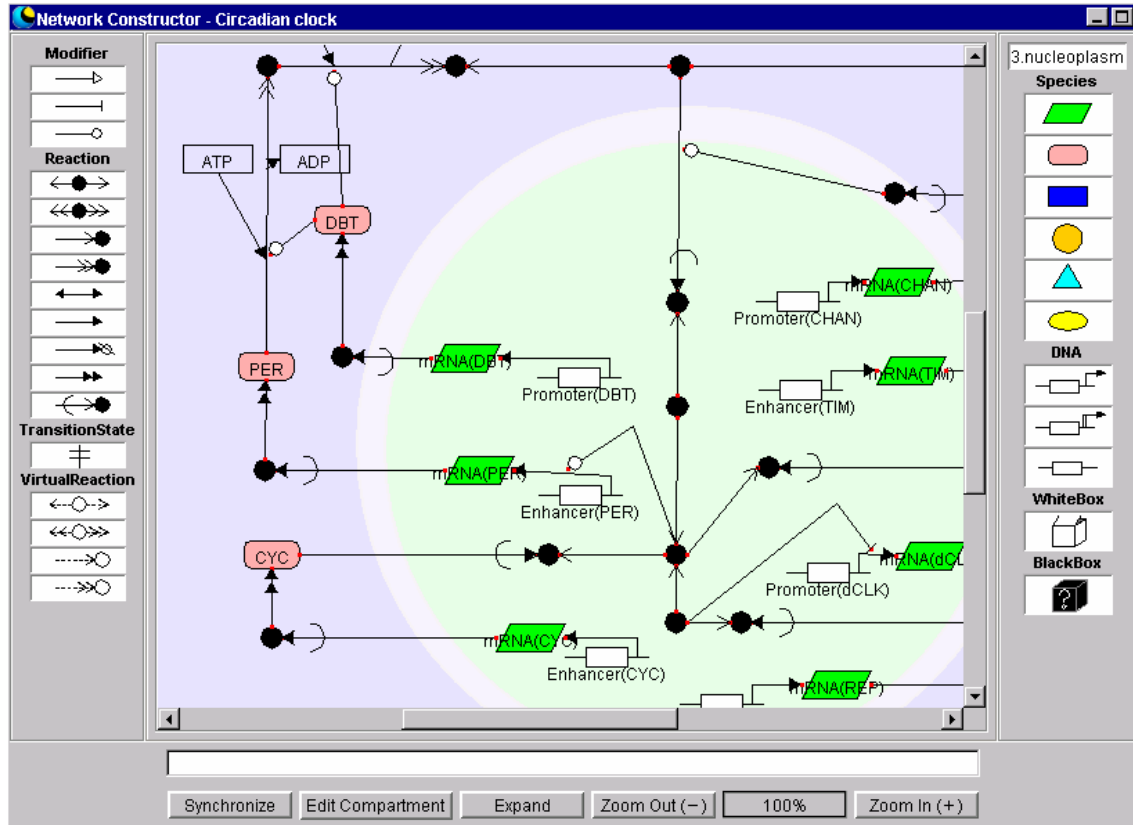


ModelName と ModelInfo が一覧表示されます。
ロードするネットワークの ModelName を選択し、[OK] ボタンをクリックして
下さい。

*TextEditor で作成・編集されたデータをロードすることはできません。

5. Network Constructor

5-1 Network Constructor 上の各オブジェクトの説明



5-1-1 パネル

Symbol を配置し描画するためのフィールドです。Compartment ダイアログで選択した Compartment が配置されています。

5-1-2 Modifier パレット

activator、inhibitor、enzyme を配置するためのパレットです。

5-1-3 Reaction パレット

binding、binding_with_stoichiometric_changes、homo_association_or_modification、homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes、reversible_conversion、irreversible_conversion、degradation、translation、transport、transitionState を配置するためのパレットです。

5-1-4 Virtual Reaction パレット

virtual_binding、virtual_binding_with_stoichiometric_changes、virtual_homo_association_or_modification、virtual_homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes を配置するためのパレットです。

5-1-5 Species パレット

RNA、protein、metabolite、environmental_factor、ion_signal、others を配置する

ためのパレットです。

5-1-6 Gene パレット

transcription、protein_synthesis、other_gene (enhancer、promoter、other) を配置するためのパレットです。

5-1-7 WhiteBox パレット

WhiteBox を配置するためのパレットです。

5-1-8 BlackBox パレット

BlackBox を配置するためのパレットです。

5-1-9 Compartment 表示ボックス

パネル上のマウスが存在するポイントの Compartment を表示します。

5-1-10 Equation 表示ボックス

パネル上で選択されている Reaction の ModifierReactionEquation を表示します。

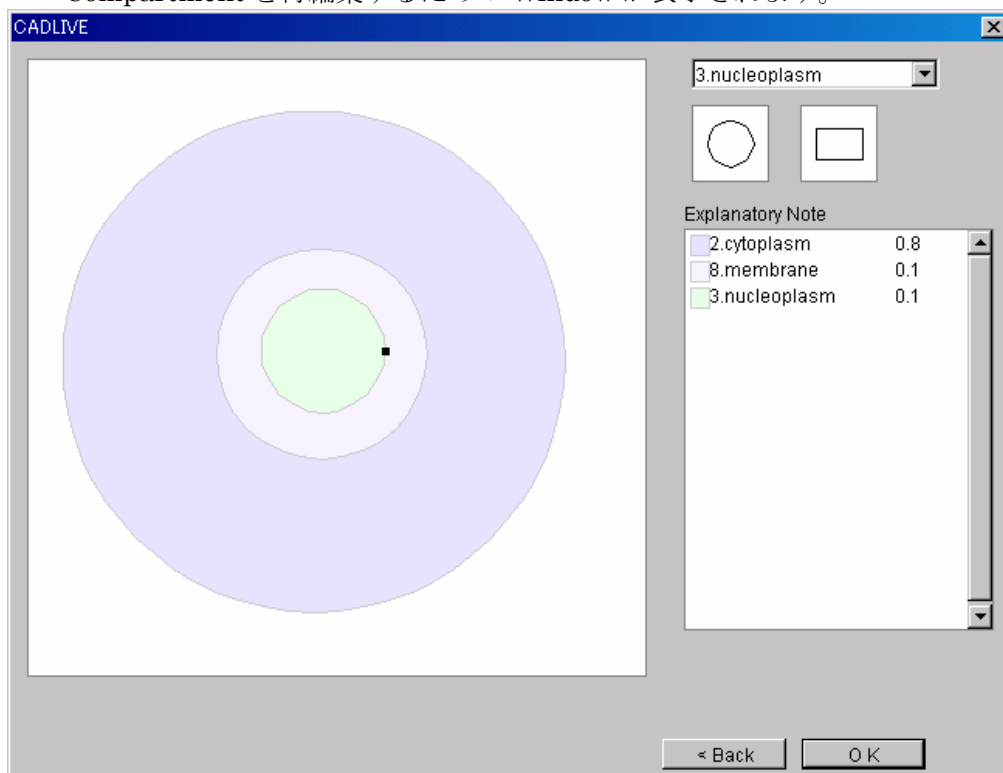
※Reaction に Modifier が接続している場合には、Modifier をクリックすることで ModifierReactionEquation を表示します。

5-1-11 Synchronize ボタン

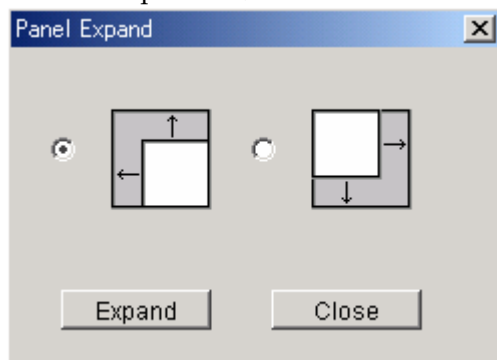
Network Constructor 上の情報を他の Window に同期させます。

5-1-12 Edit Compartment ボタン

Compartment を再編集するための Window が表示されます。

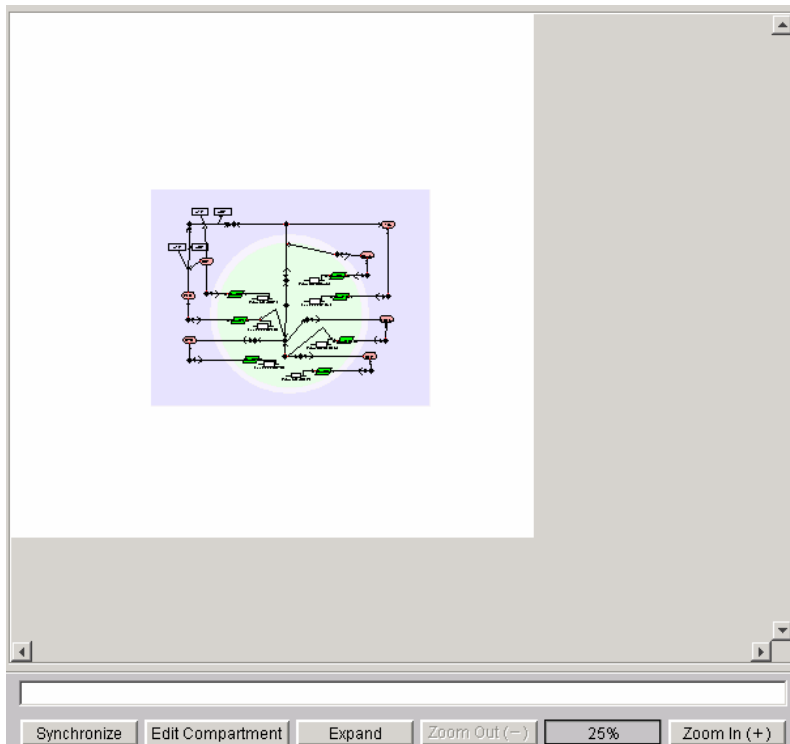


5-1-13 Expand ボタン



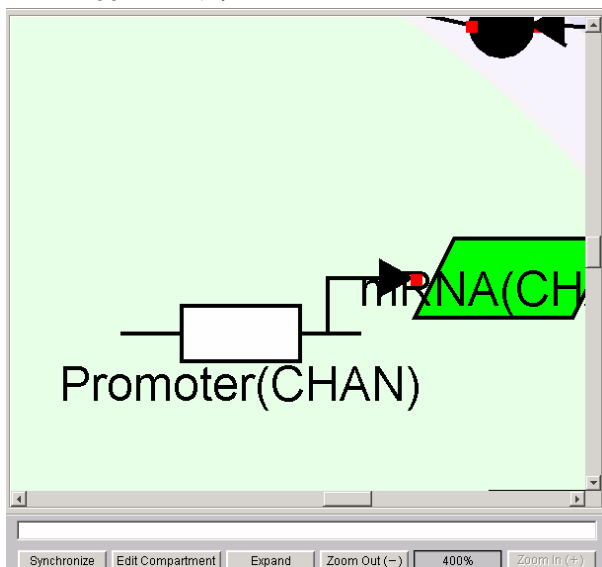
Panel の描画領域を左上方向、または右下方向に拡大します。
拡大された領域は **environment** となります。

5-1-14 Zoom Out ボタン



Panel の表示部分を縮小します。(各 Symbol は小さく表示されます)
最小で **25%**まで縮小できます。

5-1-15 Zoom In ボタン



Panel の表示部分を拡大します。(各 Symbol は大きく表示されます)
最大で 400%まで拡大できます。

5-1-16 Zoom 倍率表示ボックス 現在の倍率を表示します。







5-2 Symbol の配置

5-2-1 Species の配置

Species は生体分子を表現し、生命ネットワークのノードとなる要素です。

• Species の配置

Species パレット上の配置する Species をクリックし、選択状態として下さい。
パネル上の配置したい場所で再度クリックすると Species がパネル上に配置されます。
Species を配置したタイミングで Data Editor の Species スプレッドシートに配置した Species 情報が表示されます。

Species		
	RNA	リボ核酸を表現します
	protein	タンパク質を表現します
	metabolite	代謝物質を表現します
	environmental_factor	環境因子を表現します
	ion_signal	イオンシグナルを表現します
	others	上記以外の物質を表現します

DNA デオキシリボ核酸を表現します

*Gene ([5-2-4 参照](#)) を用いて配置してください

complex 複合体を表現します

*complex は binding、homo_association_or_modification ([5-2-2 参照](#))
を用いて配置して下さい。

Modified 付加を受けた物質を表現します

*modified は binding_with_stoichiometric_changes、
homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes
([5-2-2 参照](#)) を用いて配置して下さい。

text_option 細胞内小分子を表現します

* text_option は Reaction の Option ([5-2-8 参照](#)) を用いて配置して下さい。

small_molecule_option 細胞内小分子を表現します

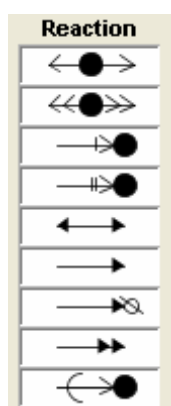
* small_molecule_option は Reaction の Option ([5-2-8 参照](#)) を用いて配置して
下さい。

5-2-2 Reaction の配置

Reaction は反応や複合体の形成など反応を表現し、生命ネットワークのラインとなる要素です。

• Reaction の配置

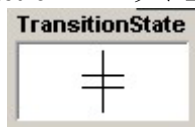
Reaction パレット上の配置する Reaction をクリックし、選択状態として下さい。パネル上の配置したい場所で再度クリックすると Reaction がパネル上に配置されます。Reaction を配置し、式が成立する Species を接続したタイミングで DataEditor の Reaction スプレッドシートに配置した Reaction 情報が表示されます。



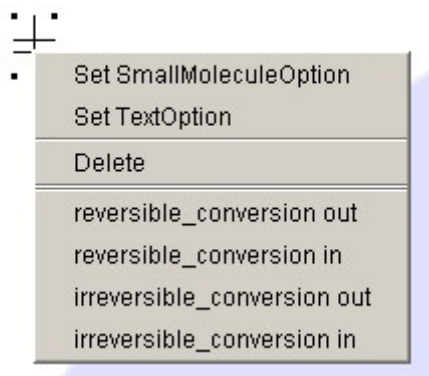
binding	複合体を形成する反応を表現します
binding_with_stoichiometric_changes	化学結合を伴う複合体を形成する反応を表現します
homo_association_or_modification	同一分子の重合を表現します
homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes	小分子の付加反応を表現します
reversible_conversion	可逆反応を表現します
irreversible_conversion	不可逆反応を表現します
degradation	分解反応を表現します
translation	翻訳反応を表現します
transport	輸送反応を表現します
*transport を用いると自動的に ReactantReaction と同じ Species が移動先の Compartment に登録されます。	
elimination	重合からの脱離反応を表現します
elimination_with_stoichiometric_changes	付加からの脱離反応を表現します
*elimination、elimination_with_stoichiometric_changes は Option (5-2-8 参照) を用いて配置してください	
reversible_conversion_regarding_multicomponent	複数要素からなる可逆反応を表現します
irreversible_conversion_regarding_multicomponent	複数要素からなる不可逆反応を表現します
*reversible_conversion_regarding_multicomponent	、
irreversible_conversion_regarding_multicomponent	は
TransitionState を用いて配置して下さい。	
*unknownReaction は BlackBox を用いて配置して下さい。	

binding、binding_with_stoichiometric_changes で 3 つ以上の複合体を作成するには、右クリックメニューから Set Binding を選択します。

Reaction パレット上の TransitionState をクリックし、選択状態として下さい。



パネル上の配置したい場所で再度クリックすると TransitionState がパネル上に配置されます。



TransitionState を右クリックすると Set SmallMoleculeOption、Set TextOption、Delete、reversible_conversion out、reversible_conversion in、Irreversible_conversion out、irreversible_conversion in の項目が表示されますので、reversible_conversion_regarding_multicomponent を作成するときは reversible_conversion out、reversible_conversion in を用いて、irreversible_conversion_regarding_multicomponent を作成するときは irreversible_conversion out、irreversible_conversion in を用いてください。

transcription
protein_synthesis

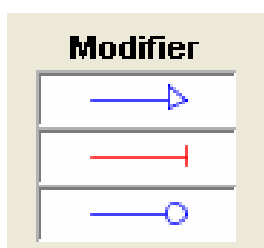
*transcription、protein_synthesis は Gene ([5-2-4 参照](#)) を用いて配置して下さい。

5-2-3 Modifier の配置

Modifier は Reaction を活性化、抑制化する反応、および酵素反応です。また、Species に対してや別の Modifier を活性化、抑制化を表現することもできます。

• Modifier の配置

Modifier パレット上の配置する Modifier をクリックし、選択状態として下さい。パネル上の配置したい場所で再度クリックすると Modifier がパネル上に配置されます。



activation	活性化を表現します
inhibition	抑制化を表現します
enzyme	酵素反応を表現します

*enzyme は protein、complex、modified にのみ接続することができます。

*unknownModifier は BlackBox を用いて配置して下さい。

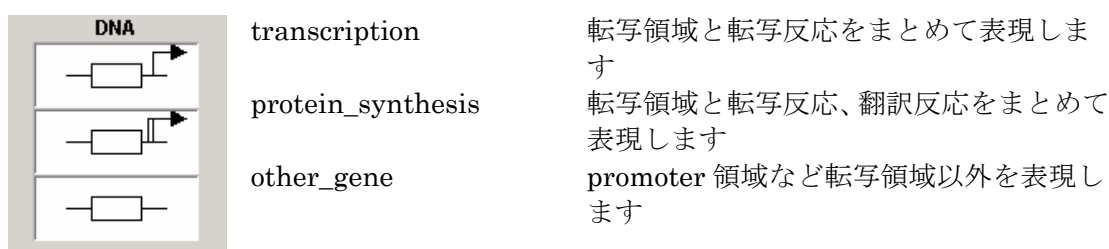
5-2-4 Gene の配置

Gene は DNA としての Species 要素と転写 (transcription)、タンパク質合成 (protein_synthesis) としての Reaction 要素をあわせた機能を持ちます。

・ Gene の配置

Gene パレット上の配置する Gene をクリックし、選択状態として下さい。

パネル上の配置したい場所で再度クリックすると Gene がパネル上に配置されます。



*transcription は RNA のみに接続します。

*protein_synthesis は protein のみに接続します。protein_synthesis を用いた場合自動的に RNA が Species として登録され、transcription、translation が Reaction として登録されます。

5-2-5 WhiteBox の配置

WhiteBox は、詳細が既知 (あるいは推定) のネットワークをまとめて表現します。パネル上にある複数のシンボルを WhiteBox として 1 つのシンボルにまとめることができます。WhiteBox を作成することで既存のネットワークの反応式には影響はありません。



・ WhiteBox の配置

パネル上にあるシンボルで、WhiteBox に格納するシンボルをクリックし選択状態にします。シンボルを複数選択する時は、Ctrl キーを押しながらシンボルをクリックして下さい。格納するシンボルを選択した状態で WhiteBox パレットの WhiteBox をクリックすると WhiteBox がパネル上に配置されます。配置後の展開・格納操作は WhiteBoxTreeWindow で行います (8章参照)。

*WhiteBox 自体を別の WhiteBox に格納することも可能です。

*WhiteBox に格納されたシンボルを別の WhiteBox に格納することはできません。

*WhiteBox に格納されたシンボルを削除するには、WhiteBox を削除する必要があります。

*Degradation の Reactant となるシンボルを Whitebox に格納すると、その Degradation の Reaction も WhiteBox に格納されます。

*Domain 分割された Species を Whitebox に格納すると、分割された Domain はすべて Whitebox に格納されます。

5-2-6 BlackBox の配置

BlackBox は、詳細が未知のネットワークを表現します。ネットワークの詳細が未知のものをまとめて BlackBox シンボルとして配置することができます。



• BlackBox の配置

BlackBox パレット上の配置する BlackBox をクリックし、選択状態として下さい。パネル上の配置したい場所で再度クリックすると BlackBox がパネル上に配置されます。



• unknownReaction の配置

パネル上の BlackBox の上で右クリックし、Reaction in または Reaction out を選択するとパネル上に配置されます。

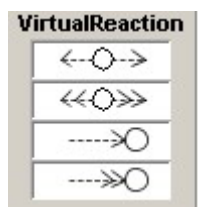
• unknownModifier の配置

パネル上の BlackBox の上で右クリックし、Modifier in または Modifier out を選択するとパネル上に配置されます。

* BlackBox はデータエディタ上では単一の Species と同様に扱われます。

5-2-7 VirtualReaction の配置

VirtualReaction は実際には存在しない反応で、反応部位や順序の特定を行うための要素です。常に VirtualNode と接続した状態で存在します。



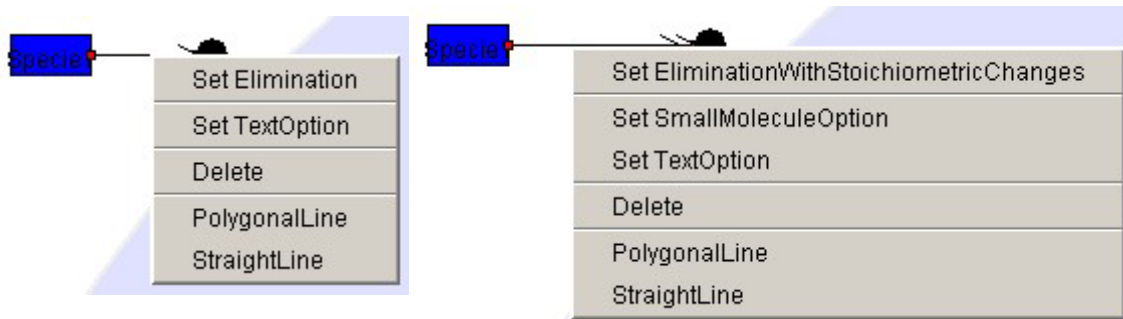
• VirtualReaction の配置

VirtualReaction パレット上の配置する VirtualReaction をクリックし、選択状態として下さい。パネル上の配置したい場所で再度クリックすると VirtualReaction がパネル上に配置されます。VirtualReaction を配置し、式が成立する Species、VirtualNode もしくは Domain を接続したタイミングで FrameworkEditor の VirtualReaction スプレッドシートに配置した VirtualReaction 情報が表示されます。

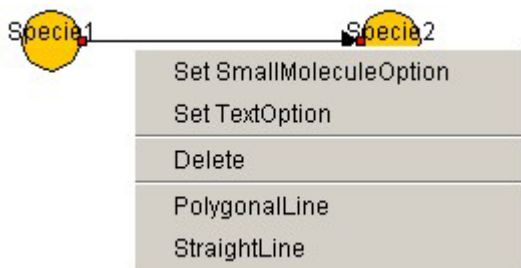
5-2-8 Option の配置

• elimination、elimination_with_stoichiometric_changes、virtual_elimination、virtual_elimination_with_stoichiometric_changes の配置

homo_association_or_modification、homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes、virtual_homo_association_or_modification、virtual_homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes を右クリックし、SetElimination または SetEliminationWithStoichiometricChanges を選択してください。

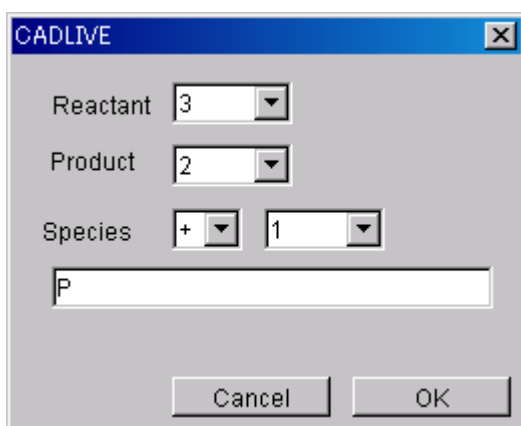


- Text Option の配置
- Text Option の配置



Text Option 配置可能な Reaction、VirtualReaction (binding, binding_with_stoichiometric_changes, homo_association_or_modification, homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes, elimination, elimination_with_stoichiometric_changes, reversible_conversion,

irreversible_conversion_reversible_conversion_regarding_multi_component, irreversible_conversion_regarding_multi_component, virtual_homo_association_or_modification, virtual_homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes, virtual_elimination, virtual_elimination_with_stoichiometric_changes) を右クリックし、SetTextOption を選択して下さい。



TextOptionDialog に従って Option 情報を入力して下さい。

*Reactant は TextOption を付加する Reaction の Reactant 側の Species の数を入力します。(2 から 10 までの数字と Poly、Hyper、Hypo が選択できます。)

*Product は TextOption を付加する Reaction の Product 側の Species の数を入力

します。

(2 から 10 までの数字と Poly、Hyper、Hypo が選択できます。)

*Species は TextOption で付加する Species 情報を入力します。

”+”の時は Reactant に、”-”の時は Product に登録されます。ただし、

homo_association_or_modification、

homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes、

virtual_homo_association_or_modification、

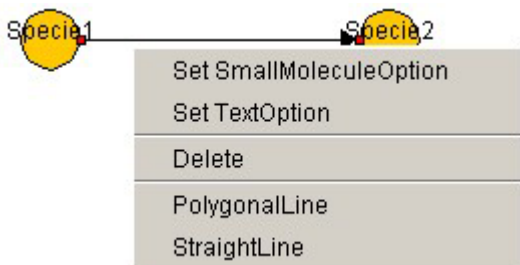
homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes では常に”+”となり、

elimination, elimination_with_stoichiometric_changes, virtual_elimination、

virtual_elimination_with_stoichiometric_changes では常に”-”となります。

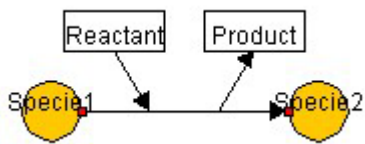
TextOptionSpecies の数は 2 から 10 までの数字と Poly、Hyper、Hypo が選択できます。下の段で入力した名称が SpeciesName、NodeName として登録されます。

- Small Molecule Option の配置

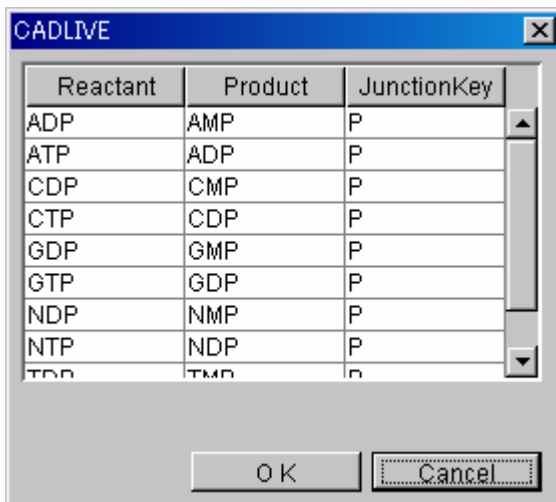


Small Molecule Option 配置可能な Reaction を右クリックし、SetSmallMoleculeOption を選択して下さい。

reversible_conversion、irreversible_conversion、transtion_state、
 reversible_conversion_regarding_multi_component、
 irreversible_conversion_regarding_multi_component
 に Option を付加する場合は反応前後の名称を自由に編集することができます。初期値
 は Reactant と Product となります。



homo_association_or_modification_with_stoichio
 metric_changes、
 virtual_homo_association_or_modification_with_s
 toichiometric_changes、
 elimination_with_stoichiometric_changes、
 virtual_elimination_with_stoichiometric_changes、に
 SmallMoleculeOption をセットする場合は、ダイアログから Reactant と Product
 を選択します。

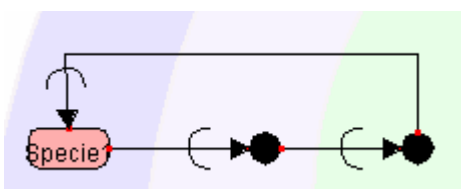


JunctionKey の部分が Modified に付加さ
 れる物質となります。VirtualReaction で
 は無視されます。

• Option Transport の配置



Transport を右クリックし Set Option
 Transport を選択することで、逆向きの
 transport を描画することができます。



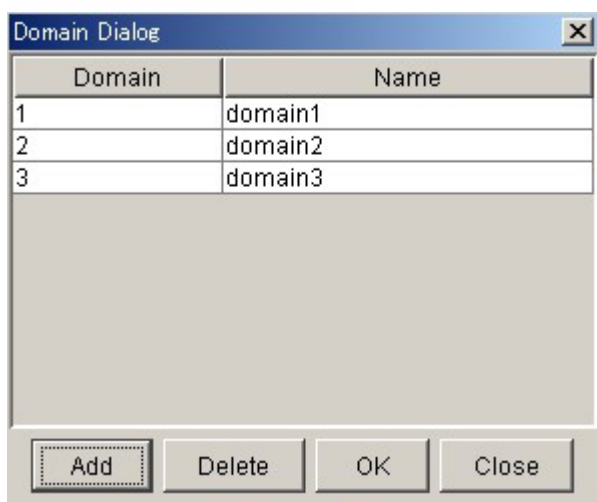
Option_transport は transport の Reactant のほ
 か、関連する Species にも接続することができ、
 複雑な Compartment 移動を描画することが可能
 です。

5-2-9 Domain の配置

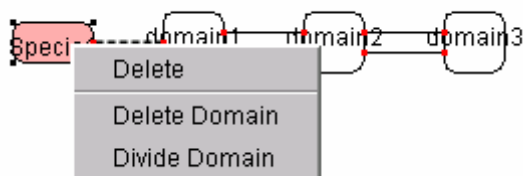
Domain は RNA または Protein の結合部位や機能部位を示します。分割した各部位に名称をつけたり、VirtualReaction を結合させることができます。



分割する RNA または Protein の右クリックメニューから Divide Domain を選択し、Domain Dialog を表示させます。



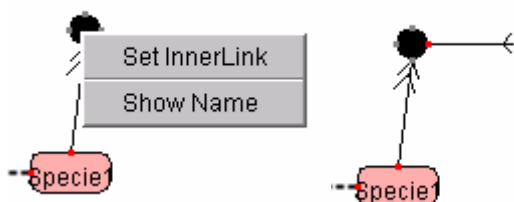
Add ボタンを押し、分割する Domain を追加します。必要に応じ、Domain の名称を指定し OK ボタンを押すことで Domain が NetworkConstructor 上に表示されます。作成した Domain を部分的に削除する場合は、削除する Domain を選択して Delete ボタンを押します。



作成した Domain の編集を行う場合は再度、Divide Domain を選択してください。DomainDialog が開き編集可能となります。

5-2-10 InnerLink の配置

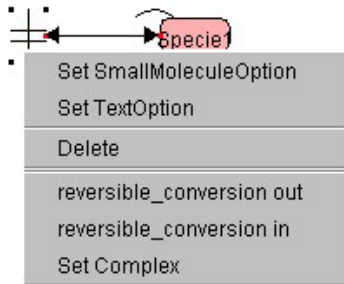
InnnerLink は Species と仮想ノードを接続し、Species がどの仮想ノードから構成されているかを明確にします。



Link 元の complex または modified の右クリックメニューから Set InnerLink を選択することで、InnerLink が NetworkConstructor 上に表示されます。

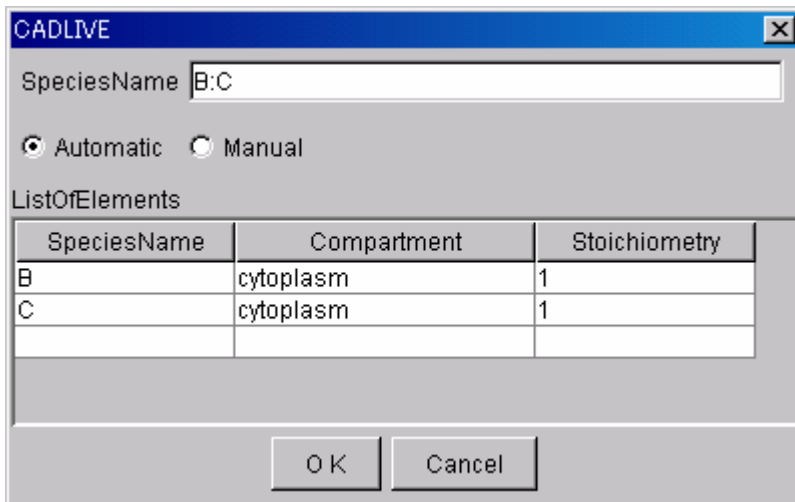
5-2-1.1 ExchangeComplexReaction の配置

ExchangeComplexReaction は交換反応（可逆反応）を示します。



TransitionState から reversible_conversion_in を出して Species に接続させると、右クリックメニューに「Set Complex」が表示されます。「Set Complex」を選択すると、ListOfElements 設定ダイアログが表示されます。

・ ListOfElements 設定ダイアログ



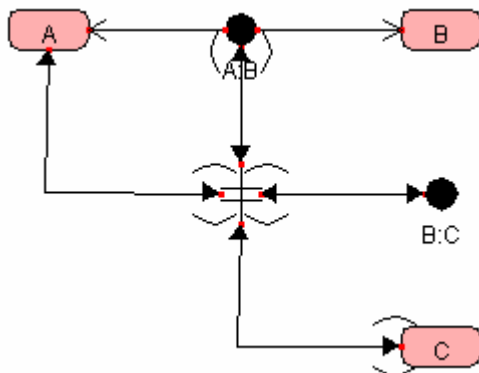
ExchangeComplex の ListOfElements を設定する画面です。

SpeciesName は Automatic に設定した場合は、ListOfElements を “:” でつないで表示します。Manual に設定した場合、SpeciesName を入力、編集することができます。

スプレッドシートのコンボボックスを編集し、ListOfElements を設定します。

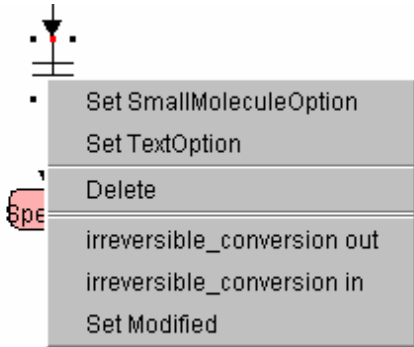
ListOfElements の候補となる Species は、TransitionState の Reactants(Reactants が Complex/Modified だった場合は、その Complex/Modified の ListOfElements も含む)となります。

OK ボタンを押下すると、ExchangeComplexReaction シンボルが NetworkConstructor 上に表示されます。



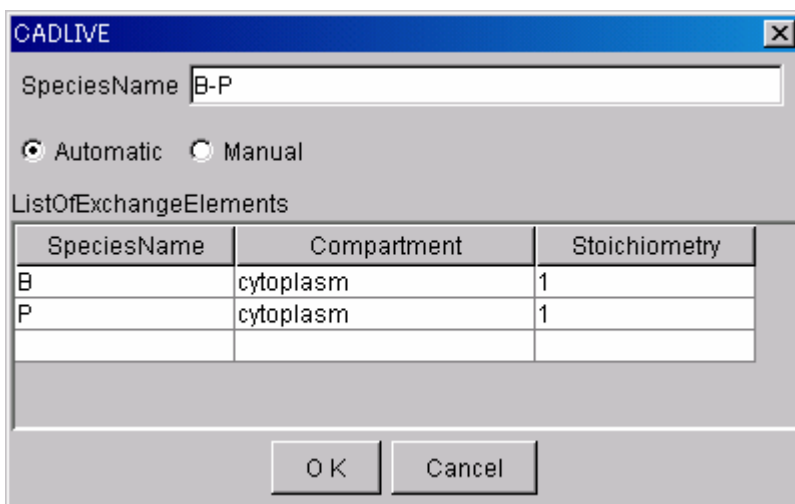
5-2-1-2 ExchangeModifiedReaction の配置

ExchangeModifiedReaction は交換反応（不可逆反応）を示します。



TransitionState から irreversible_conversion_in を出して Species に接続させると、右クリックメニューに「Set Modified」が表示されます。「Set Modified」を選択すると、ListOfElements 設定ダイアログが表示されます。

• ListOfElements 設定ダイアログ



ExchangeModified の ListOfElements を設定する画面です。

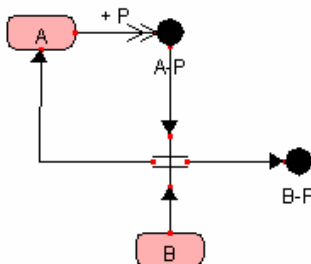
SpeciesName は Automatic に設定した場合は、ListOfElements を“-”でつないで表示します。Manual に設定した場合、SpeciesName を入力、編集することができます。

スプレッドシートのコン

ボボックスを編集し、ListOfElements を設定します。

ListOfElements の候補となる Species は、TransitionState の Reactants(Reactants が Complex/Modified だった場合は、その Complex/Modified の ListOfElements も含む)となります。

OK ボタンを押下すると、ExchangeModifiedReaction シンボルが NetworkConstructor 上に表示されます。



5-3 Symbol の移動

5-3-1 Species の移動

Species の Symbol の表示部分をドラッグすることで Species を移動することができます。

但し、TextOption と SmallMoleculeOption は単独での移動はできず、付加された Reaction の移動に伴って移動します。

5-3-2 Reaction の移動

Reaction の片方の端点をドラッグすることにより、もう片方の端点を軸として回転、伸縮させることができます。但し TransitionState の移動は Species に準じるものとなります。Species に接続している Reaction は、接続先 Species の移動に伴って移動します。

5-3-3 Modifier の移動

Modifier の片方の端点をドラッグすることにより、もう片方の端点を軸として回転、伸縮させることができます。Species、Reaction、Modifier に接続している Modifier は、接続先 Symbol の移動に伴って移動します。

5-3-4 Gene の移動

Gene の Species 部分の表示部分をドラッグすることで Gene を移動することができます。Reaction 部分の先端をドラッグすることにより、Species 部分を軸として Reaction 部分を回転、伸縮させることができます。Species に接続している Gene の Reaction 部分は、接続先 Species の移動に伴って移動します。

5-3-5 WhiteBox の移動

WhiteBox の Symbol の表示部分をドラッグすることで WhiteBox を移動することができます。WhiteBox を移動させても、中に格納されているシンボルは移動しません。

5-3-6 BlackBox の移動

BlackBox の Symbol の表示部分をドラッグすることで BlackBox を移動することができます。

5-3-7 VirtualReaction の移動

VirtualReaction の片方の端点をドラッグすることにより、もう片方の端点を軸として回転、伸縮させることができます。Species、Node、Domain に接続している VirtualReaction は、接続先 Species、Node、Domain の移動に伴って移動します。

5-3-8 Domain の移動

Domain の表示部分をドラッグすることで Domain を移動することができます。Domain の移動に伴い、EquivalenceLine、Domain 分割線も移動します。ただしこれらの線は折り曲げることはできません。

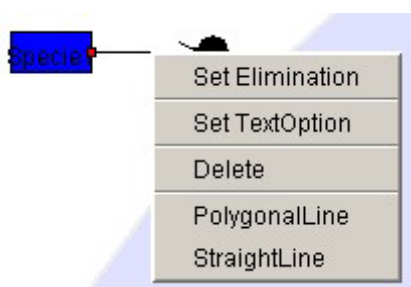
5-3-9 InnerLink の移動

InnerLink の片方の端点をドラッグすることにより、もう片方の端点を軸として回転、伸縮させることができます。Species、Node に接続している InnerLink は、接続先 Species、Node の移動に伴って移動します。

5-3-10 ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction の移動

ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction の Species の Symbol の表示部分をドラッグすることで Reaction を移動することができます。

5-3-11 Symbol の折り曲げ



折れ線描画をするには折れ線を行いたい線分を右クリックして Popup メニューの PolygonalLine を選択します。

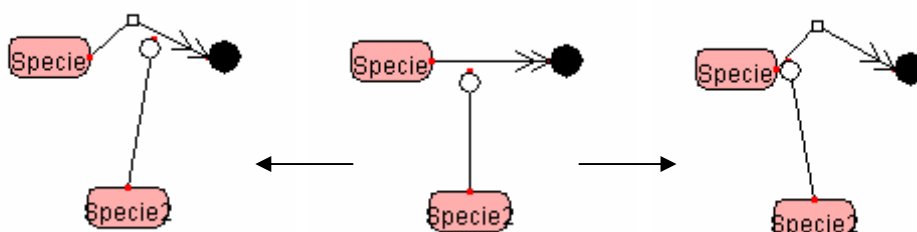
指定した線分の中央にハンドル(□)が表示されますのでそのハンドルをドラッグすることで折れ線の描画ができます。折れ線は最大4回までできます。



折れ線を元の直線に戻すには線分を右クリックして Popup メニューの StraightLine を選択します。

折れ線を行いたい線分に Modifier などがついていた場合にその線分の Reactant 側で右クリックして折れ線を行うと

Modifier は Product 側に寄り Product 側で右クリックして折れ線を行うと Modifier は Reactant 側に寄るとい動作をします。



Reactant 側で右クリック

Product 側で右クリック

5-3-12 複数 Symbol の同時移動

Ctrl キーを押しながら SpeciesSymbol をクリックし、複数選択した状態でマウスをドラッグすると、選択されている SpeciesSymbol を同時に移動させることができます。

※ ReactionSymbol の複数選択および複数同時移動はできません。

5-3-13 方向キーによる Symbol 移動

Species・Reaction はキーボードの方向キー「→、←、↑、↓」でも移動させることができます。また、Shift キーを押しながら方向キーを押すことで細かな移動ができます。

複数 Symbol を選択している状態で方向キーを押すと、Symbol を同時に移動させることができます。

- ※ Species に接続している Reaction の移動はできません。
- ※ 方向キーを用いて Reaction を接続させることはできません。

5-4 Symbol の削除

5-4-1 Species の削除

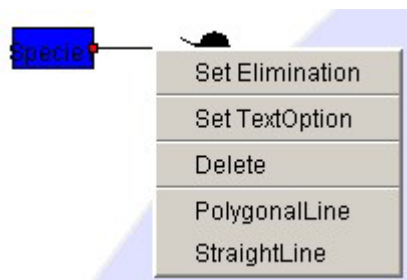


Species の Symbol の表示部分を右クリックし、Delete を選択することで Species を削除することができます。TextOption、SmallMoleculeOption

の削除は Option を配置し

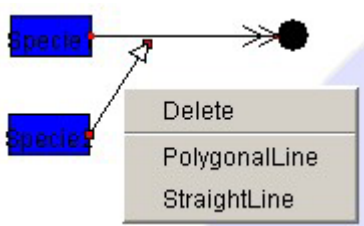
た Reaction の表示部分を右クリックし、DeleteTextOption または DeleteSmallMoleculeOption を選択することで配置した Option を削除することができます。また、Option を配置した Reaction を削除することにより、同時に Option も削除されます。

5-4-2 Reaction の削除



Reaction を右クリックし、Delete を選択することで Reaction を削除することができます。両端が接続している場合は線上を右クリックし Delete を選択することで Reaction を削除することができます。

5-4-3 Modifier の削除



Modifier を右クリックし、Delete を選択することで Modifier を削除することができます。両端が接続している場合は線上を右クリックし Delete を選択することで Modifier を削除することができます。

5-4-4 Gene の削除



Gene の Species 部分の表示部分を右クリックし、Delete を選択することで Gene を削除することができます。Reaction 部分を右クリックして削除を行うことはできません。

5-4-5 WhiteBox の削除

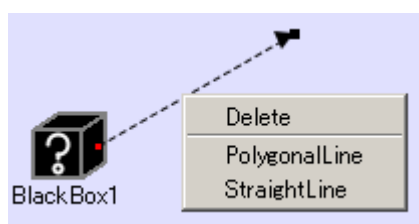
WhiteBox の削除は WhiteBoxTreeWindow 上で行います。(8-2-4参照)

5-4-6 BlackBox の削除



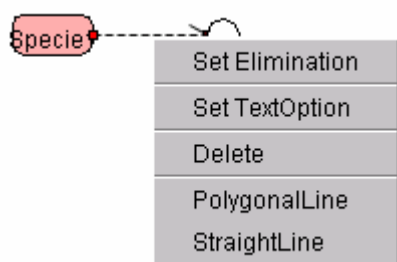
BlackBox の表示部分を右クリックし、Delete を選択することで BlackBox を削除することができます。BlackBox を削除すると BlackBox に接続している全ての unknownReaction/unknownModifier が削除されます。

- ・ unknownReaction/unknownModifier の削除



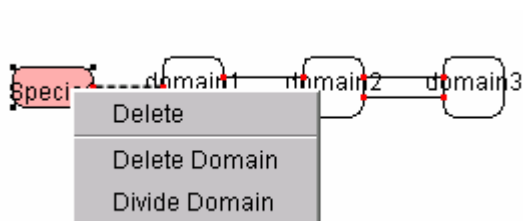
unknownReaction/unknownModifier を右クリックし、Delete を選択することで unknownReaction/unknownModifier を削除することができます。

5-4-7 VirtualReaction の削除



VirtualReaction を右クリックし、Delete を選択することで VirtualReaction を削除できます。

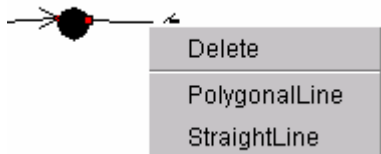
5-4-8 Domain の削除



Domain を一括して削除する場合は、分割元 Species の右クリックメニューから Delete Domain を選択してください。

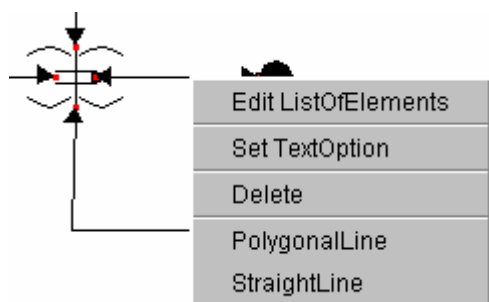
個別のドメインを削除する場合には、Divide Domain を選択し、DomainDialog 中で編集を行ってください。

5-4-9 InnerLink の削除



InnerLink を右クリックし、Delete を選択することで InnerLink を削除できます。また接続元の Species を削除すると、接続する InnerLink も同時に削除されます。

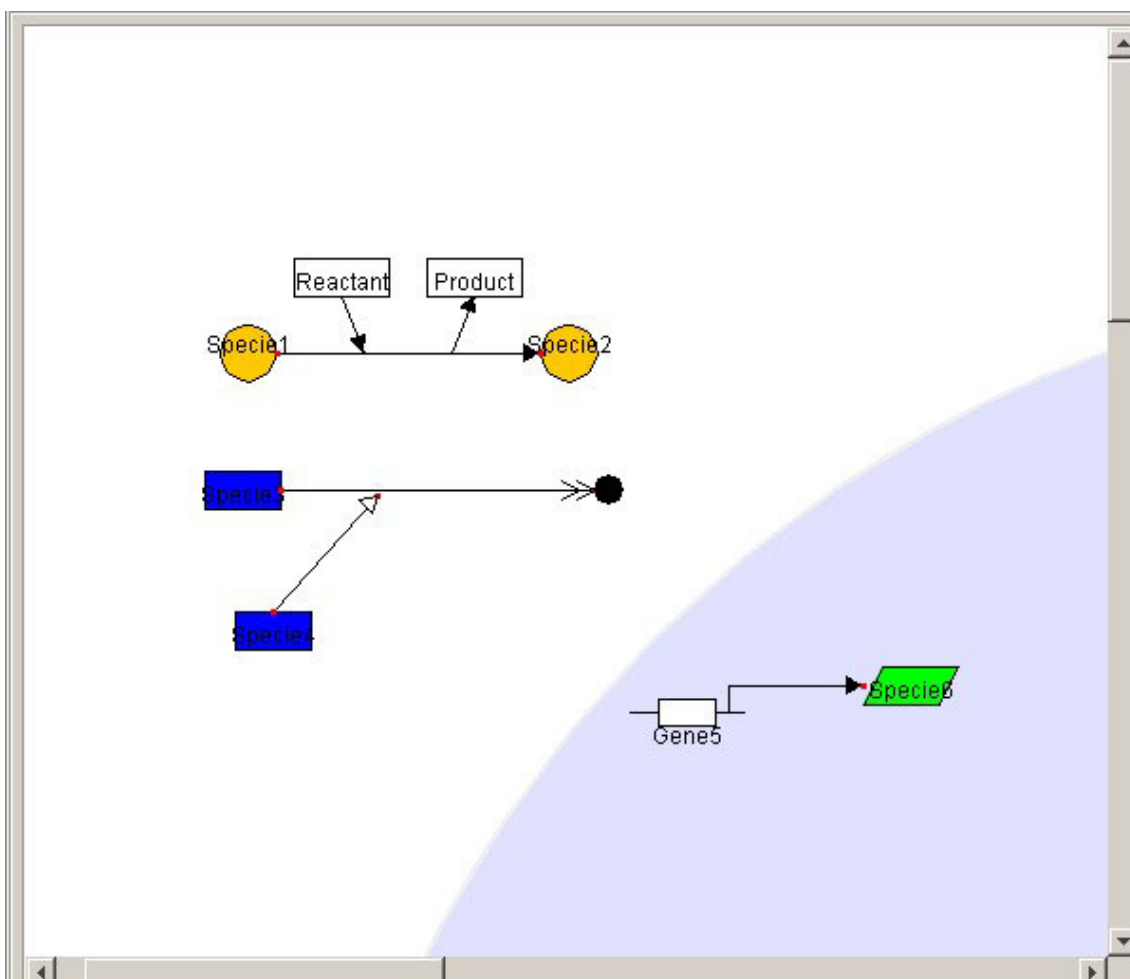
5-4-10 ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction の削除



ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction を右クリックし、Delete を選択することで Reaction を削除できます。また接続元の TransitionState を削除すると、接続する

ExchangeComplexReaction/ExchangeModifiedReaction も同時に削除されます。

5-5 Symbol の結合



5-5-1 Reaction、Modifier、VirtualReaction と Species の結合

Reaction、Modifier の片方の端点を Species の Symbol 上にドラッグすることにより、Reaction、Modifier と Species を結合することができます。

*BlackBox シンボルは他の Species シンボルと同じ扱いとなります。

5-5-2 Gene と Species の結合

Transcription、Protein_synthesis の端点を Species の Symbol 上にドラッグすることにより、DNA (Transcription、Protein_synthesis) と Species を結合することができます。

5-5-3 Modifier と Reaction の結合

Modifier の先端部分を Reaction、別の Modifier の線上にドラッグすることにより、Modifier と Reaction、別の Modifier を結合することができます。

*Modifier の先端部分を可逆反応に結合することはできません。可逆反応に結合させる場合は、可逆反応に代わりに逆向きの2種類の不可逆反応を配置することで対処して下さい。

5-5-4 VirtualReaction と VirtualNode、Domain の結合

VirtualReaction の片方の端点を Species、VirtualNode、Domain 上にドラッグすることにより VirtualReaction と Species、VirtualNode、Domain を結合することができます。

5-5-5 InnerLink と Species、VirtualNode との結合

InnerLink の片方の端点を Species、VirtualNode 上にドラッグすることにより InnerLink と Species、VirtualNode を結合することができます。

6. Data Editor

6-1 DataEditor 上のオブジェクトの説明

Data Editor - Circadian clock								
ListOfSpecies								
SpeciesName	SpeciesClass	BindingSite	Compartment	MassBalance	TotalAmount	Decomposition	InitialAmount	IsExternal
mRNA(CYC)	RNA		nucleoplasm	on	variable	on		false
mRNA(PER)	RNA		nucleoplasm	on	variable	on		false
mRNA(CYC)	RNA		cytoplasm	on	variable	on		false
mRNA(PER)	RNA		cytoplasm	on	variable	on		false
PER	protein		cytoplasm	on	variable	on		false
PER-P	modified		cytoplasm	on	variable	on		false
mRNA(DBT)	RNA		nucleoplasm	on	variable	on		false
DBT	protein		cytoplasm	on	variable	on		false
mRNA(DBT)	RNA		cytoplasm	on	variable	on		false
PER.ATP.DBT	modifier_complex		cytoplasm	on	variable	on		false
PER-P-P	modified		cytoplasm	on	variable	on		false
PER-P.ATP.DBT	modifier_complex		cytoplasm	on	variable	on		false

ListOfReactions							
ReactionName	ModifierReactionEquation	Layer	ReactionType	isConvertible	isTotal		
#76	CYC:dCLK-0 Enhancer(PER) -> mRNA(PER)	protein	transcription	true	true	CYC:dCLK-0 Enh	
#77	DBT-0 PER + ATP > PER-P + ADP	protein	homo_association_or_...	true	true	DBT + PER + ATP	
#78	DBT-0 PER-P + ATP > PER-P-P + ADP	protein	homo_association_or_...	true	true	DBT + PER-P + AT	
#79	CYC:dCLK:REP - Promoter(dCLK) -> mRNA(dCLK)	protein	transcription	true	true	CYC:dCLK:REP -	
#80	CHAN-0 PER-P-P:TIM(cytoplasm) -> PER-P-P:TIM(n...	protein	transport	true	true	CHAN + PER-P-P-	
#2	Enhancer(CYC) -> mRNA(CYC)	protein	transcription	true		Enhancer(CYC) ->	
#6	mRNA(CYC)(nucleoplasm) -> mRNA(CYC)(cytoplas...	protein	transport	true		mRNA(CYC) => m	
#9	mRNA(PER)(nucleoplasm) -> mRNA(PER)(cytoplas...	protein	transport	true		mRNA(PER) => m	
#11	mRNA(PER) -> PER	protein	translation	true		mRNA(PER) -> PE	
#15	Promoter(DBT) -> mRNA(DBT)	protein	transcription	true		Promoter(DBT) ->	
#18	mRNA(DBT)(nucleoplasm) -> mRNA(DBT)(cytoplasm)	protein	transport	true		mRNA(DBT) => m	
#20	mRNA(DBT) -> DBT	protein	translation	true		mRNA(DBT) -> DE	

6-1-1 Species スプレッドシート

NetworkConstructor で配置した Species および BlackBox の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

6-1-2 Reaction スプレッドシート

NetworkConstructor で配置した Reaction の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

6-1-3 Save ボタン

NetworkConstructor、DateEditor で作成、編集された Network 情報を XML データベース: (data フォルダ配下の model フォルダ) に保存します。

File メニューの Save 機能と同様です。

6 - 2 Species 項目の説明

- SpeciesName

配置した Species にはシステムで仮の名称がつけられます。DataEditor で変更可能です。

*Reaction の配置により生成した Species には Complex の場合、A:B のように:で両端の SpeciesName をつないだ名称が、Modified の場合、A-B のように-で両端の SpeciesName をつないだ名称がつけられます。自動で生成した Species の名称は変更することが出来ません。ただし、ProteinSynthesis で生成した RNA の名称は変更可能です。

- SpeciesClass

NetworkConstructor で生成された Species の物質属性を表示します。

- DNA
- RNA
- protein
- metabolite
- environmental_factor
- ion_signal
- complex (複合体)
- modifier_complex (酵素基質複合体:システムで自動生成した Species)
- modified (付加を受けた物質)
- text_option (小分子用オプションで生成した Species)
- small_molecule_option (小分子用オプションで生成した Species)
- others
- black_box

- BindingSite

遺伝子ではない DNA の物質属性の分類を選択します。

- enhancer :DNA の活性化因子結合部位
- promoter :DNA の抑制因子結合部位
- other :DNA の不特定結合領域

初期値は other となります。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。

- Compartment

NetworkConstructor で生成された Species の場所属性を表示します。

- environment
- cytoplasm
- nucleoplasm
- ER
- mitochondria
- golgi
- chloroplast
- membrane
- other

* WhiteBox に格納された Species、BlackBox の Compartment については、WhiteBox の位置に関わらず、展開時の Compartment となります。

- **MassBalance**

構成要素量属性を選択して下さい。

on :物質収支式を必要としない
off :物質収支式必要とする

SpeciesClass が DNA_promoter、DNA_enhancer、DNA_other、Protein、Modified のときは on、それ以外の場合は初期値 off が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。ただし、BlackBox については空白が表示され、編集はできません。

- **TotalAmount**

構成要素変化属性を選択して下さい。

constant :微分方程式において定数
variable :微分方程式において変数

SpeciesClass が DNA,metabolite、environmentl_factor、ion_signal、small_molecule、other のときは初期値 constant が、それ以外の場合は初期値 variable が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。ただし、BlackBox については空白が表示され、編集はできません。

- **Decomposition**

物質分解属性を選択して下さい。

on :物質分解項を生成する
off :物質分解項を生成しない

SpeciesClass が RNA、Protein、Complex、Modified のときは初期値 on、それ以外の場合は初期値 off が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。ただし、BlackBox については空白が表示され、編集はできません。

- **InitialAmount**

物質の初期値を数字で入力して下さい。ただし、BlackBox については空白が表示され、編集はできません。

- **IsExternal**

物質の IsExternal を選択してください。External が True の物質は KnockOut の影響を受けません。ただし、Complex・Modified・ModifierComplex・Gene の IsExternal は編集することができません。

6 - 3 Reaction 項目の説明

- **ReactionName**
Reaction の名称を表示します。Reaction の ID の前に#記号をつけて表示します。
- **ModifierReactionEquation**
Reaction の相互作用式を表示します。相互作用式では Modifier の Species、Modifier、ReactantReaction の Species、Reaction、ProductReaction の Species の順に表示されます。
- **Layer**
反応層を選択して下さい。
metabolic :代謝層での反応
protein :タンパク質相互作用層での反応
gene :遺伝子発現層での反応
初期値は ReactionType により異なります。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。
- **ReactionType**
NetworkConstructor で配置した Reaction の反応因子属性を表示します。
binding
binding_with_stoichiometric_changes
homo_association_or_modification
homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes
elimination
elimination_with_stoichiometric_changes
reversible_conversion
irreversible_conversion
reversible_conversion_regarding_multicomponent
irreversible_conversion_regarding_multicomponent
transport
option_transport
transcription
translation
degradation
activation_of_specie
inhibition_of_specie
activation_of_modifier
inhibition_of_modifier
unknown_reaction
unknown_modification_of_modifier
unknown_modifier_of_specie
- **isConvertible**
シミュレータでの計算の可否を選択して下さい。
true :シミュレータ計算可能な Reaction
false :シミュレータ計算不可能な Reaction
初期値 true が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。
ただし、化学式を生成しない反応を作成した場合、false となり変更は出来ません

- **isTotal**

シミュレータでの **modifier** の計算方法を選択して下さい。

true : **modifier** を **Total** 量として取り扱う。

false : **modifier** を **Total** 量として取り扱わない。

初期値 **true** が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。

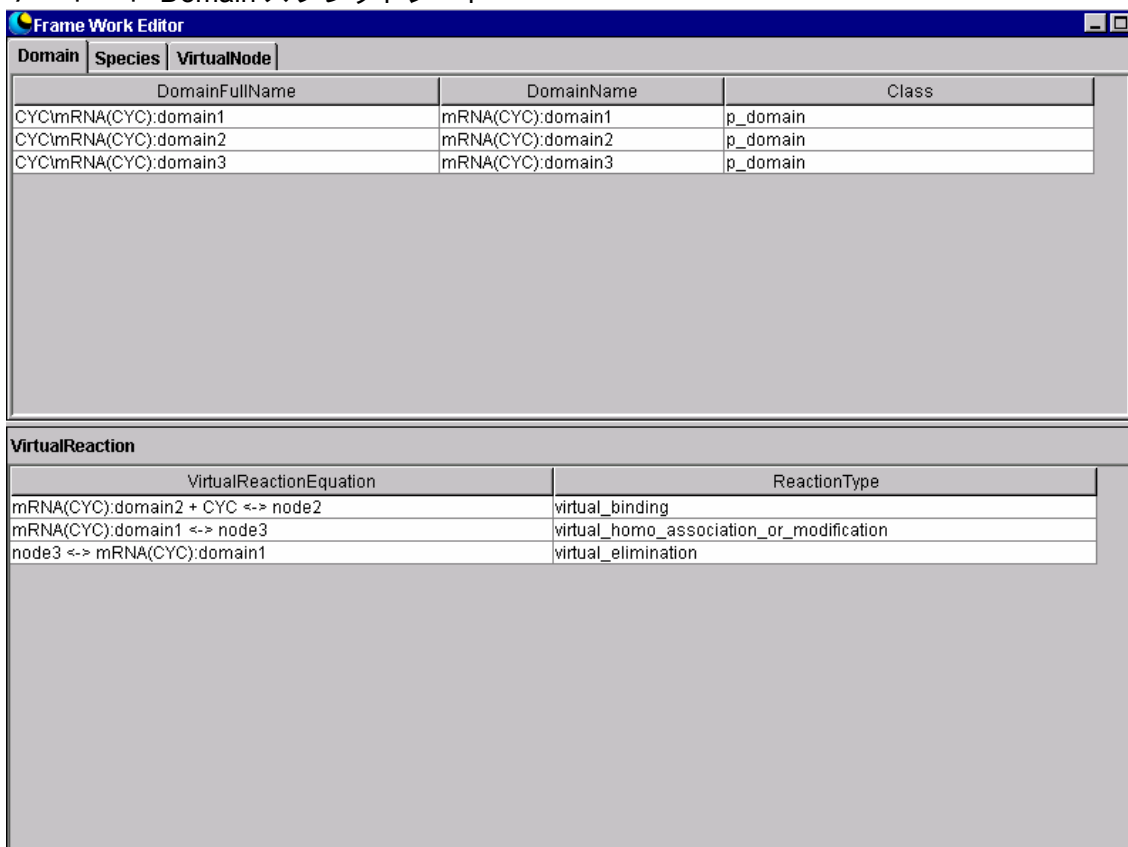
- **ChemicalReactionEquation**

Reaction の化学反応式を表示します。ただし **isConvertible** が常に **false** の反応については **ChemicalReactionEquation** は生成されません。

7. Framework Editor

7-1 Framework Editor 上のオブジェクトの説明

7-1-1 Domain スプレッドシート



The screenshot shows the 'Frame Work Editor' window with two tabs: 'Domain' and 'VirtualNode'. The 'Domain' tab is active, displaying a table with three columns: 'DomainFullName', 'DomainName', and 'Class'. Below this, there is a section for 'VirtualReaction' with two columns: 'VirtualReactionEquation' and 'ReactionType'.

DomainFullName	DomainName	Class
CYC\mRNA(CYC):domain1	mRNA(CYC):domain1	p_domain
CYC\mRNA(CYC):domain2	mRNA(CYC):domain2	p_domain
CYC\mRNA(CYC):domain3	mRNA(CYC):domain3	p_domain

VirtualReactionEquation	ReactionType
mRNA(CYC):domain2 + CYC <-> node2	virtual_binding
mRNA(CYC):domain1 <-> node3	virtual_homo_association_or_modification
node3 <-> mRNA(CYC):domain1	virtual_elimination

NetworkConstructor で配置した Domain の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

7-1-2 Species スプレッドシート

Frame Work Editor			
Domain	Species	VirtualNode	
	SpeciesName	FrameWorkName	SpeciesClass
	CYC	CYC	protein

VirtualReaction	
VirtualReactionEquation	ReactionType
mRNA(CYC):domain2 + CYC <-> node2	virtual_binding
mRNA(CYC):domain1 <-> node3	virtual_homo_association_or_modification
node3 <-> mRNA(CYC):domain1	virtual_elimination

NetworkConstructor で配置した Species のうち BuildingFramework に関与する Species の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

7-1-3 VirtualNode スプレッドシート

The screenshot shows the 'Frame Work Editor' window with two tabs: 'VirtualNode' and 'VirtualReaction'. The 'VirtualNode' tab is active and contains a table with two columns: 'VirtualNodeName' and 'SpeciesClass'. The 'VirtualReaction' tab is also active and contains a table with two columns: 'VirtualReactionEquation' and 'ReactionType'.

VirtualNodeName	SpeciesClass
node2	virtual_complex
node3	virtual_complex

VirtualReactionEquation	ReactionType
mRNA(CYC):domain2 + CYC <-> node2	virtual_binding
mRNA(CYC):domain1 <-> node3	virtual_homo_association_or_modification
node3 <-> mRNA(CYC):domain1	virtual_elimination

NetworkConstructor で配置した VirtualNode の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

7-1-4 VirtualReaction スプレッドシート

NetworkConstructor で配置した VirtualReaction の属性情報を表示、入力、編集するためのスプレッドシートです。文字列を入力する場合、入力しようとするセルが選択状態になっていることを確認してから入力してください。また入力後はリターンキーを押して確定させてください。

7-2 Domain 項目の説明

- **DomainFullName**
Domain の名称に Domain 分割元の Species 名称をあわせて表示します。
- **DomainName**
Domain の名称を表示します。編集が可能です。
- **Class**
Domain の物質属性を表示します。
 - r_domain
 - p_domain

7-3 Species 項目の説明

- **SpeciesName**
Species 名称を表示します。
- **FrameworkName**
Species に BuildingFramework 特有の名称を表示します。編集が可能です。
- **SpeciesClass**
Species の物質属性を表示します。
 - RNA
 - protein
 - complex (複合体)
 - modified (付加を受けた物質)
- **InnerLink**
Species と InnerLink により接続している Species、Node を表示します。対象の InnerLink が複数ある場合は // で区切って表示します。

7-4 VirtualNode 項目の説明

- **VirtualNodeName**
VirtualNode の名称を表示します。編集が可能です。Species の場合とは異なり、virtual_complex や virtual_modified には自動で名称が生成されません。
- **SpeciesClass**
VirtualNode の物質属性を表示します。
 - virtual_complex
 - virtual_modified
 - virtual_text_option (小分子用オプションで生成した Node)
 - virtual_small_molecule (小分子用オプションで生成した Node)

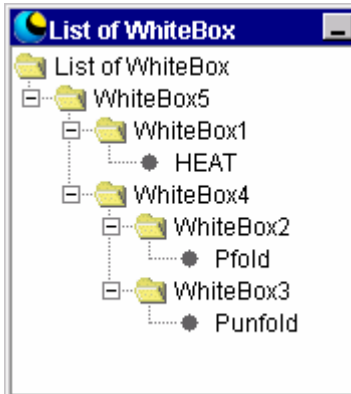
7 – 5 VirtualReaction 項目の説明

- VirtualReactionEquation
NetworkConstructor で配置した VirtualReaction の相互作用式を表示します。
- ReactionType
NetworkConstructor で配置した VirtualReaction の反応因子属性を表示します。
 - virtual_binding
 - virtual_binding_with_stoichiometric_changes
 - virtual_homo_association_or_modification
 - virtual_homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes
 - virtual_elimination
 - virtual_elimination_with_stoichiometric_changes

8. WhiteBoxTreeWindow

8-1 WhiteBoxTreeWindow 画面

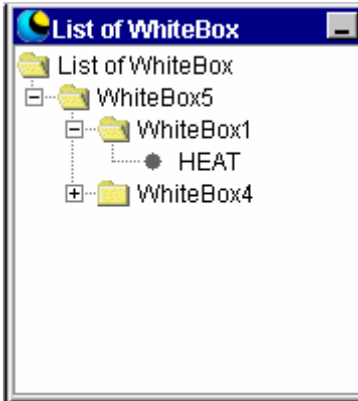
作成した WhiteBox を Tree 構造で表示します。



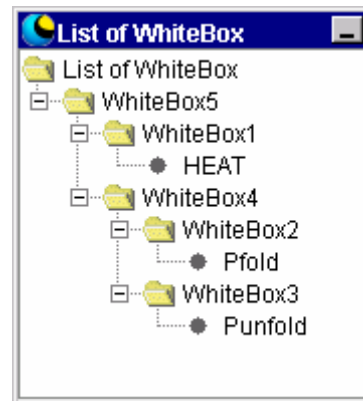
8-2 WhiteBoxTreeWindow の操作説明

8-2-1 WhiteBox の展開

展開する WhiteBox の左にある「+」をクリックすると、該当 WhiteBox が展開されます。展開すると、パネル上の WhiteBox も展開表示されます。展開した WhiteBox の下の層の WhiteBox も全て展開されます。

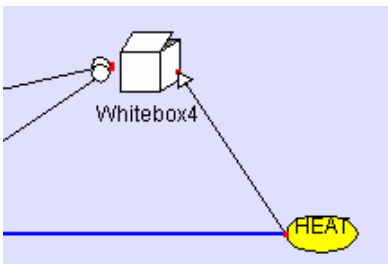


→

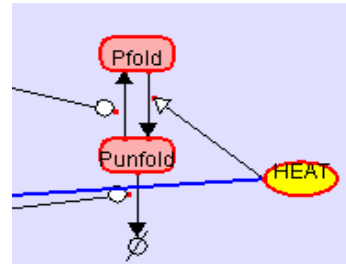


- ・シンボルの強調表示

WhiteBox に格納されていたシンボルは全て強調表示されます。

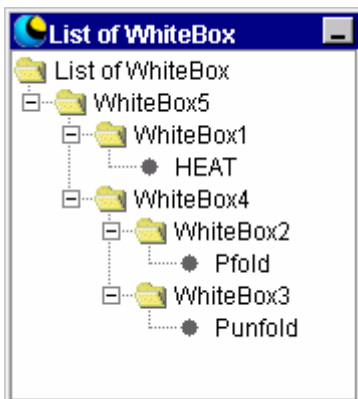


→

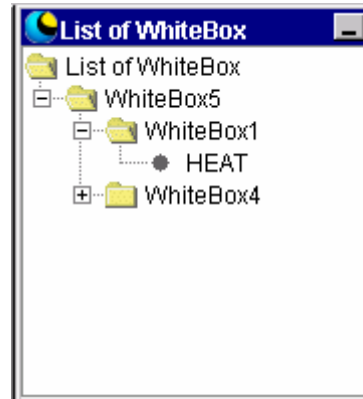


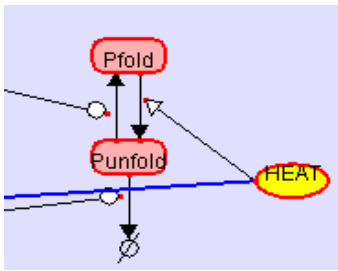
8-2-2 WhiteBox の格納

格納する WhiteBox の左にある「-」をクリックすると、該当 WhiteBox が格納されます。格納すると、パネル上の WhiteBox も格納表示されます。

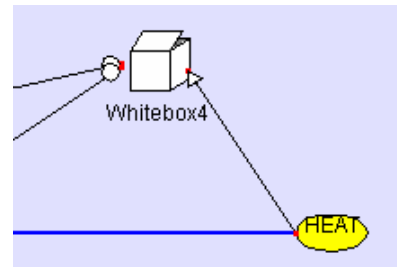


→



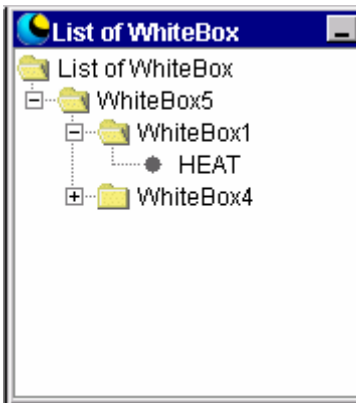


→

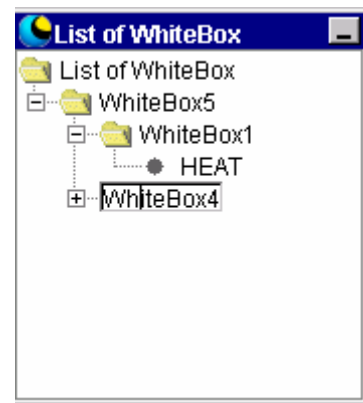


8-2-3 WhiteBox の名称編集

編集する WhiteBox のフォルダ型アイコンまたは WhiteBox 名をダブルクリックします。選択状態になったのを確認してから名称を入力して下さい。入力後はリターンキーを押して確定させてください。尚 WhiteBoxTreeWindow から Species、VirtualNode の名称変更は行えません。Species の名称変更は DataEditor 上で、VirtualNode の名称変更は FrameworkEditor 上で行って下さい。

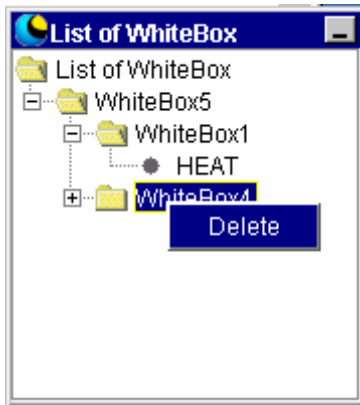


→



8-2-4 WhiteBox の削除

削除する WhiteBox の上で右クリックし、Delete を選択して下さい。Delete を選択すると該当 WhiteBox が削除されます。削除した WhiteBox に格納されていたシンボルは 1 つ上の階層に移動します。尚 WhiteBoxTreeWindow 上から Species、VirtualNode の削除は行えません。Species、VirtualNode の削除はパネル上で行って下さい。

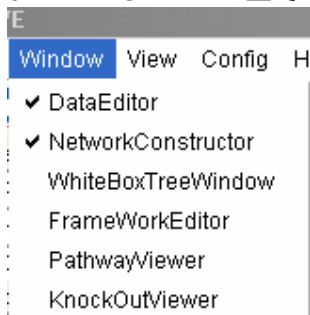


9. PathwayViewer

*使用するマシンスペックによっては PathwayViewer の動作に支障が出る可能性があります。

9-1 PathwayViewer の起動方法

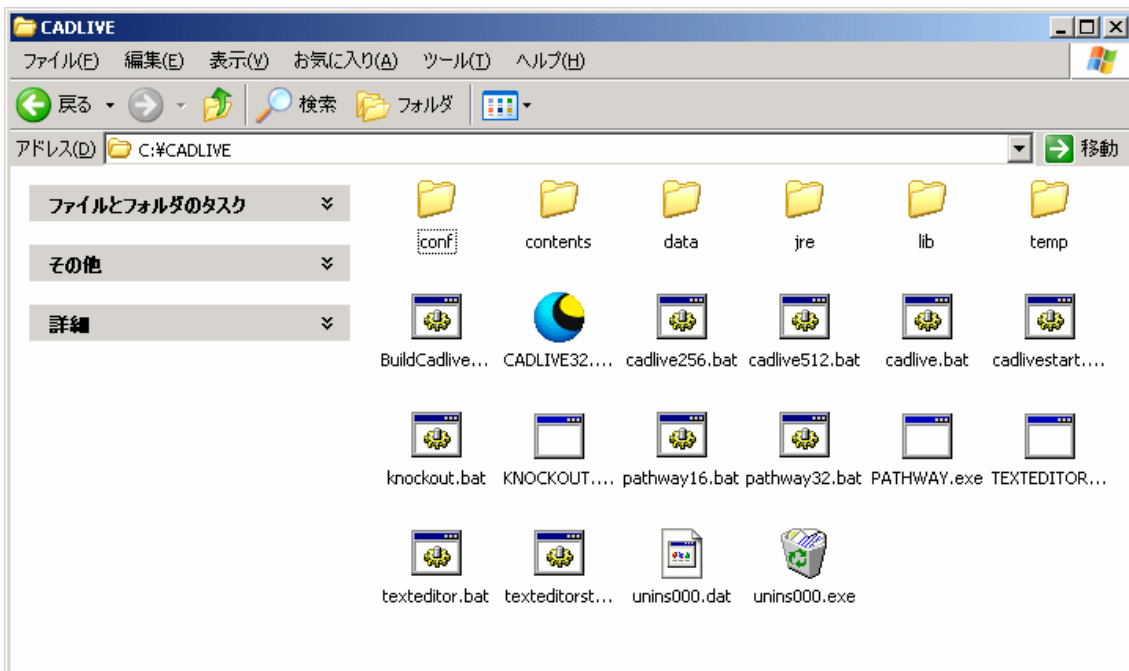
9-1-1 CADLIVE 上での起動



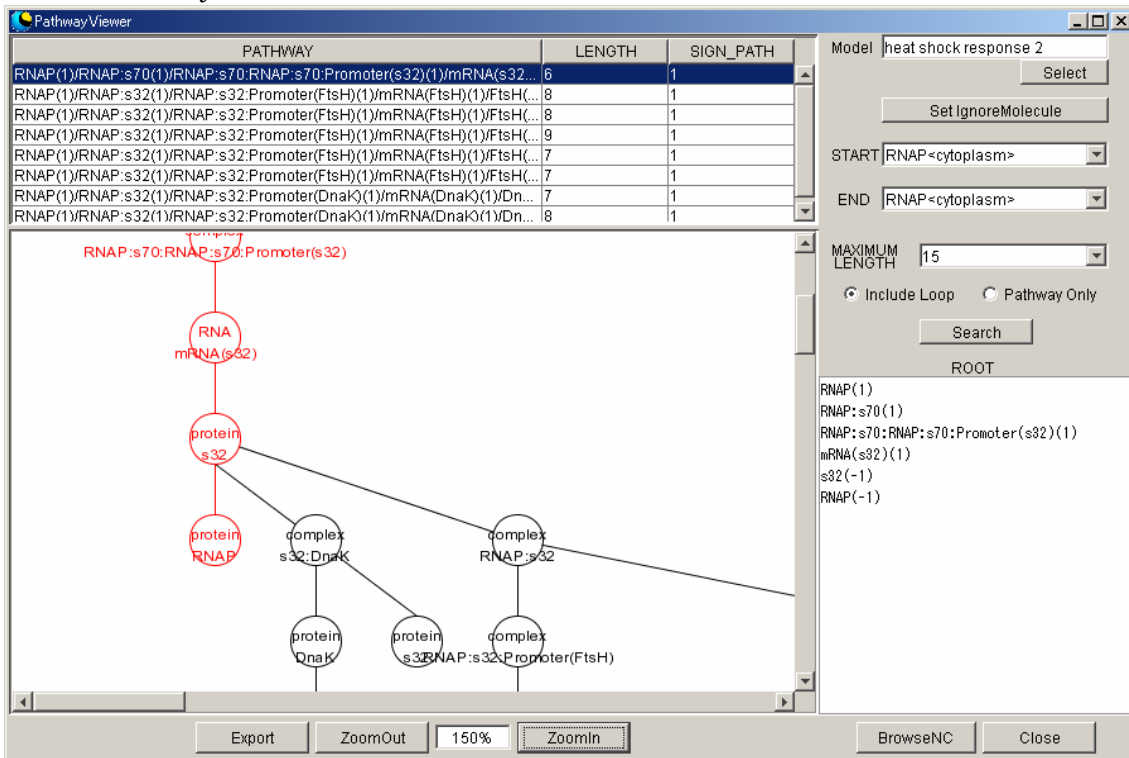
CADLIVE から PathwayViewer を起動するには、編集集中の Model を読み込んだ状態で Window メニューの PathwayViewer を選択して下さい。このとき、描画中のネットワークをシステム内部で保存してロックアウトを実行するため Save と同様のチェック がかけられます。CADLIVE 上での起動を行った場合、経路探索と NetworkConstructor 上での経路強調表示が行えます。

9-1-2 PathwayViewer の単体での起動

Java™ 2 Runtime Environment (1.3) がインストールされていることを確認して下さい。プログラムメニューの PATHWAY を選択するか、CADLIVE をインストールしたディレクトリ上（通常は C:\¥CADLIVE）にある "PATHWAY.exe" をダブルクリックして下さい。PathwayViewer 単体での起動では CADLIVE との連携機能（NetworkConstructor 上での経路強調表示）は行えません。



9-2 PathwayViewer 上のオブジェクトの説明



9-2-1 Model

現在の Model 名を表示します。

9-2-2 Set IgnoreMolecule ボタン

無視する分子を設定します。

9-2-3 Select ボタン

新しい Model(SANAC)を読み込みます。

*新しい Model を読み込むと **BrowseNC** ボタンによる強調表示は行えなくなります。

9-2-4 Start コンボボックス

経路探索の始点となる **Species** を選択するコンボボックスです。

*コンボボックスには現在読み込んでいる Model の **Species** 一覧が表示されます。

無視する分子に設定されている **Species** は一覧に表示されません。

9-2-5 End コンボボックス

経路探索の終点となる **Species** を選択するコンボボックスです。

*コンボボックスには現在読み込んでいる Model の **Species** 一覧が表示されます。

無視する分子に設定されている **Species** は一覧に表示されません。

9-2-6 MaximumLength コンボボックス

経路探索の長さを選択するコンボボックスです。長さは最大で 999 まで設定できます。

*数値を大きくした場合には、探索に失敗することや、非常に時間がかかる可能性が高くなります。

9-2-7 Include Loop ラジオボタン

Include Loop を選択すると、ループを含んだ経路を探索します。

9-2-8 Pathway Only ラジオボタン

Pathway Only を選択すると、ループを含まずに経路を探索します。

9-2-9 Search ボタン

Start コンボボックス・**End** コンボボックス・**MaximumLength** コンボボックスで選択されている条件で経路探索を実行します。

*大量の検索結果が生じた場合には、操作が一時的に行えなくなることがあります。

9-2-10 ROOT パネル

Pathway スプレッドシートで選択されている経路に存在する **Species** を順に表示します。

9-2-11 Pathway スプレッドシート

経路探索の結果をスプレッドシートに表示します。

PATHWAY	LENGTH	SIGN_PATH
RNAP(1)RNAP:s70(1)RNAP:s70.RNAP:s70.Promoter(s32)(1)vmRNA(s32)(1)s32(1)	7	1
RNAP(1)RNAP:s32(1)RNAP:s32.Promoter(Lon)(1)	3	1

- **PATHWAY**

経路をスラッシュで区切って表示します。

- **LENGTH**

経路の始点から終点までの長さを表示します。

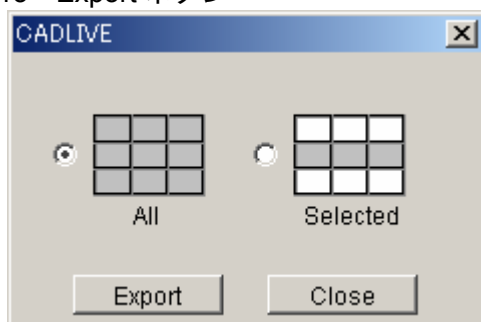
- **SIGN_PATH**

経路の **SIGN_PATH** を 1 または -1 で表示します。

9-2-12 Tree パネル

Pathway スプレッドシートで選択されている経路を主鎖とし、選択されている経路の途中でループしている経路を枝分かれとして、Tree 構造で表示します。

9-2-13 Export ボタン



Pathway スプレッドシートのデータを CSV 形式で出力します。
All を選択すると、Pathway スプレッドシートのデータを全て出力します。Selected を選択すると、Pathway スプレッドシートの選択されている行のデータを出力します。

9-2-14 Zoom Out ボタン

Tree パネルの表示部分を縮小します。(各 Symbol は小さく表示されます)
最小で 25%まで縮小できます。

9-2-15 Zoom In ボタン

Tree パネルの表示部分を拡大します。(各 Symbol は大きく表示されます)
最大で 400%まで拡大できます。

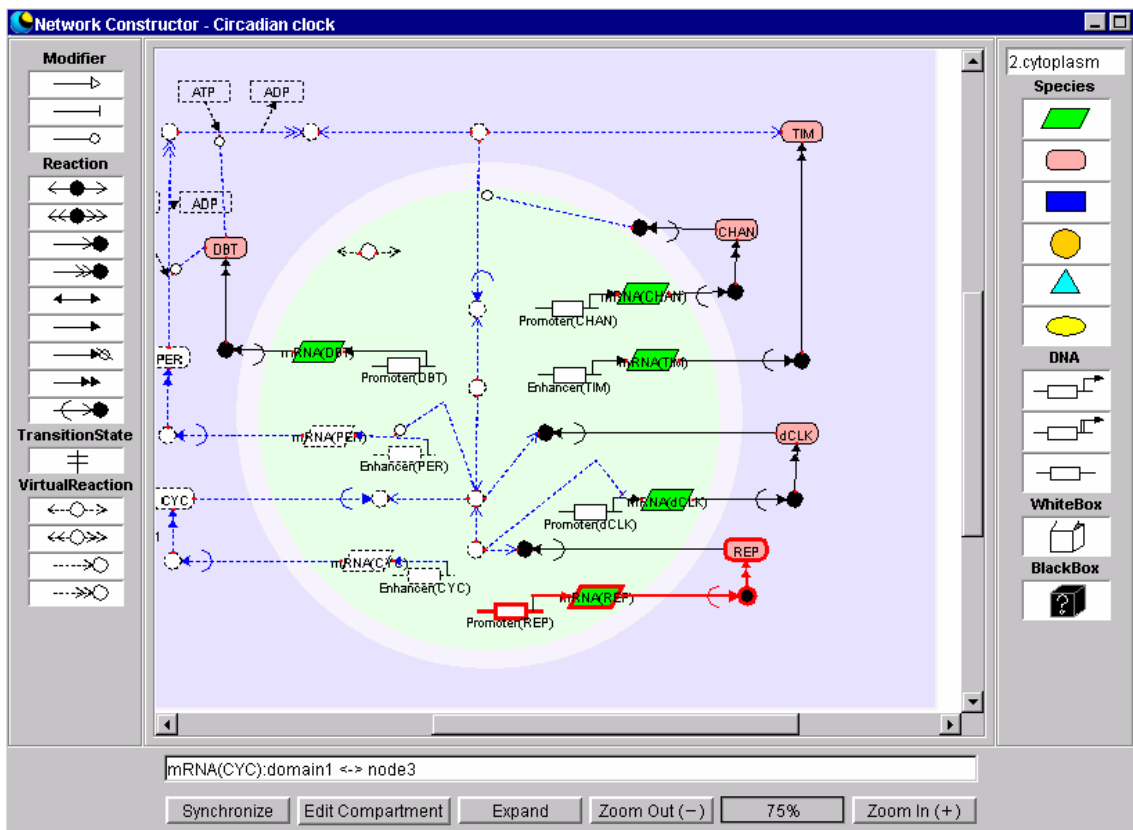
9-2-16 Zoom 倍率表示ボックス

現在の倍率を表示します。

9-2-17 BrowseNC ボタン

Pathway スプレッドシートで選択されている経路を NetworkConstructor で強調表示します。

*強調表示を行うには、CADLIVE 上で表示されている Model と同一の Model を PathwayViewer で読み込む必要があります。両者の Model に不整合が生じた場合は、この機能を使うことができません。使用する場合は PathwayViewer を一旦終了し、[CADLIVE からの起動](#)を行って下さい。



9-2-18 Close ボタン
PathwayViewer を閉じます。

9-3 無視する分子設定画面オブジェクト説明

The screenshot shows the 'CADLIVE' software interface. It displays a table with two columns: 'Name' and 'SpeciesClass'. The table contains two rows of data. Below the table are 'OK' and 'Cancel' buttons.

Name	SpeciesClass
CHAN<membrane>	protein
DBT<cytoplasm>	protein

経路探索から無視する分子を設定する画面です。

9-3-1 スプレッドシート

経路探索から無視する分子を設定するシートです。無視したい **Species** をセレクトボックスから選択して下さい。

- * セレクトボックスには **Model** に登録されている全ての **Species** が入ります。
- * セレクトボックスの空白を選択することでその行を削除できます。

9-3-2 OK ボタン

選択されている **Species** を無視する分子として設定します。

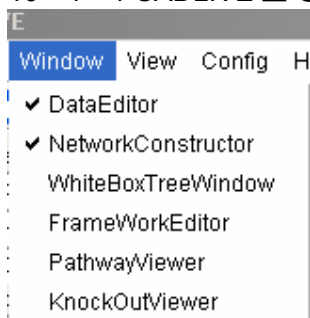
9-3-3 Cancel ボタン

編集がキャンセルされ、画面を閉じます。

10. KnockOutViewer

10-1 KnockOutViewer の起動方法

10-1-1 CADLIVE 上での起動

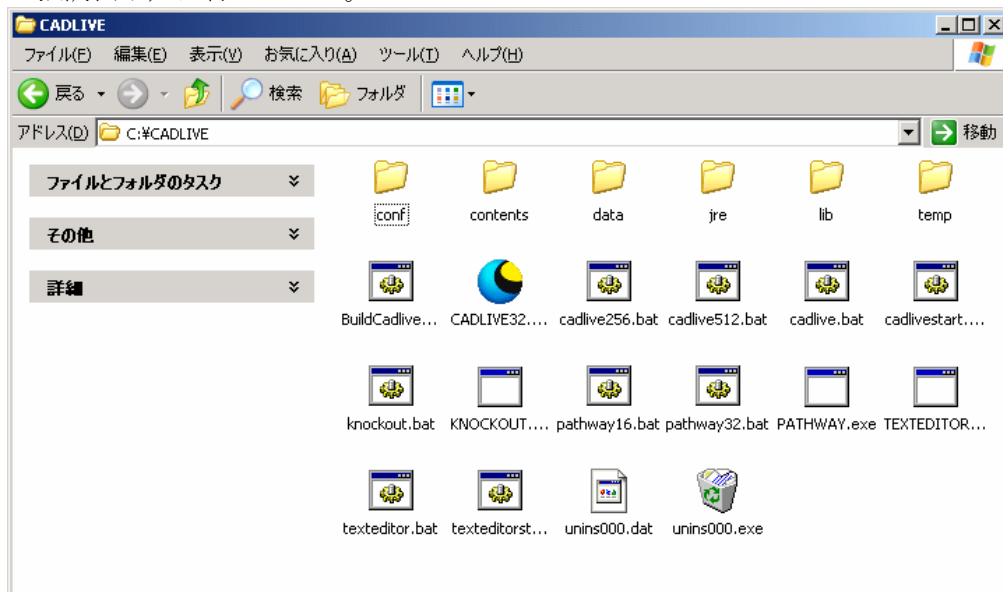


CADLIVE から KnockOutViewer を起動するには、Model を読み込んだ状態で Window メニューの KnockOutViewer を選択して下さい。このとき、描画中のネットワークをシステム内部で保存してロックアウトを実行するため Save と同様のチェックがかかります。CADLIVE 上での起動を行った場合は、KnockOut の実行と NetworkConstructor 上での KnockOut 結果強調(点線)表示が行えます。

10-1-2 KnockOutViewer の単体での起動

Java™ 2 Runtime Environment (1.3) がインストールされていることを確認して下さい。プログラムメニューの KNOCKOUT を選択するか、CADLIVE をインストールしたディレクトリ上（通常は C:\¥CADLIVE）にある "KNOCKOUT.exe" をダブルクリックして下さい。

KnockOutViewer 単体での起動では CADLIVE との連携機能（NetworkConstructor 上での強調表示）は行えません。



10-2 KnockOutViewer 上のオブジェクトの説明

Model:

Select KnockOut Gene

SpeciesName	SpeciesClass	Compartment
Promoter(REP)	DNA_gene	nucleoplasm
Promoter(dCLK)	DNA_gene	nucleoplasm
Enhancer(TIM)	DNA_gene	nucleoplasm
Promoter(CHAN)	DNA_gene	nucleoplasm
Promoter(DBT)	DNA_gene	nucleoplasm
Enhancer(CYC)	DNA_gene	nucleoplasm
Enhancer(PER)	DNA_gene	nucleoplasm

List of deleted Species

SpeciesName	SpeciesClass	Compartment
Enhancer(CYC)	DNA_gene	nucleoplasm
mRNA(CYC)	RNA	nucleoplasm
mRNA(CYC)	RNA	cytoplasm
CYC	protein	cytoplasm
CYC	protein	nucleoplasm
CYC:dCLK	complex	nucleoplasm
mRNA(PER)	RNA	nucleoplasm

List of deleted Reactions

ReactionEquation	ReactionType
Enhancer(CYC) -> mRNA(CYC)	transcription
mRNA(CYC)(nucleoplasm) -> mRNA(CYC)(cytoplasm)	transport
mRNA(CYC) -> CYC	translation
CYC(cytoplasm) -> CYC(nucleoplasm)	transport
CYC + dCLK <=> CYC:dCLK	binding
CYC:dCLK -() Enhancer(PER) -> mRNA(PER)	transcription
mRNA(PER)(nucleoplasm) -> mRNA(PER)(cytoplasm)	transport
mRNA(PER) -> PER	translation
DBT -() PER + ATP > PER-P + ADP	homo_association_or_modification_...
DBT -() PER-P + ATP > PER-P-P + ADP	homo_association_or_modification_...

KnockOut BrowseNC PathwayViewer Export Close

10-2-1 Model

現在の Model 名を表示します。

10-2-2 Select ボタン

新しい Model(SANAC)を読み込みます。

*CADLIVE から起動した場合、新しい Model を読み込むと BrowseNC ボタンによる強調表示は行えなくなります。

10-2-3 Select KnockOut Gene スプレッドシート

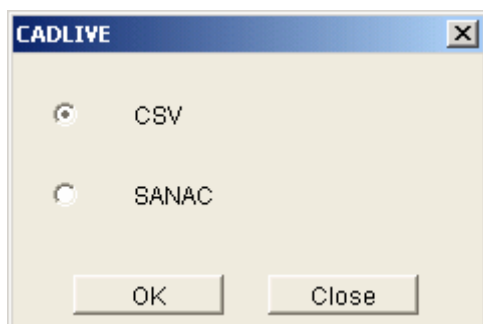
KnockOut 対象となる Gene (もしくは IsExternal が true の RNA または Protein) を選択するスプレッドシートです。カラムを複数行選択する時は、Ctrl キーを押しながらカラムをクリックもしくはドラッグで複数の行を選択してください。複数行選択を行うことで、選択されている Gene を同時にノックアウトします。

* KnockOut 対象となる Gene には、SpeciesClass が Gene_DNA の Species と、

10-2-8 PathwayViewer ボタン

PathwayViewer を起動します。Knockout を実行した後に PathwayViewer ボタンを押すと、KnockOut されたネットワークに対して経路探索を行うことができます。

10-2-9 Export ボタン



ノックアウト結果を、CSV形式とSANAC(XML)形式にExportすることができます。CSVを選択した場合は、ノックアウト結果がCSV形式で出力されます。SANACを選択した場合は、ノックアウトされたネットワークがSANAC形式で出力されます。

10-2-10 Close ボタン

KnockOutViewer を閉じます。

11. Menu 項目の説明

11-1 File メニュー



11-1-1 New

新規ネットワークを作成します。(4-2 参照)

11-1-2 Open

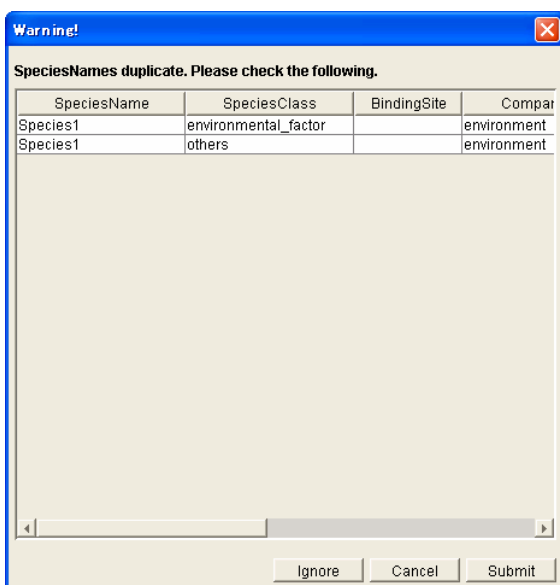
既存のネットワークをロードします。(4-3 参照)

11-1-3 Save

NetworkConstructor、DateEditor、WhiteBoxTreeWindow、FrameworkEditor で作成、編集された Network 情報を XML に上書き保存します。新規でネットワークを作成した場合は、常に SaveAs として保存されます。

同一 Compartment 上に同一の名称かつ、属性が異なる Species が存在する場合、警告を表示します。また、同一 Compartment 上に Transport が存在する場合、警告を表示します。さらに、Reaction の Layer が適切でない場合も警告を表示します。Layer がエラーとなる条件は以下のとおりです。

- ReactionType が TRANSCRIPTION、TRANSLATION、PROTEIN_SYNTHESIS で、LAYER が GENE で無い時
- ReactionType が BINDING、ASSOCIATION、ELIMINATION で、LAYER が PROTEIN で無い時
- 上記 2 つの条件に当てはまらず、ReactionType が ACTIVATION_OF_MODIFIER、INHIBITION_OF_MODIFIER、UNKNOWN_MODIFIER_OF_MODIFIER 以外で、LAYER が GENE の時



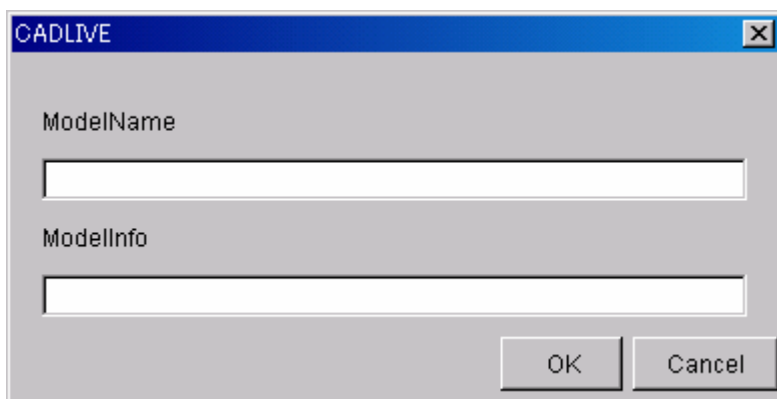
Ignore を押すと、警告を無視し保存することが可能ですが、この XML を他のシステムで用いる場合に問題が発生する可能性があります。また、SpeciesName と Layer の場合は、ダイアログ上でデータを修正し、Submit を押すことで修正したデータを保存することが可能です。Cancel をクリックすると Save を中断します。

11-1-4 SaveAs

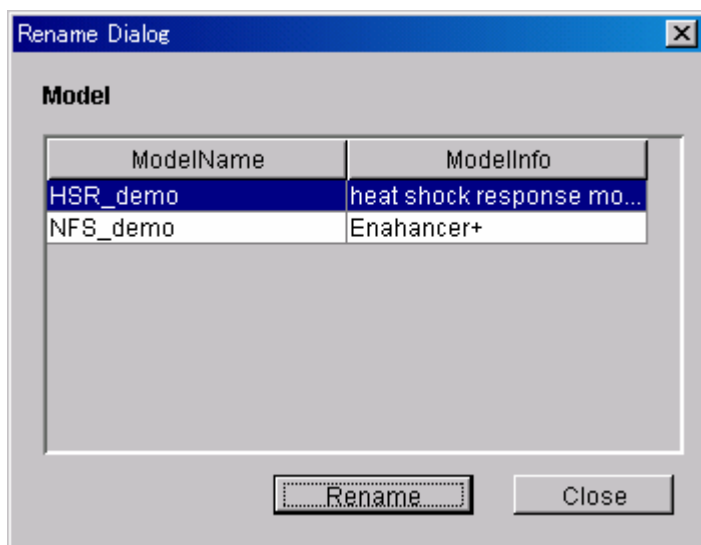
Network 情報を別の ModelName として保存することができます。

入力内容は ModelName、ModelInfo です。

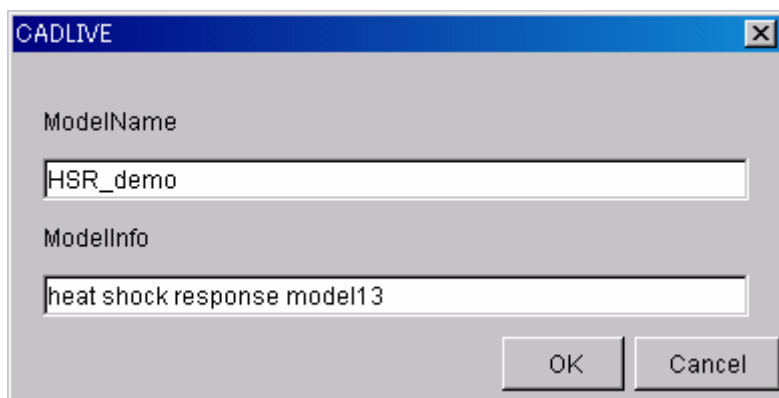
Save と同様に Species や Reaction のチェックを行います。



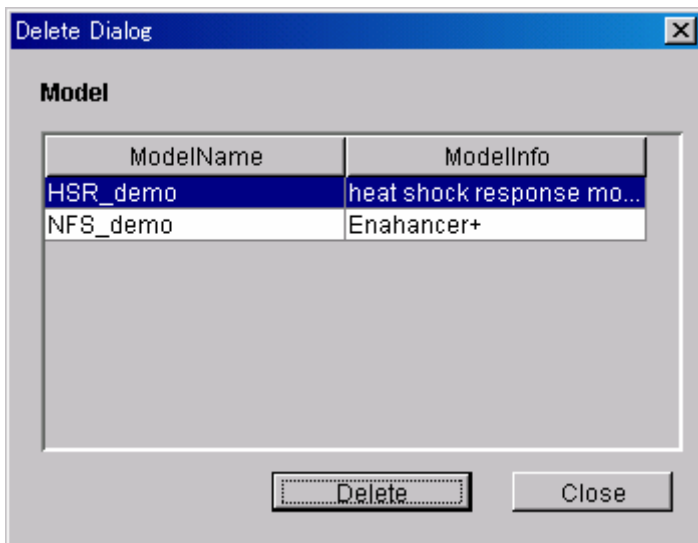
11-1-5 Rename



名称変更画面が表示され、名称変更したいモデルをスプレッドシートから選択し、「Rename」ボタンを押下することで ModelName、ModelInfo を変更できます。

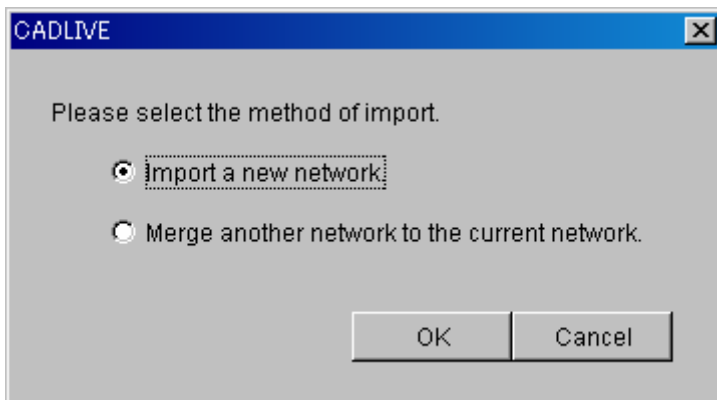


11-1-6 Delete



削除画面が表示され、削除したいモデルをスプレッドシートから選択し、「Delete」ボタンを押下することで、モデルを削除することができます。

11-1-7 Import

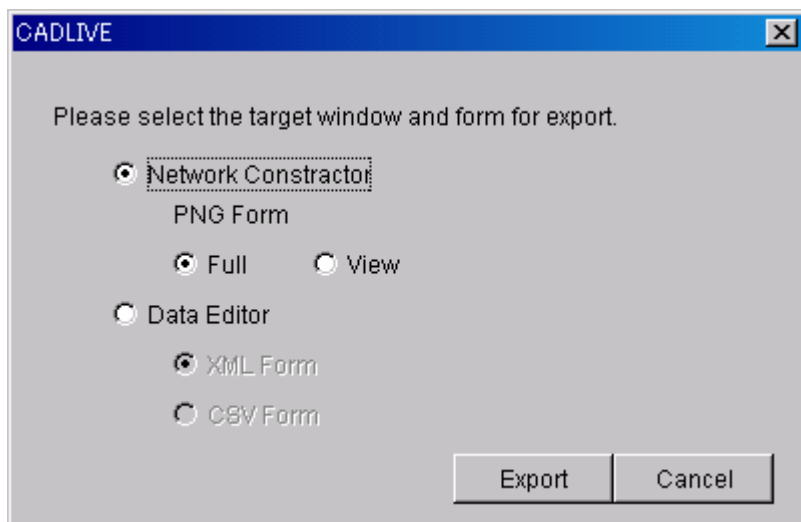


現在起動している CADLIVE とは別の CADLIVE で作成した XML ファイルをダイアログで選択して取り込みます。

- ・ Import a new network : 新規に XML ファイルを読み込みます。
- ・ Merge another network to the current network : 現在編集中的ネットワークに指定した XML ファイルの内容を追加します。

*TextEditor で作成・編集されたデータを Import することはできません。

11-1-8 Export



NetworkConstructor の

Panel を PNG 画像として出力します。

Full : NetworkConstructor の Panel 部分全体を PNG 画像として出力します。

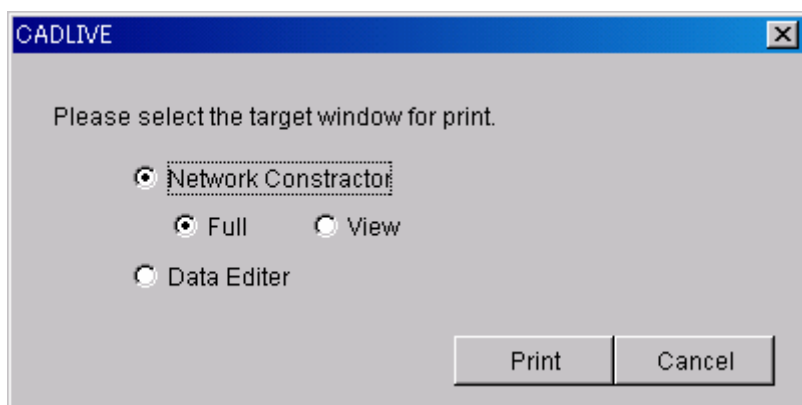
View : NetworkConstructor の Panel の表示されている部分を PNG 画像として出力します。

DataEditor に表示されている Network の Species 情報と Reaction 情報を指定した形式で指定した場所へ出力します。

XML Form : XML 形式で保存します。

CSV Form : CSV 形式 (カンマ区切りテキスト形式) で保存します。

11-1-9 Print



- NetworkConstructor 画面の印刷

Full : NetworkConstructor の Panel 部分全体を一枚に印刷します。

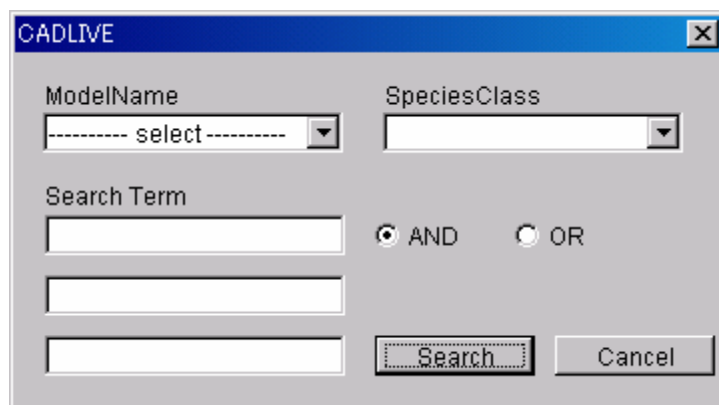
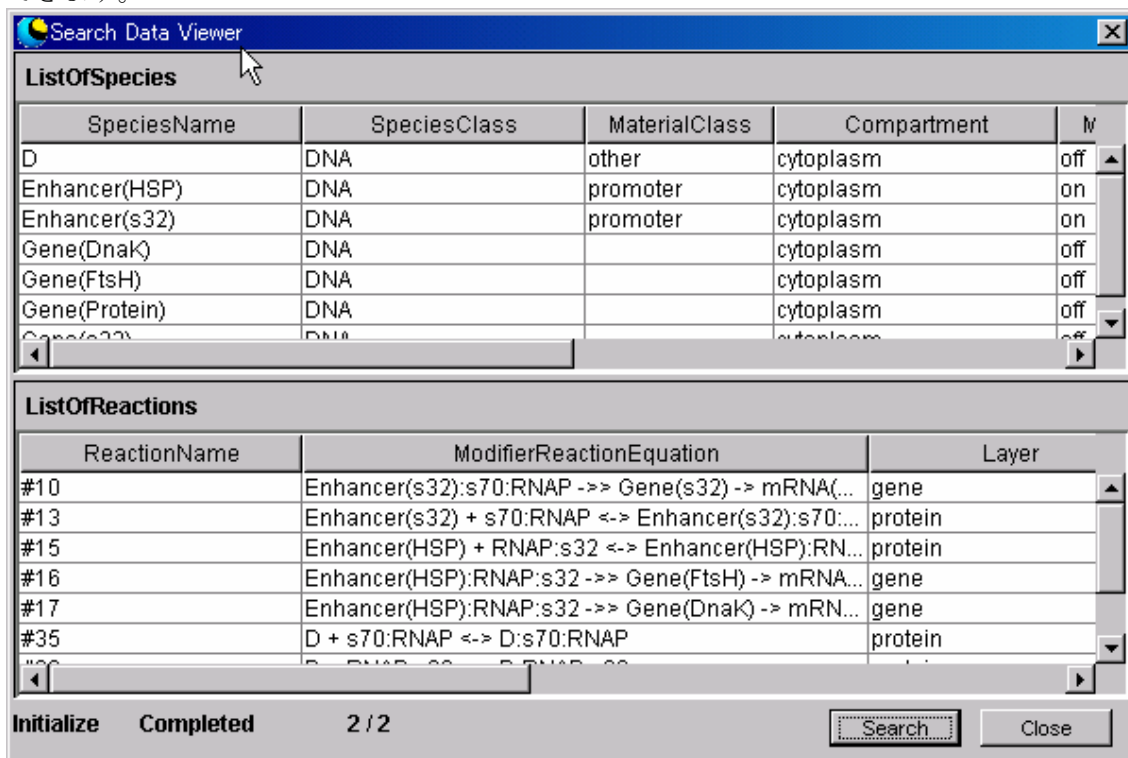
View : NetworkConstructor の Panel の表示されている部分を一枚に印刷します。

- DataEditor 画面の印刷

DataEditor のスプレッドシート部分を印刷します。

11-1-10 Search

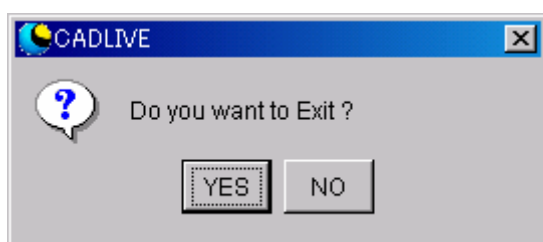
SearchDataViewer 上の Search ボタンを押すことで Search ダイアログを表示することができます。



- **ModelName**
検索対象の ModelName を選択します。
- **SpeciesClass**
検索対象の Species の SpeciesClass を選択します。
- **SearchTerm**
検索対象文字列を 3 つまで入力できます。

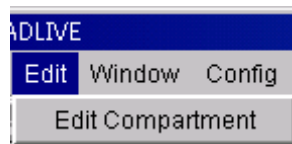
- And/Or ラジオボタン
SearchTerm で入力した文字列を And 条件で検索するか Or 条件で検索するかを選択します。
- Search ボタン
XML 上のネットワークから入力した条件に適合する Reaction、Species を検索し、SearchedReaction、SearchedSpecies の各スプレッドシートに表示します。

11-1-11 Exit

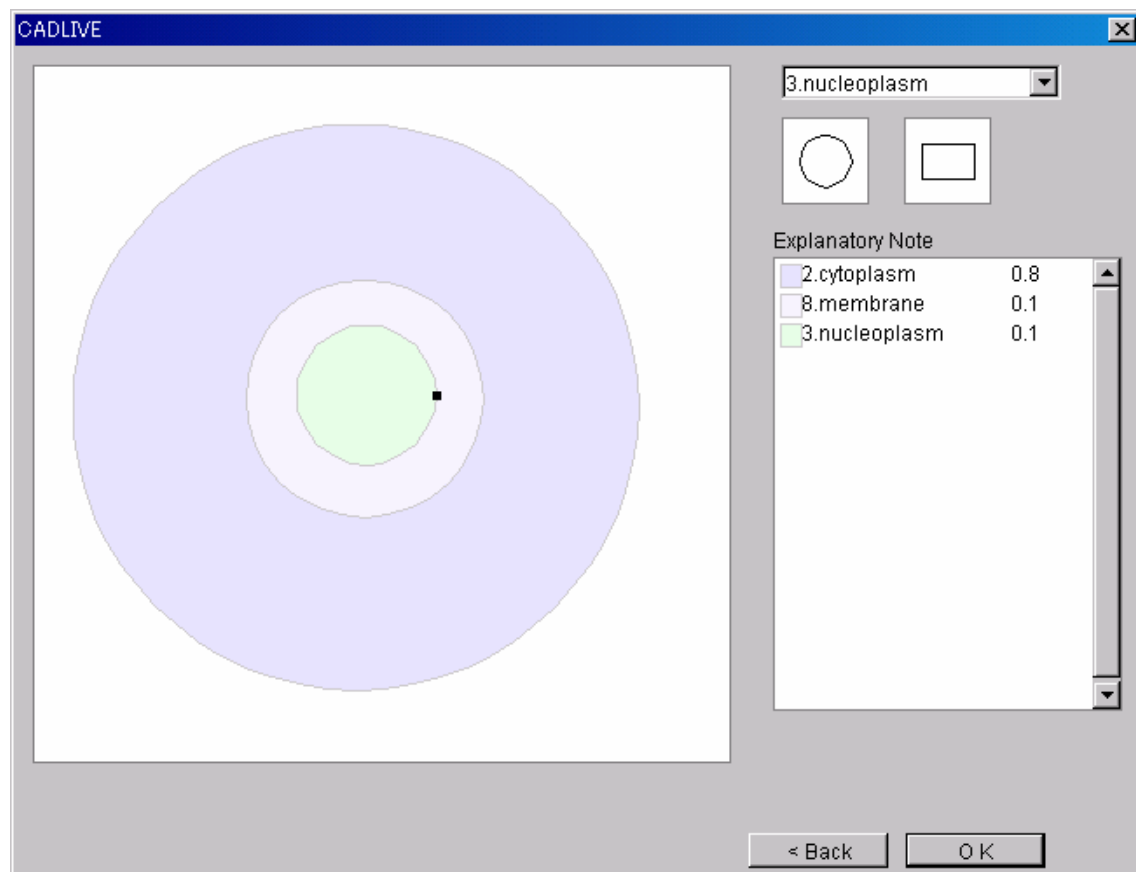


CADLIVE SYSTEM を終了します。

11-2 Edit メニュー

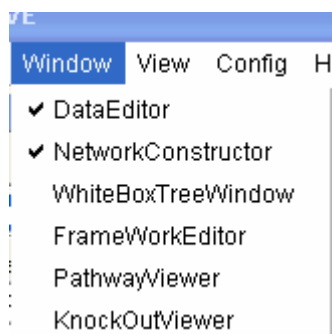


11-2-1 EditCompartment



Compartment を再編集するための Window が表示されます。

11-3 Window メニュー



11-3-1 DataEditor

DataEditor 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

11-3-2 NetworkConstructor

NetworkConstructor 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

10-3-3 WhiteBoxTreeWindow

WhiteBoxTreeWindow 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

11-3-4 FrameworkEditor

FrameworkEditor 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

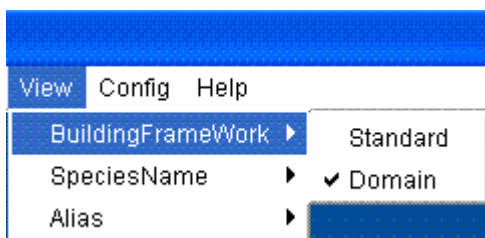
11-3-5 PathwayViewer

PathwayViewer 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

11-3-6 KnockOutViewer

KnockOutViewer 画面を表示時には非表示に、非表示時には表示します。表示時にはチェックマークが表示されます。

11-4 Viewメニュー

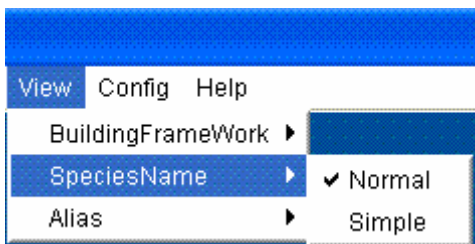


11-4-1 Standard

BuildingFramework に特有のシンボル (VirtualReaction、VirtualNode、Domain、InnerLink) を画面に表示しないモードです。これらのシンボルを NetworkConstructor に追加すると自動的に Domain モードに切り替わります。

11-4-2 Domain

全てのシンボルを表示します。



11-4-3 Normal

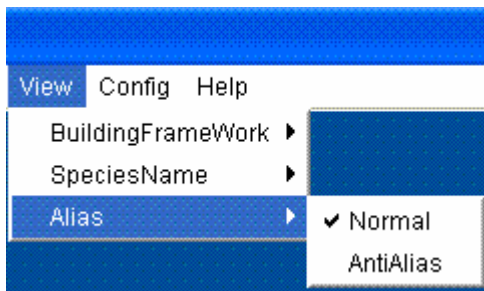
Complex 及び Modified の SpeciesName を通常表記します。

11-4-4 Simple

Complex 及び Modified の SpeciesName を略称表記します。

※簡略表記対象は、SpeciesClass が Complex、Modified、ModifierComplex (ExchangeComplex・ExchangeModified を含む) の Species です。Complex(:)は「%」で、Modified(-)は「*」で区切られます。Species に stoichiometry が付く場合で、Species 名が「:」「-」「%」「*」を含んでいる時は、その Species 名を () で括って表記されません。

(例 : $3A\%2\% \rightarrow (A\%2\)\%3\%$ 、 $3A:B \leftrightarrow (A:B) \%3\%$)



11-4-5 Normal

通常状態で画像を表示します。

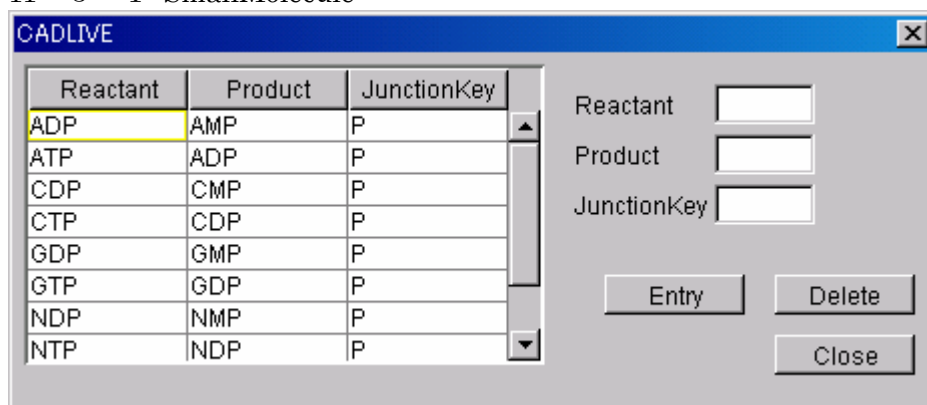
11-4-6 AntiAlias

アンチエイリアス処理することでより鮮明な画像を表示します。

11-5 Config メニュー



11-5-1 SmallMolecule



homo_association_wih_stoichimetric_change 反応に SmallMoleculeOption を付加したときに表示される Species と JunctionKey を設定します。

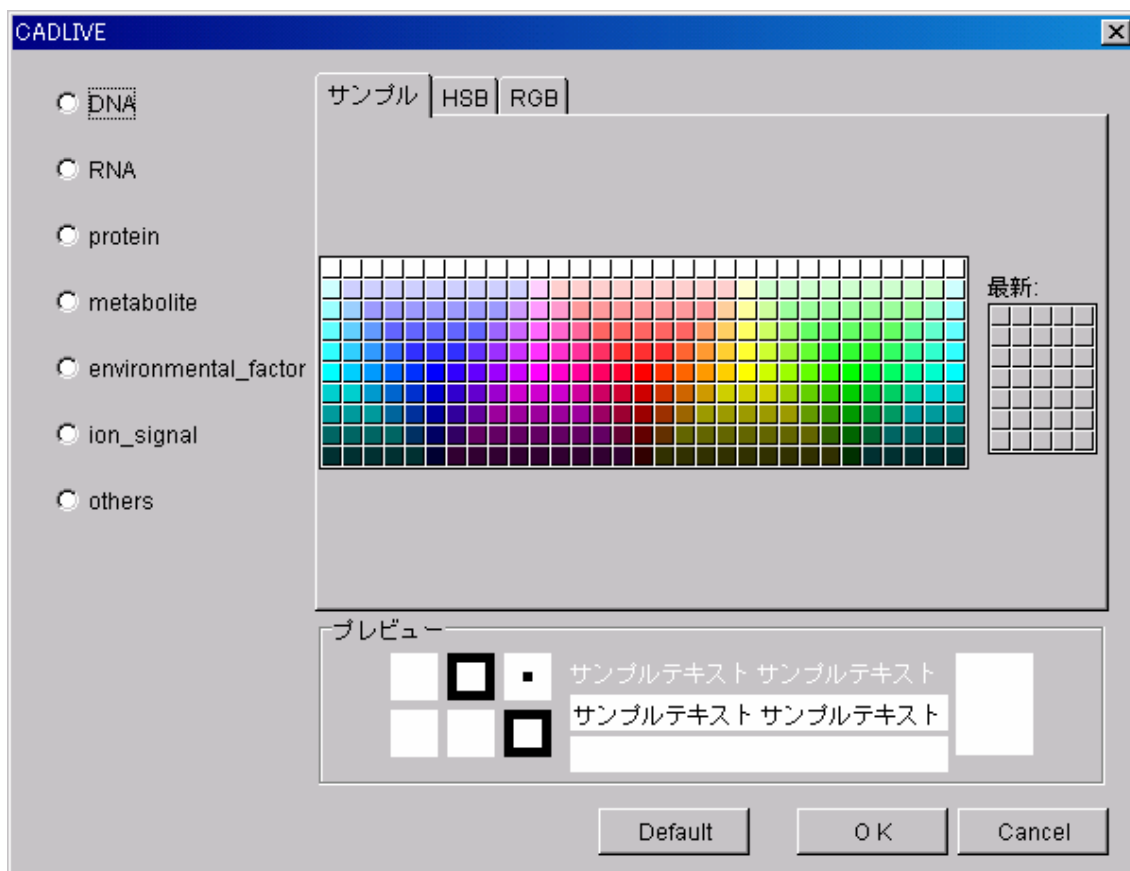
・設定方法

Reactant、Product、JunctionKey のそれぞれのテキストボックスに文字列を入力し Entry ボタンを押します。

・削除方法

表示されている Species と JunctionKey を選択し、Delete ボタンを押します。

11-5-2 SymbolColor



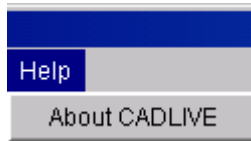
Species の表示色を変更することができます。

・設定方法

左欄から設定したい Species を選択し、右欄で設定したい色を選んで OK ボタンで確定します。複数の Species の色を同時に設定することも可能です。

左欄で設定したい Species を選択し Default ボタンを押すと初期色に設定することができます。

11-6 Help メニュー



11-6-1 About CADLIVE

CADLIVE のバージョン情報を表示します。

