

CADLIVE Ver.2.15

操作説明書

目次

1 . CADLIVE.....	3
2 . 動作環境	4
3 . インストール方法	5
3 - 1 CADLIVE のインストール.....	5
4 . 起動方法.....	6
4 - 1 CADLIVE の起動.....	6
4 - 2 新規ネットワーク作成.....	7
4 - 3 既存ネットワークのロード.....	10
5 . Network Constructor	11
5 - 1 Network Constructor 上の各オブジェクトの説明	11
5 - 1 - 1 パネル.....	11
5 - 1 - 2 Specie パレット.....	11
5 - 1 - 3 Reaction パレット.....	11
5 - 1 - 4 Modifier パレット	11
5 - 1 - 5 Gene パレット.....	12
5 - 1 - 6 Compartment 表示ボックス.....	12
5 - 1 - 7 Synchronize ボタン.....	12
5 - 1 - 8 Edit Compartment ボタン	12
5 - 1 - 9 Expand ボタン.....	13
5 - 1 - 10 Zoom Out ボタン.....	13
5 - 1 - 11 Zoom In ボタン	14
5 - 1 - 12 Zoom 倍率表示ボックス	14
5 - 2 Symbol の配置.....	15
5 - 2 - 1 Specie の配置	15
5 - 2 - 2 Reaction の配置.....	16
5 - 2 - 3 Modifier の配置	17
5 - 2 - 4 Gene の配置	18
5 - 2 - 5 Option の配置.....	18
5 - 3 Symbol の移動.....	21
5 - 3 - 1 Specie の移動	21
5 - 3 - 2 Reaction の移動.....	21
5 - 3 - 3 Modifier の移動.....	21
5 - 3 - 4 Gene の移動	21
5 - 3 - 5 Symbol の折り曲げ.....	21
5 - 4 Symbol の削除	22
5 - 4 - 1 Specie の削除	22
5 - 4 - 2 Reaction の削除.....	22
5 - 4 - 3 Modifier の削除.....	22
5 - 4 - 4 Gene の削除	23
5 - 5 Symbol の結合	23

5 - 5 - 1 Reaction、Modifier と Specie の結合	23
5 - 5 - 2 Gene と Specie の結合	23
5 - 5 - 3 Modifier と Reaction の結合	24
6 . Data Editor	25
6 - 1 DataEditor 上のオブジェクトの説明	25
6 - 1 - 1 Specie スプレッドシート	25
6 - 1 - 2 Reaction スプレッドシート	25
6 - 1 - 3 Save ボタン	25
6 - 2 Specie 項目の説明	26
6 - 3 Reaction 項目の説明	28
7 . Menu 項目の説明	30
7 - 1 File メニュー	30
7 - 1 - 1 New	30
7 - 1 - 2 Open	30
7 - 1 - 3 Save	30
7 - 1 - 4 SaveAs	30
7 - 1 - 5 Import	31
7 - 1 - 6 Export	31
7 - 1 - 7 Print	32
7 - 1 - 8 Search	32
7 - 1 - 9 Exit	33
7 - 2 Edit メニュー	34
7 - 2 - 1 EditCompartment	34
7 - 3 Window メニュー	34
7 - 3 - 1 DataEditor	34
7 - 3 - 2 NetworkConstructor	35
7 - 4 Config メニュー	35
7 - 4 - 1 SmallMolecule	35
7 - 4 - 2 SymbolColor	36
7 - 5 Help メニュー	37
7 - 5 - 1 About CADLIVE	37

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。GUI では Kohn の記法を元に開発した Symbol を接続させることでネットワーク図を描画します。またデータベースには XML を用いており SBML を拡張した形式の SANAC 形式でデータを保存します。

2 . 動作環境

ハードウェア構成

CPU : Pentium3 500MHz 以上
Memory : 128MB 以上 (256MB 以上推奨)
HDD : 1Gb 以上推奨

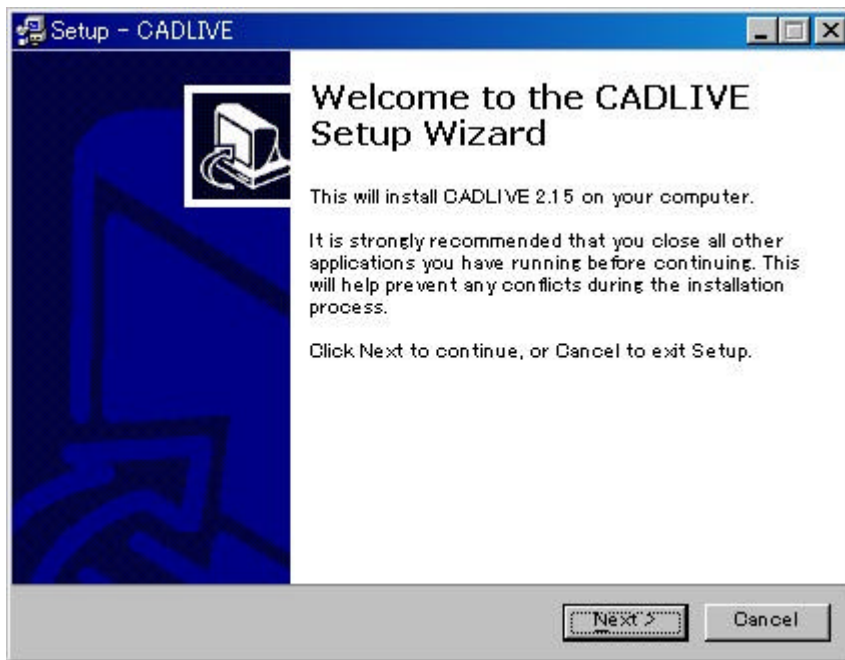
ソフトウェア構成

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

cadlive2.15.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。

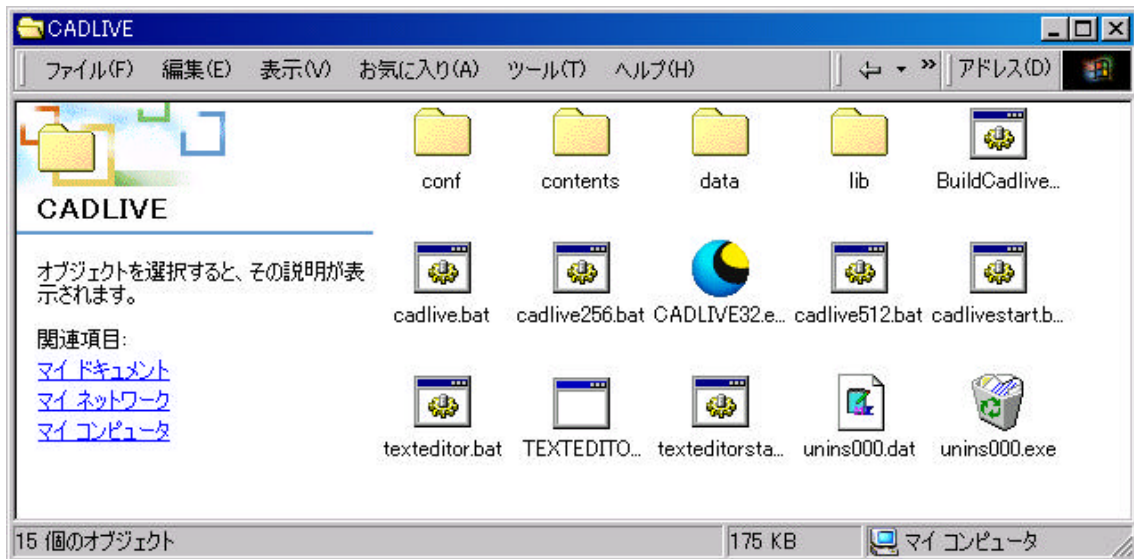


CADLIVE のアンインストールを行う時は、インストールされたディレクトリ上の unins000.exe をダブルクリックしてください。
アンインストール時には、インストール時に存在したファイルは全て削除されます。アンインストールを実行するとネットワークデータも全て削除されてしまいますので、ネットワークデータが必要な場合には、必ずバックアップを別のディレクトリに保存した上でアンインストールを実行してください。

4．起動方法

4 - 1 CADLIVE の起動

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。

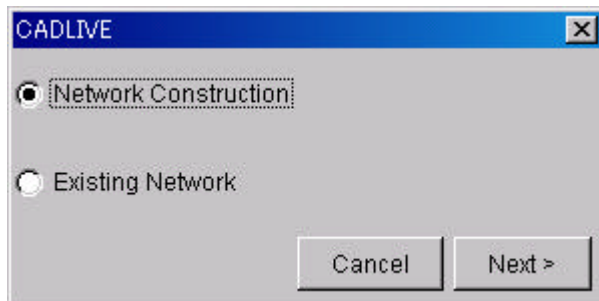


起動画面



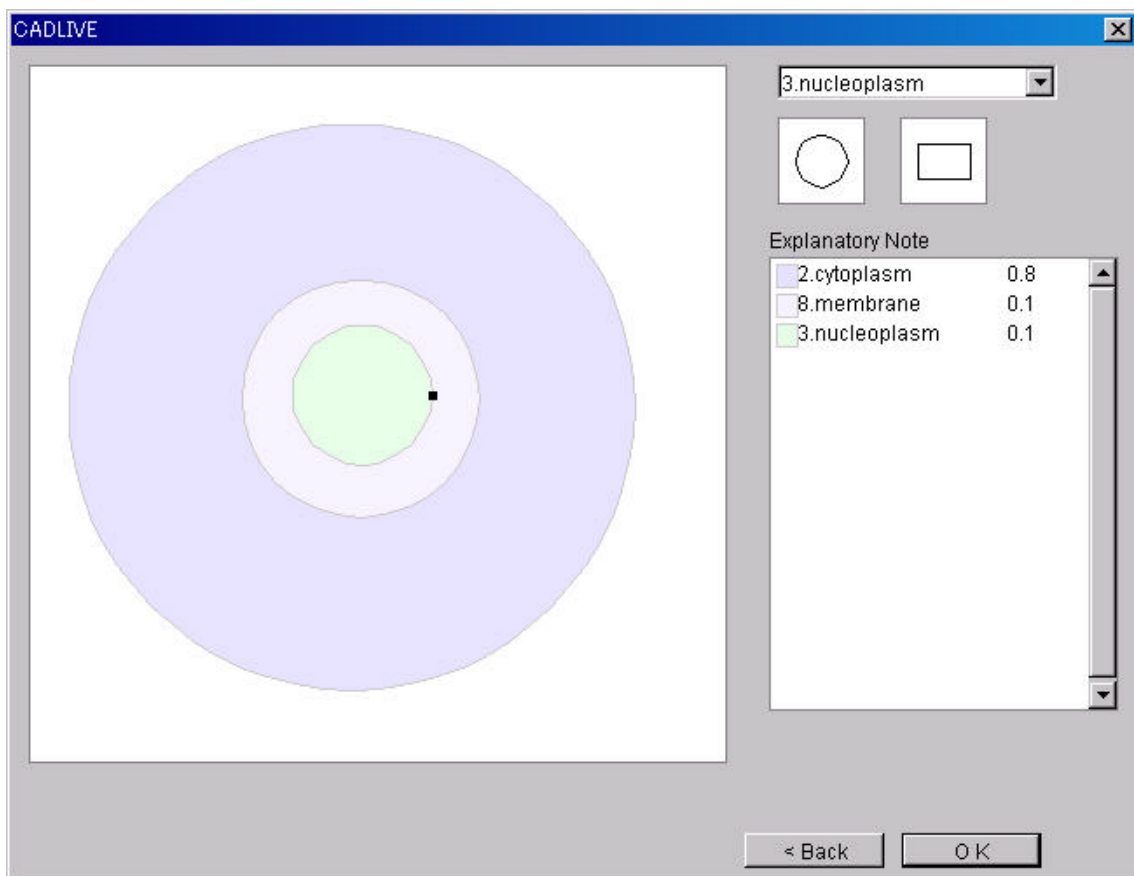
4 - 2 新規ネットワーク作成

- 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。

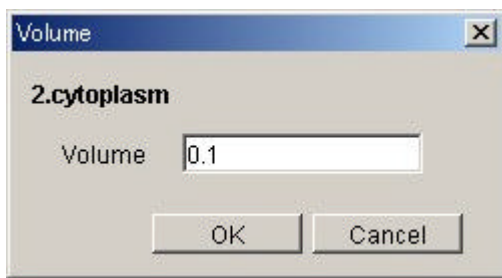
*オブジェクトをドラッグすることによりオブジェクトを配置する場所の移動が可能です。

*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



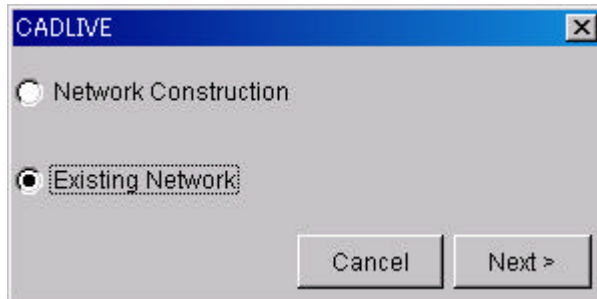
Compartment の Volume を定義する場合は、指定する Compartment を選択し、右クリックメニューから Volume をクリックしてください。
図のダイアログ中の Volume 欄に数値を入力し、[OK]ボタンをクリックして下さい。

*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。

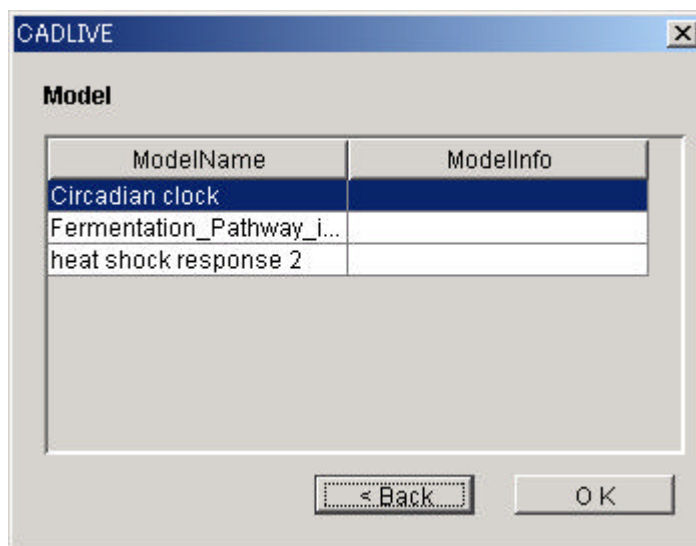
4 - 3 既存ネットワークのロード

- 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

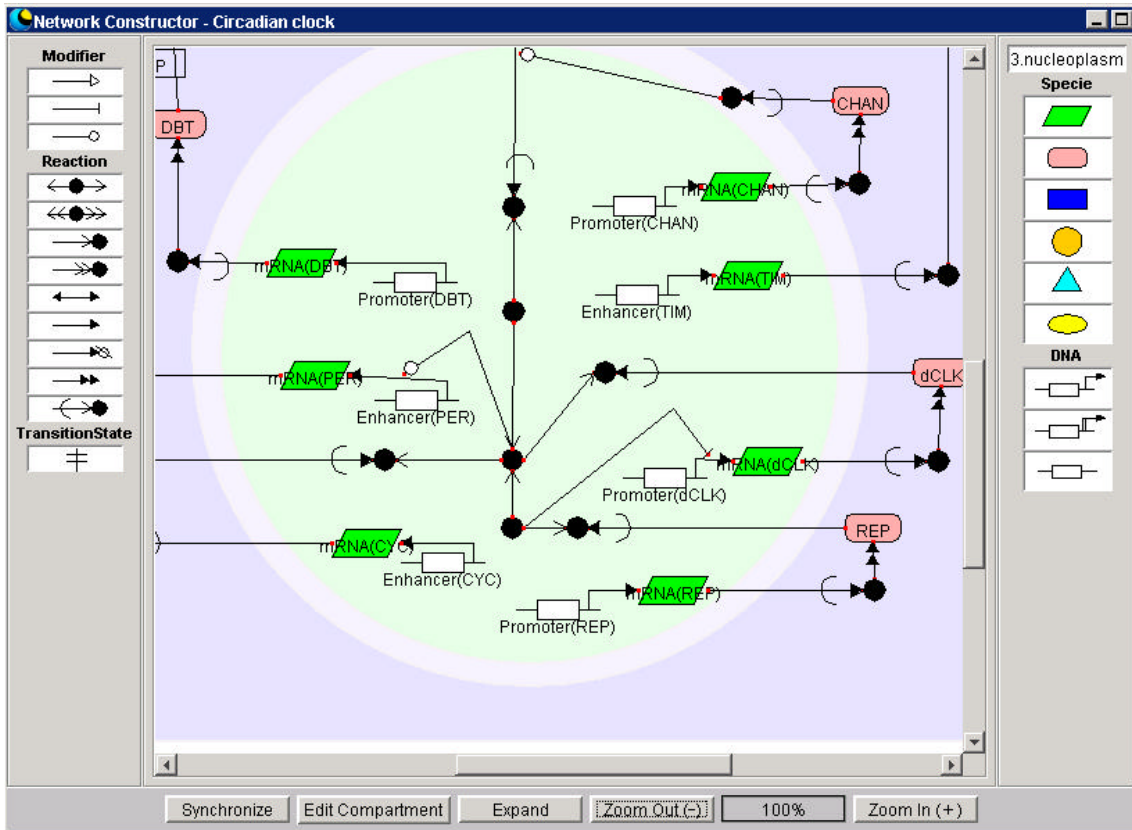


ModelName と ModelInfo が一覧表示されます。
ロードするネットワークの ModelName を選択し、[OK] ボタンをクリックして下さい。

*TextEdit 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 Specie 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 - 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、transition_state、degradation、transport、translation を配置するためのパレットです。

5 - 1 - 4 Modifier パレット

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

5 - 1 - 5 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 - 6 Compartment 表示ボックス

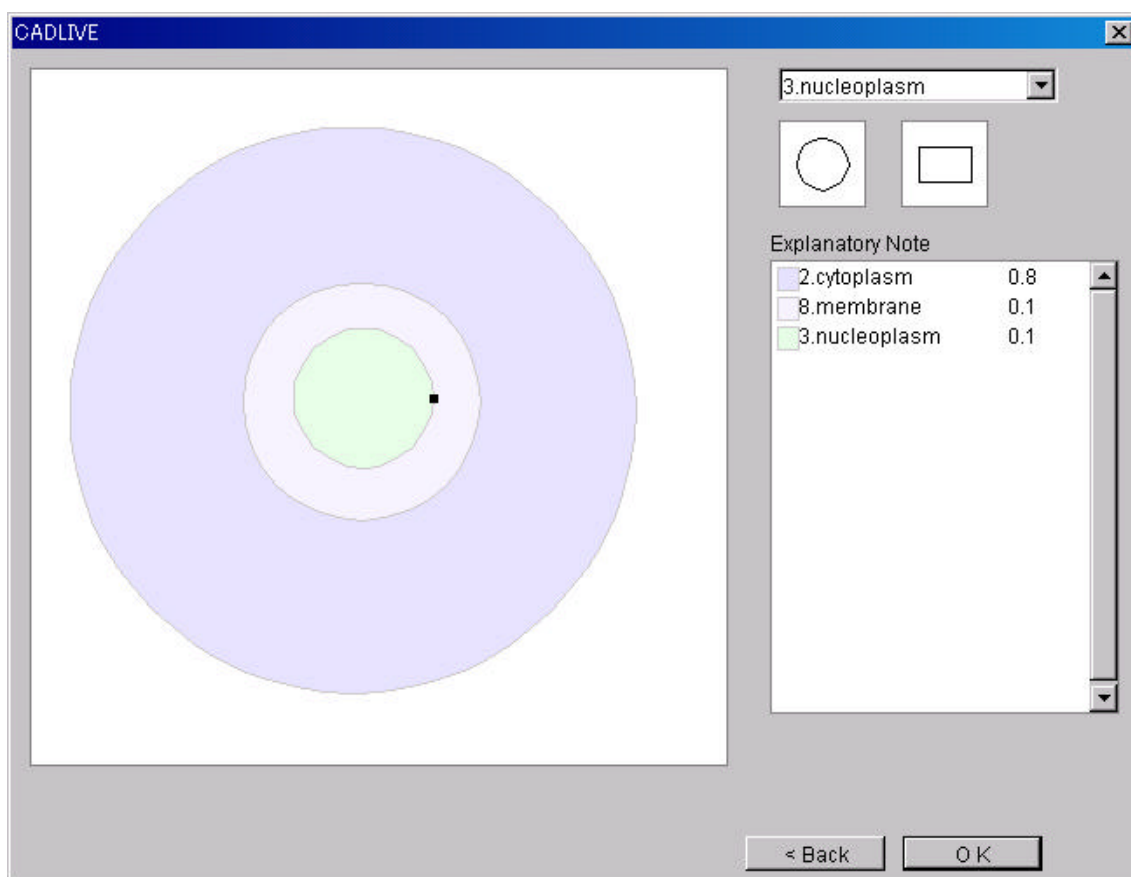
パネル上のマウスが存在するポイントの Compartment を表示します。

5 - 1 - 7 Synchronize ボタン

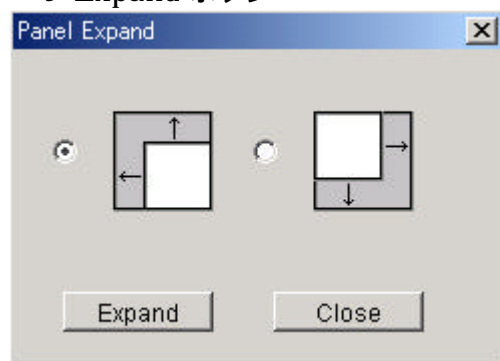
Network Constructor 上の情報を他の Window に同期させます。

5 - 1 - 8 Edit Compartment ボタン

Compartment を再編集するための Window が表示されます。

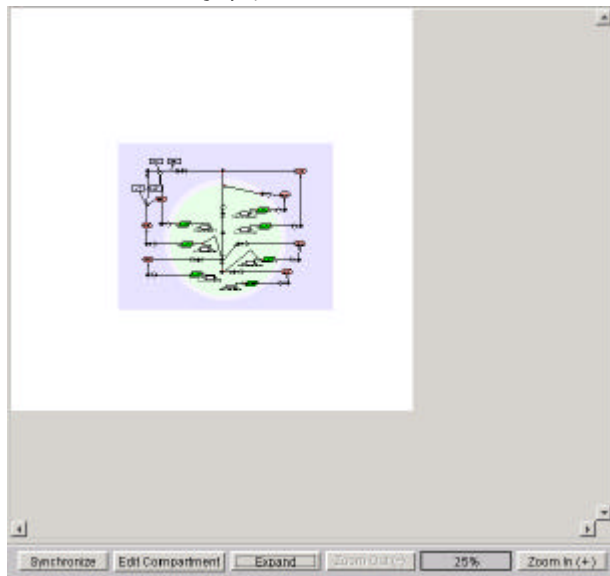


5 - 1 - 9 Expand ボタン



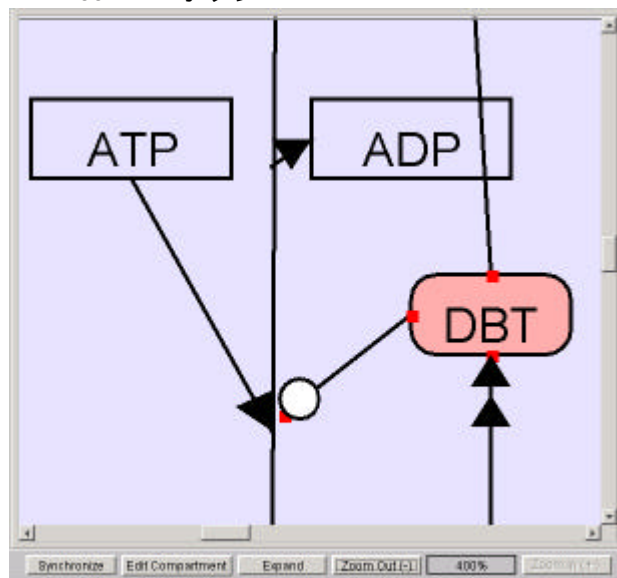
Panel の描画領域を左上方向、または右下方向に拡大します。
拡大された領域は environment となります。

5 - 1 - 10 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 - 11 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 - 12 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 Specie の配置

Specie 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。

・ Specie の配置

Specie パレット上の配置する Specie 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 Specie がパネル上に配置されます。
Specie を配置したタイミングで Data Editor の Specie スプレッドシートに配置した Specie 情報が表示されます。

Specie		
	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 Reaction](#))
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 Reaction](#)) 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 - 7 参照](#)) を用いて配置して下さい。

small_molecule 細胞内小分子を表現します

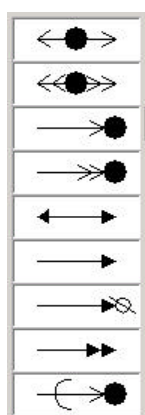
* small_molecule は Reaction の Option ([5 - 2 - 7 参照](#)) を用いて配置し
て下さい。

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。

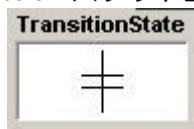
・ Reaction の配置

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 Specie 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。

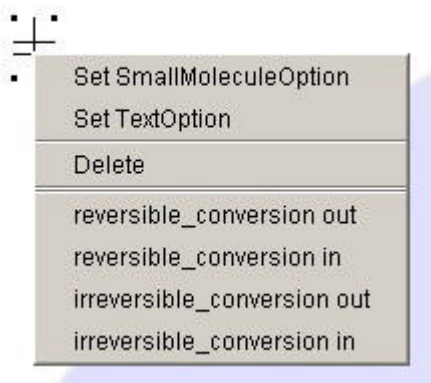


binding	複合体を形成する反応を表現します
binding_with_stoichiometric_changes	化学結合を伴う複合体を形成する反応を表現します
homo_association_or_modification	同一分子の重合を表現します
homo_association_or_modification_with_stoichiometric_changes	小分子の付加反応を表現します
reversible_conversion	可逆反応を表現します
irreversible_conversion	不可逆反応を表現します
degradation	分解反応を表現します
translation	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 Specie 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 - 7 参照) を用いて配置してください	
reversible_conversion_regarding_multicompornent	複数要素からなる可逆反応を表現します
irreversible_conversion_regarding_multicompornent	複数要素からなる不可逆反応を表現します
*reversible_conversion_regarding_multicompornent	、
irreversible_conversion_regarding_multicompornent	は
transition_state を用いて配置して下さい。	

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。

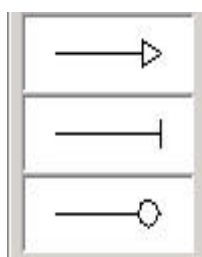
5 - 2 - 3 Modifier の配置

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、Specie 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

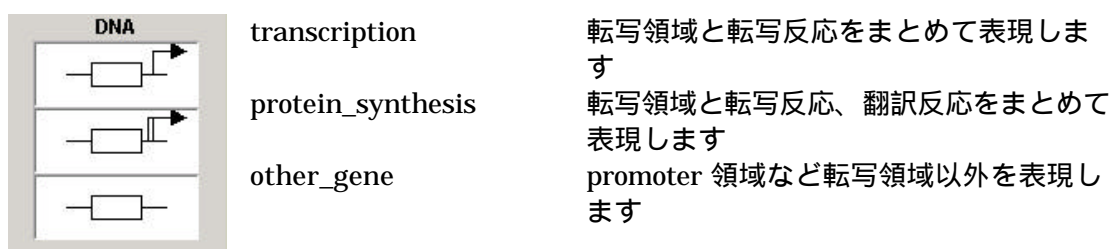
*enzyme は protein、complex、modified にのみ接続することができます。

5 - 2 - 4 Gene の配置

Gene は DNA としての Specie 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。



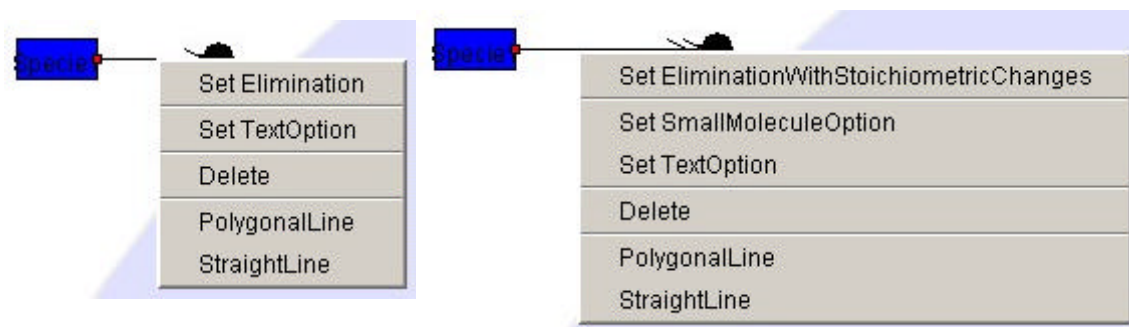
*transcription は RNA のみに接続します。

*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 Specie として登録され、transcription、translation が Reaction として登録されます。

5 - 2 - 5 Option の配置

・ elimination、elimination_with_stoichiometric_changes の配置

homo_association_or_modification または
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。

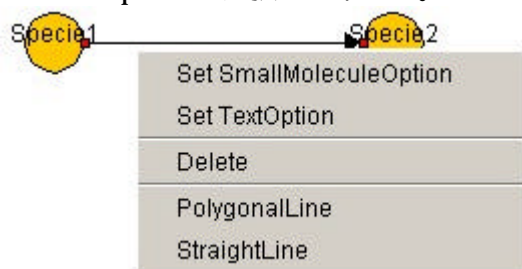


・ Text Option の配置

Text Option 配置可能な Reaction

(binding, binding_with_stoichiometric_changes, homo_association_or_modification, 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、) を右クリックし、

SetTextOption を選択して下さい。



TextOptionDialog に従って Option 情報を入力してください。

*Reactant は TextOption を付加する Reaction の Reactant 側の Specie 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 Specie 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。)

*Specie は TextOption で付加する Specie 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、

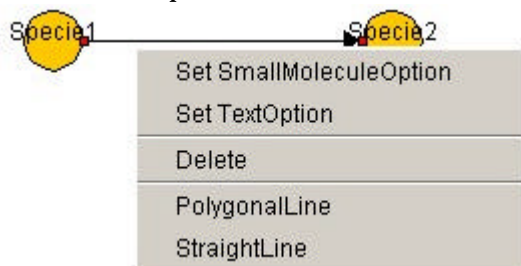
Homo_association_or_modification 及び

Homo_association_or_modification では常に "+" となり、 Elimination 及び

Elimination_with_stoichiometric_changes では常に "-" となります。

TextOptionSpecie 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 SpecieName として登録されます。

・ Small Molecule Option の配置

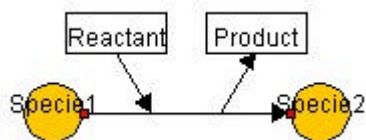


Small Molecule Option 配置可能な Reaction を右クリックし、SetSmallMoleculeOption を選択して下さい。

ReversibleConversion、 IrreversibleConversion、 TranstionState、 reversible_conversion_regarding_multi_component

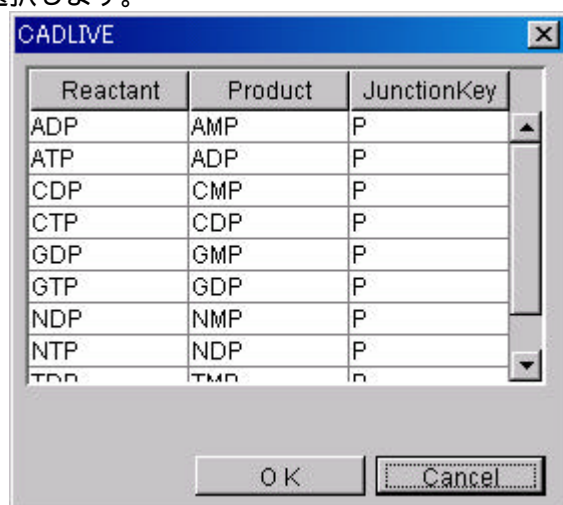
irreversible_conversion_regarding_multi_component

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_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。



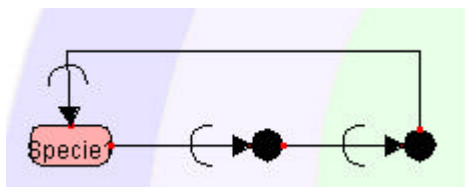
JunctionKey の部分が Modified に付加される物質となります。

- 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 Specie 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 - 3 Symbol の移動

5 - 3 - 1 Specie の移動

Specie の Symbol の表示部分をドラッグすることで Specie 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 Specie に準じるものとなります。Specie に接続している Reaction は、接続先 Specie の移動に伴って移動します。

5 - 3 - 3 Modifier の移動

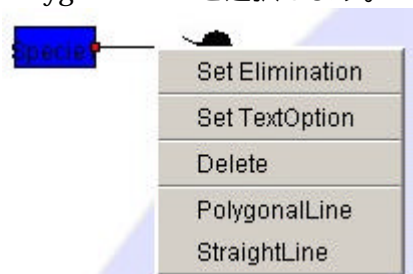
Modifier の片方の端点をドラッグすることにより、もう片方の端点を軸として回転、伸縮させることができます。Specie、Reaction、Modifier に接続している Modifier は、接続先 Symbol の移動に伴って移動します。

5 - 3 - 4 Gene の移動

Gene の Specie 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、Specie 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。Specie に接続している Gene の Reaction 部分は、接続先 Specie の移動に伴って移動します。

5 - 3 - 5 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。

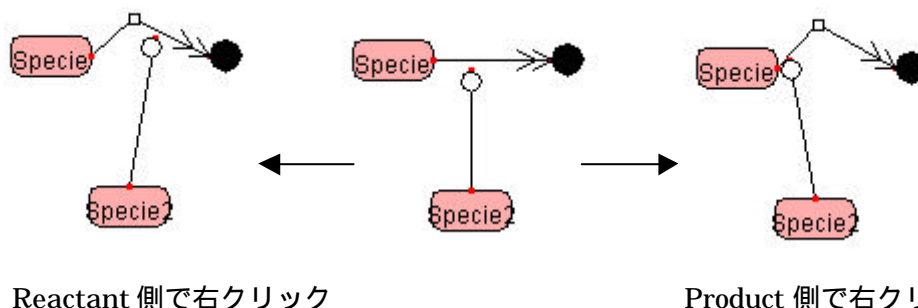


指定した線分の中央にハンドル()が表示されますのでそのハンドルをドラッグすることで折れ線の描画ができます。折れ線は最大 4 回までできます。



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 側に寄るという動作をします。



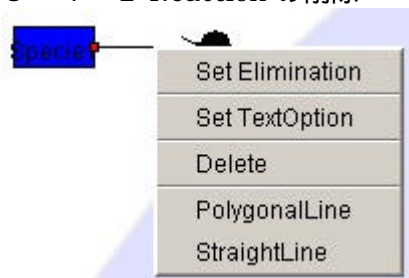
5 - 4 Symbol の削除

5 - 4 - 1 Specie の削除



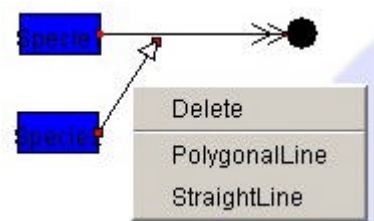
Specie の Symbol の表示部分を右クリックし、Delete を選択することで Specie を削除することができます。TextOption、SmallMoleculeOption の削除は Option を配置した Reaction の表示部分を右クリックし、DeleteTextOption または DeleteSmallMoleculeOption を選択することで配置した Option を削除することができます。また、Option を配置した Reaction を削除することにより、同時に Option も削除されます。

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。

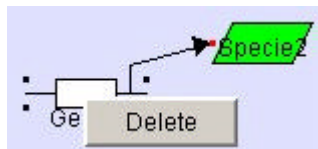
5 - 4 - 3 Modifier の削除



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

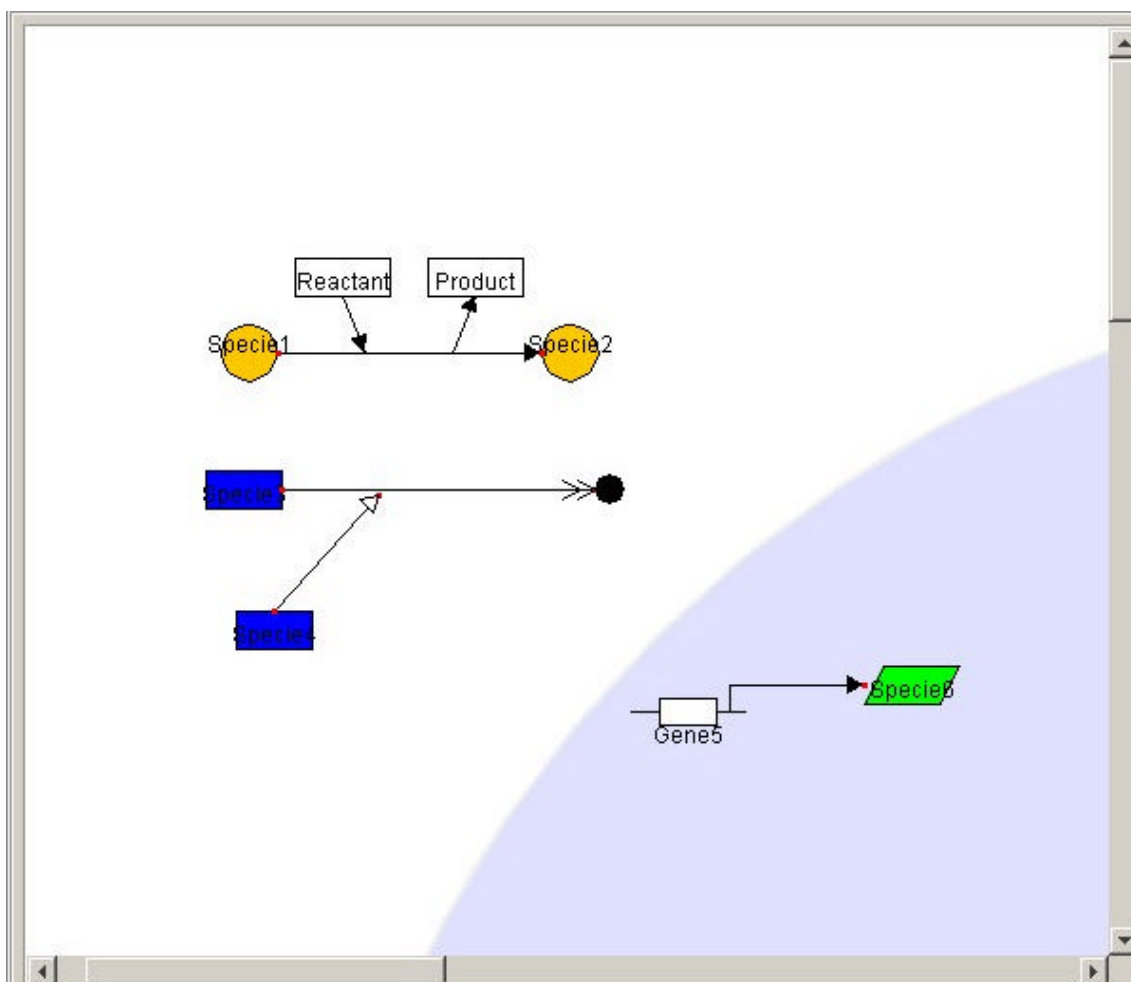
まず、両端が接続している場合は線上を右クリックし Delete を選択することで Modifier を削除することができます。

5 - 4 - 4 Gene の削除



Gene の Specie 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 - 5 Symbol の結合



5 - 5 - 1 Reaction、Modifier と Specie の結合

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

5 - 5 - 2 Gene と Specie の結合

Transcription、Protein_synthesis の端点を Specie の Symbol 上にドラッグすることにより

より、DNA(Transcription、 Protein_synthesis)と Specie 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。

6 . Data Editor

6 - 1 DataEditor 上のオブジェクトの説明

Data Editor - CellCycle01							
ListOfSpecies							
SpeciesName	SpeciesClass	BindingSite	Compartment	MassBalance	TotalAmount	Decomposition	InitialAmount
Bck2	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Cdc28	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Cln3	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Pcl1_Pcl2	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Pho85	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Cln1_Cln2	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Cln5_Cln6	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Mbp1	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Swi4	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Swi5	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Swi6	protein		cytoplasm	on	variable	on	
Cdc28.Cln3	complex		cytoplasm	on	variable	on	
Cdc28.Cln1_Cln2	complex		cytoplasm	on	variable	on	
ListOfReactions							
ReactionName	ModifierReactionEquation	Layer	ReactionType	IsConvertible	IsTotal		
#414	Swi4.Swi6-P(Swi6).SCB-->Gene(Cln1_Cln2)->m...	protein	transcription	true	true	Swi4.Swi6-P(Swi6)	
#416	Mbp1.Swi6-P(Swi6).MCB-->Gene(Cln5_Cln6)->m...	protein	transcription	true	true	Mbp1.Swi6-P(Swi6)	
#417	Bck2-->#416	protein	activation_of_modifier	false	true		
#418	Cdc28.Cln3-Q.Swi4.Swi6 + P(Swi6) = Swi4.Swi6-P(Swi6)	protein	homo_association_of...	false	true		
#419	Bck2-->#418	protein	activation_of_modifier	false	true		
#420	Cdc28.Cln3-Q.Mbp1.Swi6 + P(Swi6) = Mbp1.Swi6-P(Swi6)	protein	homo_association_of...	false	true		
#421	Met30.Skp1.Cdc34.Cdc53-Q.Cln1_Cln2-P + Ub = Cln1_Cln2	protein	homo_association_of...	true	true	Met30.Skp1.Cdc34	
#422	Cdc28.Cln1_Cln2-->Swi4.Swi6-P(Swi6) + Swi4.Swi6	protein	elimination_with_stoichi...	false	true		
#423	Cdc28.Apc1.Apc2.Cdc27.Apc4.Apc5.Cdc18.Cdc23.A...	protein	homo_association_of...	true	true	Cdc28.Apc1.Apc2	
#425	Cdc28.Cln1_Cln2-Q.Sic1 + P = Sic1-P	protein	homo_association_of...	true	true	Cdc28.Cln1_Cln2	
#424	Pcl1_Pcl2.Pho85-Q.Sic1 + P = Sic1-P	protein	homo_association_of...	true	true	Pcl1_Pcl2.Pho85	

6 - 1 - 1 Specie スプレッドシート

NetworkConstructor で配置した Specie 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、DataEditor 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 Specie 項目の説明

- SpecieName

配置した Specie 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 Specie には Complex の場合、A:B のように:で両端の SpecieName をつないだ名称が、Modified の場合、A-B のように-で両端の SpecieName をつないだ名称がつけられます。自動で生成した Specie 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。

- SpecieClass

NetworkConstructor で生成された Specie 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 Specie)

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 Specie)

small_molecule (小分子用オプションで生成した Specie)

others

- 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 Specie の場所属性を表示します。

environment

cytoplasm

nucleoplasm

ER

mitochondria

golgi

chloroplast

membrane

other

- 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

SpecieClass 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。

- 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

SpecieClass 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。

- 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

SpecieClass が RNA、Protein、Metabolite、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。

- InitialAmount

物質の初期値を数字で入力して下さい。

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 Specie、Modifier、ReactantReaction の Specie、Reaction、ProductReaction の Specie 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_multicompornent
irreversible_conversion_regarding_multicompornent
transport
option_transport
transcription
translation
degradation
activation_of_specie
inhibition_of_specie
activation_of_modifier
inhibition_of_modifier
- 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 量として扱う。

false : modifier を Total 量として扱わない。

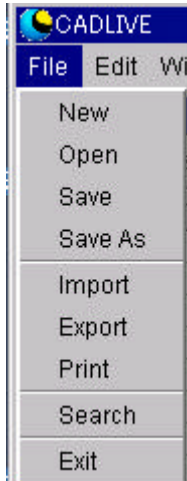
初期値 true が表示されます。セレクトボックスにより表示内容を変更できます。

- 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 . Menu 項目の説明

7 - 1 File メニュー



7 - 1 - 1 New

新規ネットワークを作成します。([4 - 2 参照](#))

7 - 1 - 2 Open

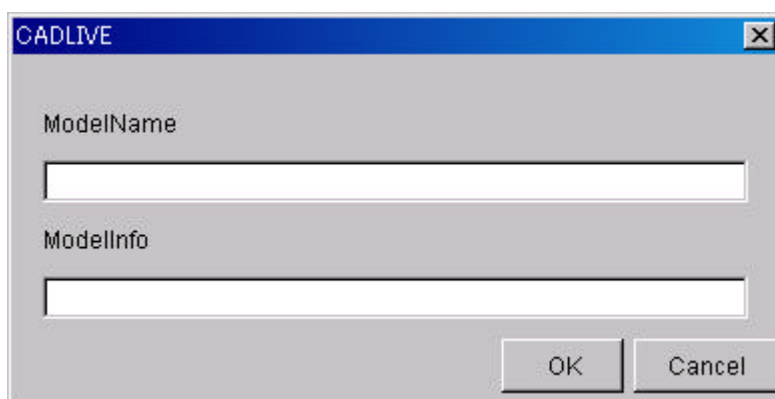
既存のネットワークをロードします。([4 - 3 参照](#))

7 - 1 - 3 Save

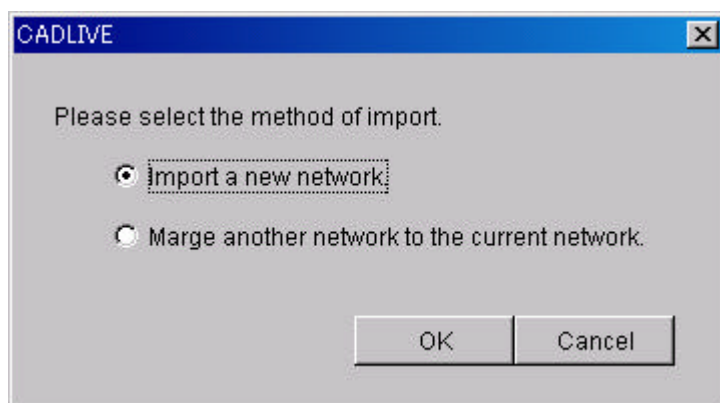
NetworkConstructor、DateEditor で作成、編集された Network 情報を XML に上書き保存します。新規でネットワークを作成した場合は、常に SaveAs として保存されます。

7 - 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。



7 - 1 - 5 Import

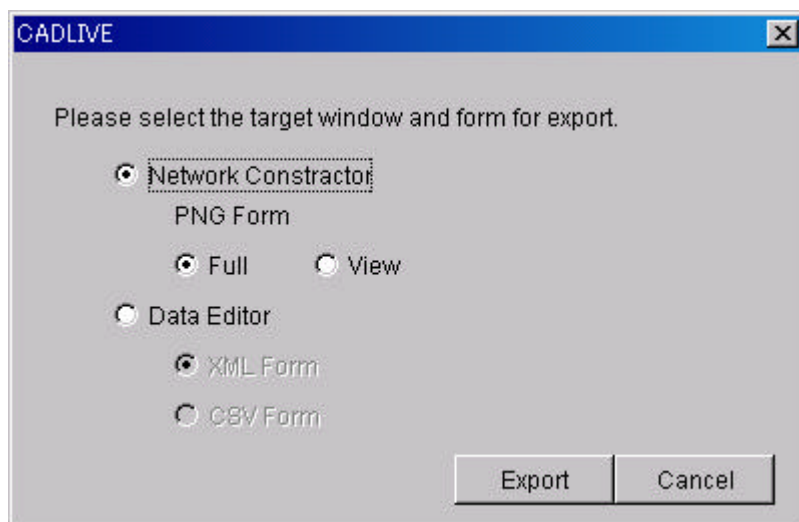


現在起動している CADLIVE とは別の CADLIVE で作成した XML ファイルをダイアログで選択して取り込みます。

- ・ 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 : 現在編集中的の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。

7 - 1 - 6 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。

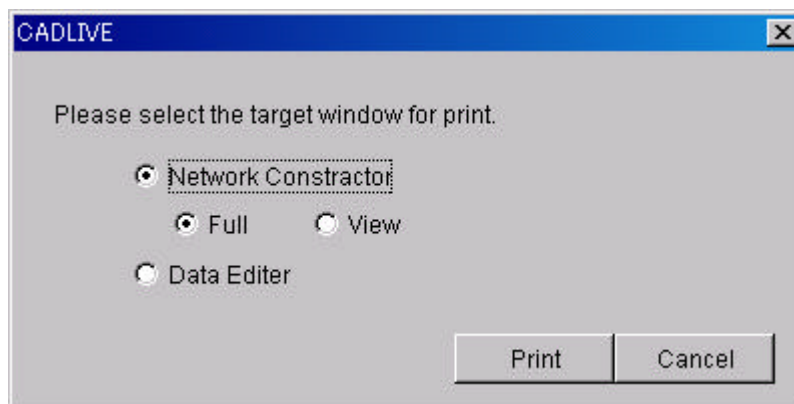
View : NetworkConstructor の Panel の表示されている部分を PNG 画像として出力します。

DataEditor に表示されている Network の Specie 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。

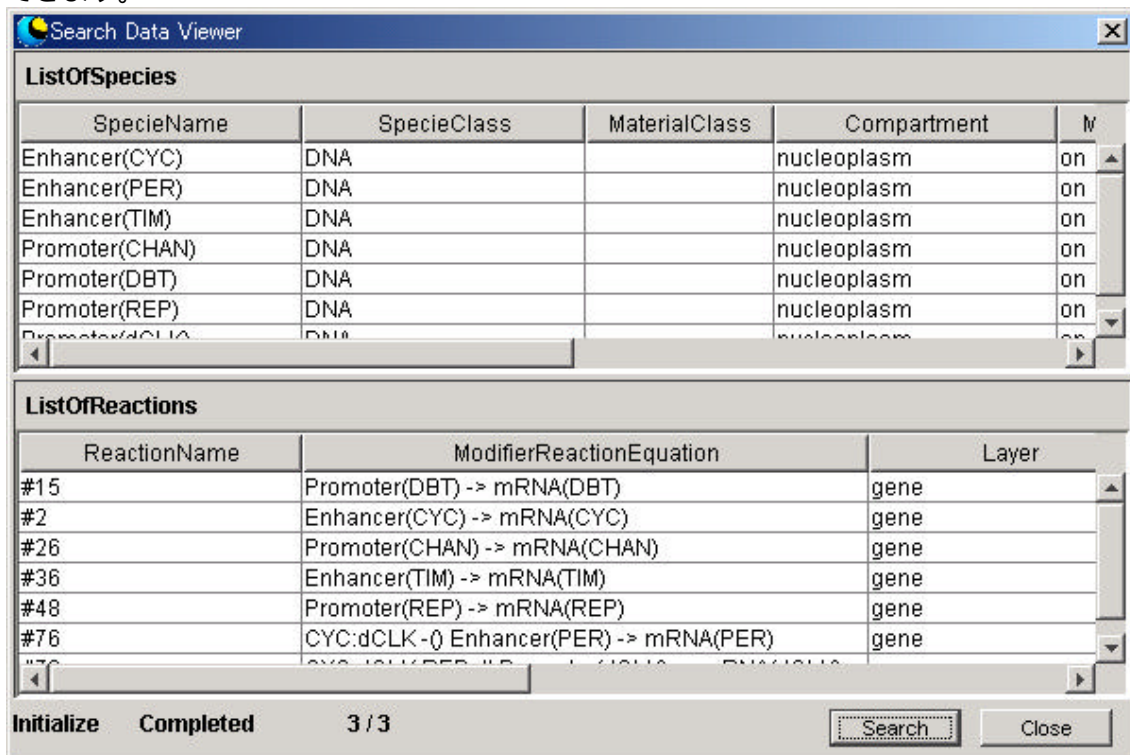
7 - 1 - 7 Print

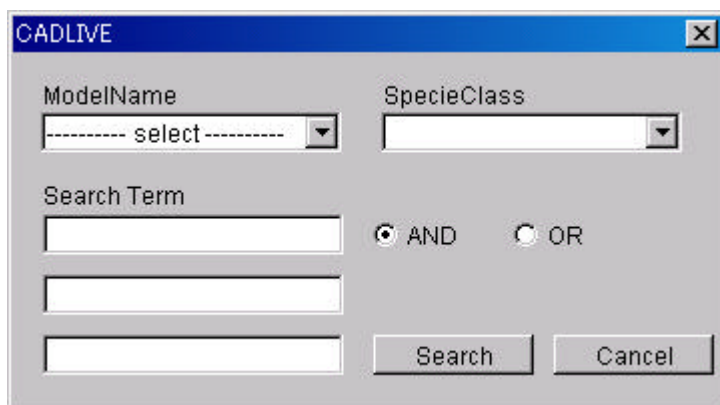


- NetworkConstructor 画面の印刷
Full : NetworkConstructor の Panel 部分全体を一枚に印刷します。
View: NetworkConstructor の Panel の表示されている部分を一枚に印刷します。
- DataEditor 画面の印刷
DataEditor のスプレッドシート部分を印刷します。

7 - 1 - 8 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。





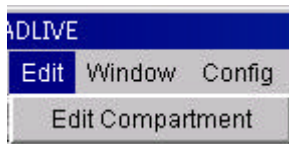
- ModelName
検索対象の ModelName を選択します。
- SpecieClass
検索対象の Specie の SpecieClass を選択します。入力しない場合はすべての SpecieClass が対象となります。
- SearchTerm
検索対象文字列を 3 つまで入力できます。
- And/Or ラジオボタン
SearchTerm で入力した文字列を And 条件で検索するか Or 条件で検索するかを選択します。
- Search ボタン
XML 上のネットワークから入力した条件に適合する Reaction、Specie を検索し、SearchedReaction、SearchedSpecie の各スプレッドシートに表示します。

7 - 1 - 9 Exit

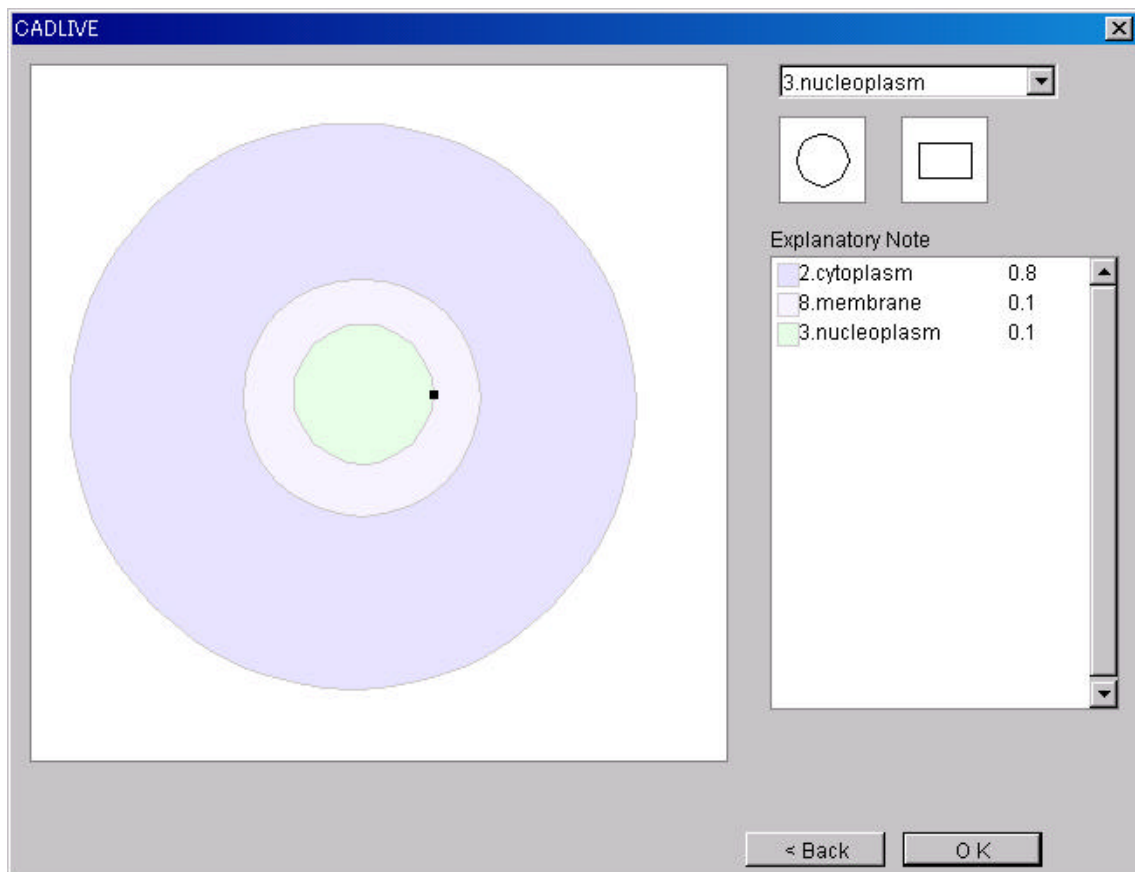


CADLIVE を終了します。

7 - 2 Edit メニュー

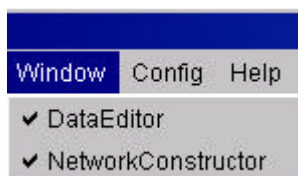


7 - 2 - 1 EditCompartment



Compartment を再編集するための Window が表示されます。

7 - 3 Window メニュー



7 - 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。

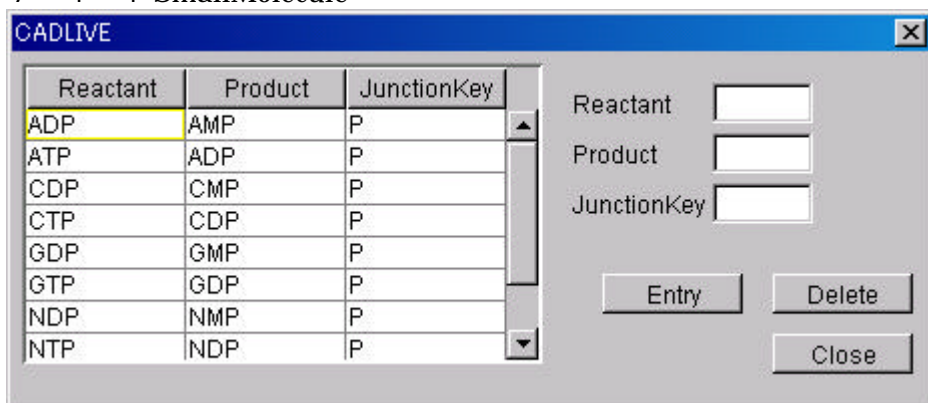
7 - 3 - 2 NetworkConstructor

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。

7 - 4 Config メニュー



7 - 4 - 1 SmallMolecule



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

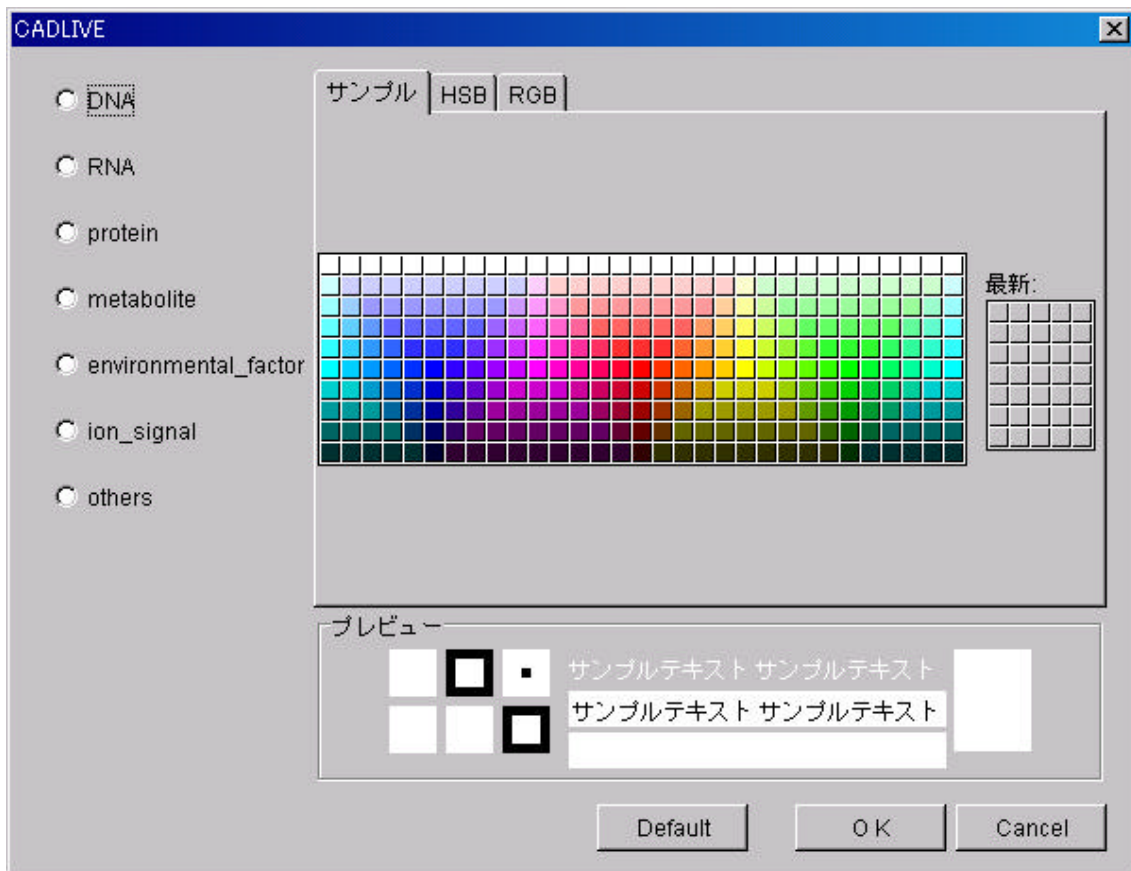
・設定方法

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 Specie と JunctionKey を選択し、Delete ボタンを押します。

7 - 4 - 2 SymbolColor



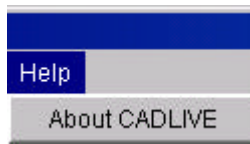
Specie の表示色を変更することができます。

- ・ 設定方法

左欄から設定したい Specie 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 Specie 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 Specie 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。

7 - 5 Help メニュー



7 - 5 - 1 About CADLIVE

CADLIVE のバージョン情報を表示します。

