

#環境

- Python 3.9系
- jupyternotebook
- ipywidgets
- d3.js (v3が楽ではあるけど、記述方法を工夫するとv4以降も動く)

ライブラリ version

ipython 8.16.1 ipywidgets 8.1.1

jupyterlab 4.0.7 // 使わないけど現在jupyter notebookをインストールすると勝手に入る

notebook 7.0.6

GPMLの例: https://www.wikipathways.org/pathways/WP4599.html の一部をまとめ改変。左のURLよりDLできます。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
                                                                                                                        赤はoecのコメント
<Pathway xmlns="http://pathvisio.org/GPML/2013a" Name="Glucosinolate.." Version="WP4599 r118601"</pre>
        Author="[M,,]" Last-Modified="20210528162614" Organism="Arabidopsis thaliana">
 <Comment Source="WikiPathways-description">This pathway describes the glucosinolate...
 <BiopaxRef>a08</BiopaxRef>
 <Graphics BoardWidth="1815.6" BoardHeight="491.1" />
 <DataNode TextLabel="L-Valine" GraphId="cfa81" Type="Metabolite">
   <Graphics CenterX="673.9" CenterY="167.9" Width="90.00" Height="25.0" ZOrder="33606" FontSize="12" Valign="Middle" Color="0000ff" />
   <Xref Database="ChEBI" ID="CHEBI:16414" />
                                                                                                                 //nodeのcolorはRGB16進
 </DataNode>
 <DataNode TextLabel="CYP79D2" GraphId="bc2ee" Type="GeneProduct" GroupRef="a6411">
   <Graphics CenterX="775.66" CenterY="120.458" Width="90.00" Height="26.91" ZOrder="33607" FontSize="12" Valign="Middle" />
   <Xref Database="KEGG Genes" ID="K13401" />
 </DataNode>
 <DataNode TextLabel="CYP79D1" GraphId="de40e" Type="GeneProduct" GroupRef="a6411">
   <Graphics CenterX="775.66" CenterY="93.54" Width="90.00" Height="26.91" ZOrder="33683" FontSize="12" Valign="Middle" />
   <Xref Database="KEGG Genes" ID="K13401" />
 </DataNode>
 //...DataNode続く
 <Interaction GraphId="ide1184523">
   <Graphics Z0rder="12288" LineStyle="Broken" LineThickness="1.0"> //InteractionのX, Y座標はrectanble(もしくはline)との接点の座標
     <Point GraphId="c880d" X="166.749" Y="232.999" GraphRef="ab288" RelX="0.0" RelY="-1.0" />
     <Point GraphId="c97e2" X="315.999" Y="167.999" GraphRef="b17d3" RelX="-1.0" RelY="0.0" ArrowHead="Arrow" />
   </Graphics>
   <Xref Database="" ID="" />
 </Interaction>
 <Interaction GraphId="f1585">
   <Graphics Z0rder="33620" LineThickness="1.0">
     <Point GraphId="f9c53" X="1197.333" Y="167.333" GraphRef="c2637" RelX="1.0" RelY="0.0" />
     <Point GraphId="dbfac" X="1262.666" Y="167.333" GraphRef="ae0d3" RelX="-1.0" RelY="0.0" ArrowHead="mim-conversion" />
     <Anchor Position="0.5" Shape="None" GraphId="b54df" />
   </Graphics>
   <Xref Database="" ID="" />
 </Interaction>
 <Interaction GraphId="f7cff">
   <Graphics Z0rder="33676" LineThickness="1.0">
     <Point GraphId="dd462" X="718.999" Y="167.999" GraphRef="cfa81" RelX="1.0" RelY="0.0" />
     <Point GraphId="ef883" X="832.666" Y="167.333" GraphRef="d7e68" RelX="-1.0" RelY="0.0" ArrowHead="mim-conversion" />
     <Anchor Position="0.5" Shape="None" GraphId="e93e2" />// anchorが接続するケースの記述
   </Graphics>
   <Xref Database="" ID="" />
 </Interaction>
 <Interaction GraphId="b1a15">
   <Graphics Z0rder="33678" LineThickness="1.0">
     <Point GraphId="f3ade" X="775.666" Y="133.916" GraphRef="bc2ee" RelX="0.0" RelY="1.0" />
     <Point GraphId="a3214" X="775.833" Y="167.666" GraphRef="e93e2" RelX="0.0" RelY="0.0" ArrowHead="mim-catalysis" />
   </Graphics>
                                                                              // GraphRefをたどらないわからないがここのpointは上記anchor
   <Xref Database="" ID="" />
 </Interaction>
 //... Interaction続く
 <Group GroupId="a6411" GraphId="a6411" />
 <Group GroupId="c1e9e" GraphId="c1e9e" />
 <InfoBox CenterX="0.0" CenterY="0.0" />
 <Biopax>..可視化には関わらない..</Biopax>
</Pathway>
```

```
上のXMLのオブジェクトの座標とスタイルを下記のようなdict(JSON)に変換してD3.js等でレイアウトに利用(スキーマは現在の予定で要検討)
 pathway: {Name (str), Organism (str), Version (str)},
 nodes: [{Čenterx(str(num)), Centery (str(num)), Width (str(num)), Height (str(num)), Color (str)}],//colorはデフォルトで設定無しの黒が多い
  interactions:[
       Graphics: {LineStyle (str)}, // LineStyleは値が設定されていない=実線のケースが多い
                                                                                              //InteractionのX. Y座標は矩形との(anchorの場合はline)との接点の座標
           start_point: {GraphId (str), X (str(num)), Y (str(num), RelX (str(num)), RelY (str(num))},
          end_point: {GraphId (str), X (str(num)), Y (str(num), RelX (str(num)), RelY (str(num), ArrowHead (str)}}
  anchors: [{GraphId (str)}], //どのような情報が必要が要検討・そもそも必要無いかも(anchorの座標スタイル情報はinteractionのpointにあるので)
  // shapes: 多分ノードと同じような属性が必要,
  groups:[{GroupId (str)}] //どのような情報が必要が要検討
                                                                                                   赤はoecのコメント
 Name: Glucosinolate biosynthesis from branched-chain amino acid
                                                                                                                 - Interactionの途中にパスウェイの酵素と基質の反応は
 Last Modified: 20210528162614
                                                                                                                 node-anchorのpointが接続する.
                                 このようなダイヤグラムを"PathVisio"で描くこと・XMLとして書き出すことできます。
 Organism: Arabidopsis thaliana
                                 ただしPathVisoは描画ツールのため遺伝子や基質の属性ビューアにはなりません
                                                                                                                 - node-anchorもinteractionとして記述される.
                                                                                           group
                                                                                               CYP79D1
                                                                                                                 - ReIX, RelYはinteractionがノードのどの位置に接続するか
                                                                       Catalyst
                                                                                               CYP79D2
                                                                                                                 表す属性の模様
                                                                          interaction
                                                                                                                 - おそらく12ヶ所接続(弊社ツールは上下左右のみ対応)
                                                                     anchor
                                                                                                                 - interactionのX,Yはどこに接続するか+-した座標
                                                                                                            (E)-2-
                                            2-Oxo-3-methyl-butanoic acid
                                                                                   L-Valine
           <Interaction..>
                                                                       interaction
            <Graphics LineStyle="broken"...
     Shape
       Valine, leucine and isoleucine biosynthesis
                                                                       Catalyst
                                                                                                Catalyst
                                                                                                                  interactionの末端の形状
                                                                                                                  # 主に通常のinteraction
 <Shape TextLabel="..>
                                                                                                                  Arrow
 <Graphics CenterX=...ShapeType="RoundRectangle"..>
                                            2-Oxo-4-methyl-pentanoic acid
                                                                                   L-leucine
                                                                                                                  mim-conversion ←
                                                                                                                  ## 主にanchor
                                                                                               CYP79D3
                                                                                                                  mim-catalysis:
                                                                                                                  mim-inhibition:
                                                                       Catalyst
                                                                                               CYP79D4
                                                                                                                  mim-modification: <
                                                                                                                  ## 他にもあるけどとりあえず実装しない
                                            2-Oxo-3-methyl-pentanoic acid
                                                                                  L-isoleucine
                                                                                                                  mim-necessary-stimulation:
                                                                                                                  ReceptorRound:
                                                                                                                  ## その他はとりあえず形状の無い直線を結合する
```