

# 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"?>
<Pathway xmlns="http://pathvisio.org/GPML/2013a" Name="Glucosinolate.." Version="WP4599_r118601"
  Author="[M,,]" Last-Modified="20210528162614" Organism="Arabidopsis thaliana">
  <Comment Source="WikiPathways-description">This pathway describes the glucosinolate...</Comment>
  <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" />
  </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 ZOrder="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 ZOrder="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 ZOrder="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 ZOrder="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>
    <Xref Database="" ID="" />
    // GraphRefをたどらないわからないがこのpointは上記anchor
  </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>
```

赤はoecのコメント

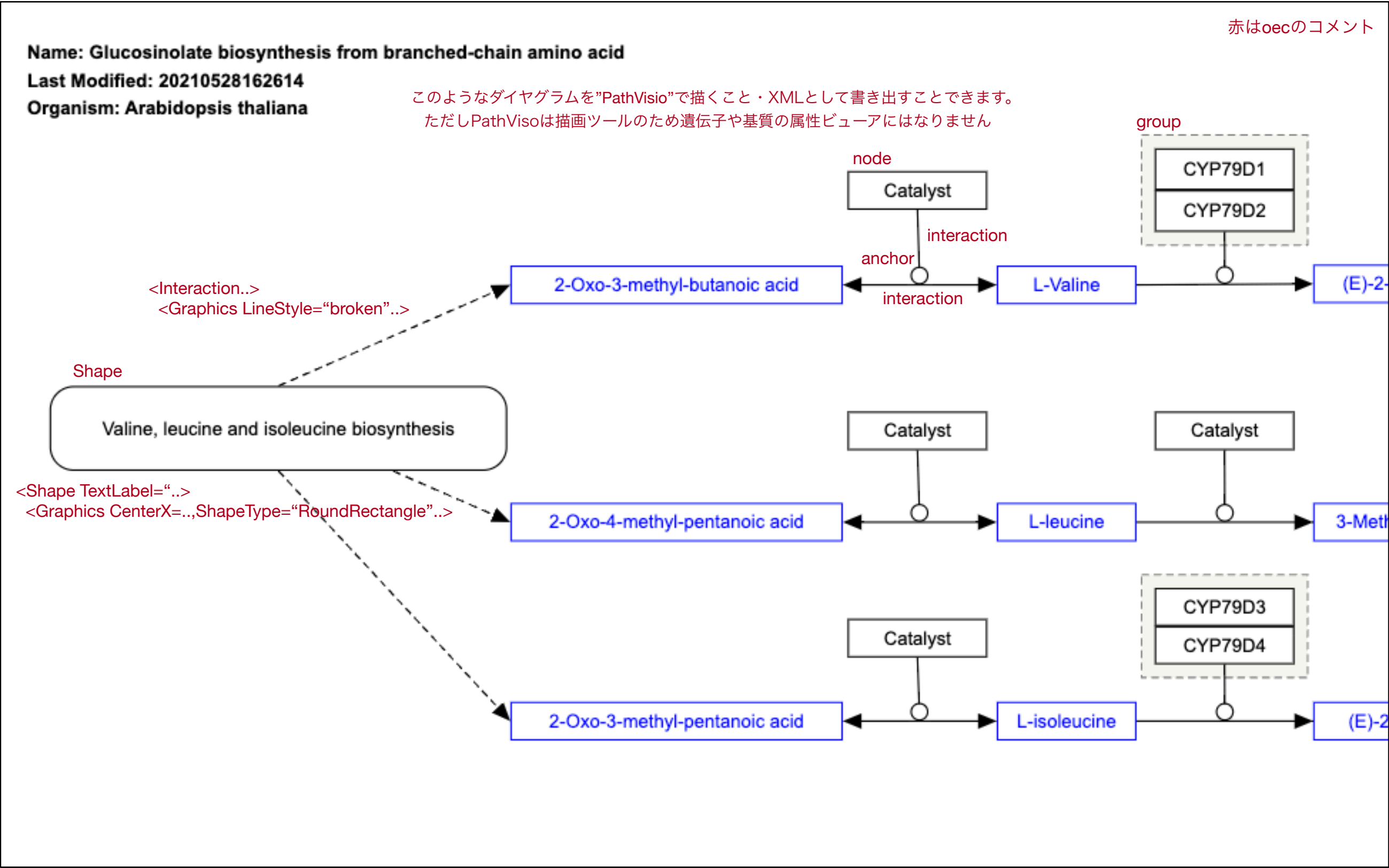
//nodeのcolorはRGB16進

//InteractionのX, Y座標はrectanble（もしくはline）との接点の座標

// anchorが接続するケースの記述

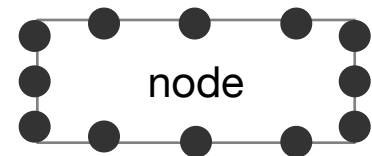
// GraphRefをたどらないわからないがこのpointは上記anchor

```
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: [{CenterX(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
    {
      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
}
```



- Interactionの途中にパスウェイの酵素と基質の反応は node-anchorのpointが接続する。  
- node-anchorもinteractionとして記述される。

- RelX, RelYはinteractionがノードのどの位置に接続するか表す属性の模様  
- おそらく12ヶ所接続（弊社ツールは上下左右のみ対応）  
- interactionのX,Yはどこに接続するか+-した座標



interactionの末端の形状  
# 主に通常のinteraction  
Arrow ←  
mim-conversion ←

## 主にanchor  
mim-catalysis: ○—  
mim-inhibition: |—  
mim-modification: <—

## 他にもあるけどとりあえず実装しない  
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