

2024 年 12 月 20 日

RETREK-UI

バージョン 1.3

京都大学大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野

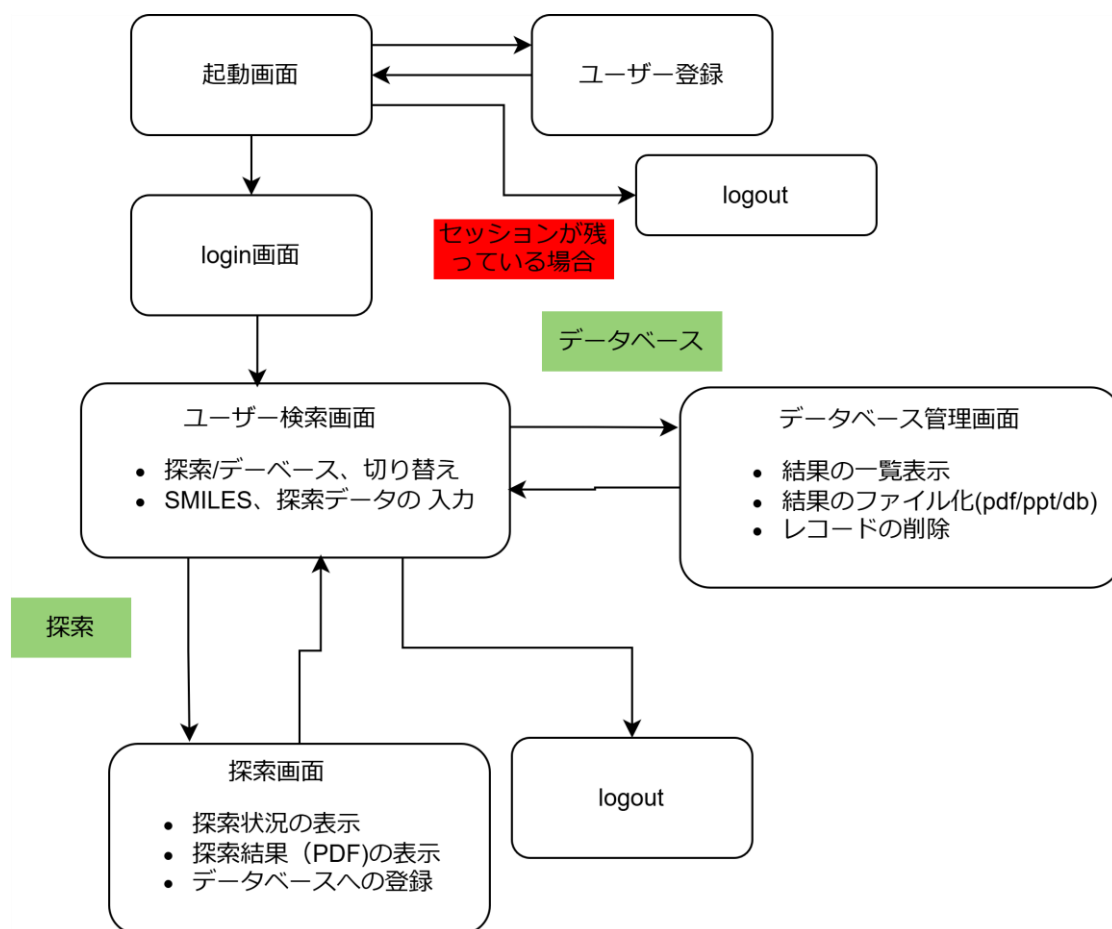
## 内容

1. 操作の概要.....	2
2. サービスの起動.....	3
3. ユーザーの登録.....	3
4. ログイン .....	3
5. ユーザー検索画面 .....	4
6. 経路探索.....	4
6.1 経路探索の進捗表示 .....	4
6.2 経路探索の結果表示・データベースへの登録 .....	5
7. データベースの利用.....	6
7.1 探索経路の一覧.....	6
7.2 ファイルのダウンロード・レコードの削除 .....	7
7.3 結果ファイルの説明.....	8
7.4 補足.....	10
8. ログアウト.....	11

## 1. 操作の概要

合成経路を pdf 及び pptx 形式で作成する手順は以下になる。

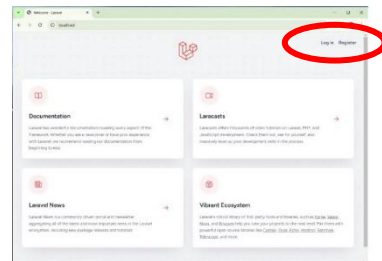
1. 「ユーザー登録」を行う。
2. ログインして、「ユーザー検索画面」で「SMILES 化学式」、及び、「物質名」を入力後、「反応経路の探索」を行う。
3. 「探索結果」は「進捗画面」に inline-pdf で表示される。結果保存は、この pdf をダウンロードするか、データベースに登録後、4 の手順で行う。
4. 2 の「ユーザー検索画面」より、「データベース」を利用する。「探索経路」を「一覧表」より選択し、画像サイズを指定し、pdf/pptx の作成、ダウンロードする。



## 2. サービスの起動

任意のブラウザで <http://localhost> に接続すると、右の「起動画面」が表示される。

サービスを利用するには、ユーザー登録とログインが必要になる。それぞれを行うために、画面右上の①Register と②login をクリックする。



## 3. ユーザーの登録

「起動画面」右上の Register ボタンをクリックすると、右の「ユーザー登録画面」が現れるので、ユーザー登録を行う。実在する Email アドレスの必要はないが、@を含むことが必要になる。

「パスワード再設定」はメール認証で、開発環境用のメールクライアントに <http://localhost:8025> で接続することで行える。セキュリティを考慮して運用する場合は、メールサーバーの構築、及び、実在する Email アドレスでユーザー登録を行う。

## 4. ログイン

「起動画面」右上の login ボタンをクリックし、現れたログイン画面に登録した、Email/Password でログインする。前回、適切に logout していない場合、「login」の代わりに、「Dashboard」が表示されるので、それをクリックして logout した後、再度「login」をする。

注意：この画面の「アカウント作成はこちら」ボタンは機能していません。

## 5. ユーザー検索画面

Login すると「ユーザー検索画面」が現れる。現在、サービス(作業内容)として「RetRek」、「経路探索」、「データベース」が利用できる。通常の探索は、デフォルトで選択されている「経路探索」で行う。データベースに登録してある経路探索の結果を利用する場合は、「データベース」を選択する。

## 6. 経路探索

経路探索を行うには、「SMILES 化学式」と「物質名」を入力し、「反応経路の探索」をクリックする。物質名はファイル名にも利用するので、スペースなどは含まない文字列を入力する。「SMILES」、及び、「物質名」は過去の探索と同一でも別レコードとしてデータベースには登録される。

デフォルト以外の、探索パラメータを設定する場合は、「詳細設定」ボタンで折りたたまれているテーブルを開く。

### 6.1 経路探索の進捗表示

経路探索中には、右の画面が表示される。探索済みルート数が探索数（デフォルトでは100経路）になると探索が終了する。同じペースで探索が進んだ場合の目安を「残り時間」に表示する。条件に依存するが、探索時間は数分～1時間になる。

探索中に「ユーザー探索画面へ戻る」をクリックすると、実行中の探索はキャンセルされる。

## 6.2 経路探索の結果表示・データベースへの登録

探索が終了すると、経過時間の下に「Making report in progress...」と表示され、数秒後に探索結果が表示される。必要な場合は、ダウンロードボタンで pdf ファイルをダウンロードする。

「データベースに追加する」をクリックすると、探索結果がデータベースに登録され、ボタンの横に「\*\* is saved」と表示される。

pptx ファイルを作成したい場合や、画像の大きさを変えたい場合は、「データベース」に登録をする。

必要な作業が終わったら「ユーザー検索画面へ戻る」をクリックする。

### 探索終了後の画面の例

The screenshot displays a web browser window with the URL `localhost/exepy`. The page features a navigation bar with buttons for "ユーザー検索画面へ戻る" (Return to user search screen) and "データベースに追加する" (Add to database). The main content area shows the search query: `"COc1ccc(C(=O)c2ccc([N])cc2)c(O)c1"`. Below the query, it indicates "検索済みルート数 100 / 100" (Number of searched routes 100 / 100) and the timestamp "Wed Dec 18 2024 16:05:36 GMT+0900 (日本標準時)" with an elapsed time of "経過時間 0:01:31". A red callout box points to a download icon in the top right corner of the drawing area, with the text "pdf file でダウンロード" (Download as pdf file). The drawing area shows a "Drawing summary" for "star51" with "reactions 3-0" and "route #id 1". It also states "1 variations from 0 routes over 100 queries" and "Routes start at similarity of". A chemical structure is displayed at the bottom of the drawing area.

ユーザー検索画面へ戻る  
データベースに追加する

Searching "`COc1ccc(C(=O)c2ccc([N])cc2)c(O)c1`"

検索済みルート数 100 / 100

Wed Dec 18 2024 16:05:36 GMT+0900 (日本標準時)  
経過時間 0:01:31

pdf file でダウンロード

untitled 1 / 2 68% + -

Drawing summary

star51	reactions	route #id
	3-0	1

1 variations from 0 routes over 100 queries

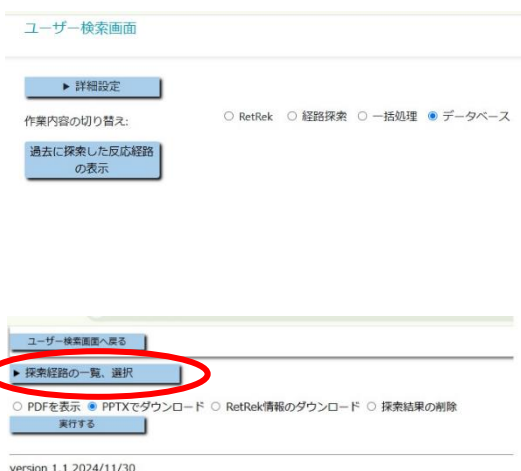
Routes start at similarity of

1

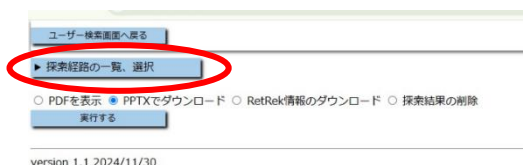
2

## 7. データベースの利用

「ユーザー検索画面」で「作業内容の切り替え」を「データベース」にすると「過去に探索した反応経路の表示」と表示されるのでクリックする。



新しく現れた画面の「探索経路の一覧、選択」をクリックすると、探索結果の一覧が表示・非表示される。一覧表で作業を行う探索結果を選択する。



### 7.1 探索経路の一覧

操作説明：①で、SMILES/画像の表示を切り替える。各レコードの探索結果を確認するには、確認したいレコードの②か③のボタンをクリックする。②をクリックすると、自動で一覧表が閉じ、pdfを表示する。③では、一覧表の下に pdf を表示する。画像サイズを変えたいときは、④でボタンが表示させ、選択する。テキストボックスに直接数値を入力することで、任意の大きさにできる。

Database manager

localhost/exepty

ユーザー検索画面へ戻る

探索経路の一覧、選択

図の大きさを調える

☐ 小さい ☒ 普通 ☐ 大きい 0.25

	id	ユーザー名	Click for images	Click for strings	日付	物質名	検索件数	検索の重み	検索条件
1		kisa	<chem>c1cc(OCCCCC)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2</chem>		2024年10月30日16時44分	DAINSORB-T-7	40	"[5,0.5,2,2,2,1]"	"',50',",',10','0',"
2		kisa	<chem>Fc1cc(-c2ccccc2C2CCCC2C2CCCC2)cc1</chem>		2024年10月			0.5,2,2,2,1"	"',50',",',10','0',"
3		kisa	<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccccc2)dc1</chem>					0.5,2,2,2,1"	"',50',",',10','0',"
4		kisa	<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccc(S([N])(=O)=O)cc2)cc1</chem>					0.5,2,2,2,1"	"',50',",',10','0',"
5		kisa	<chem>[C][C]OP(=S)(O[C][C])Oc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1</chem>					0.5,2,2,2,1"	"',50',",',10','0',"

図の大きさを調える

☐ 小さい ☒ 普通 ☐ 大きい 0.25

Click for strings

Click for images

図の大きさを調える

図の大きさを調える

## 7.2 ファイルのダウンロード・レコードの削除

一覧表で選択した、探索結果（レコード）に対して、ラジオボタンで選択した項目の処理を「**実行する**」で行う。

1. 「**PDF/PPTX をダウンロードする**」を選択、実行すると、新たにファイルが作成され、ファイル名[検索日時+物質名.pdf/pptx]で自動的にダウンロードされる。複数ファイルを同時作成することを想定していないため、ダウンロード終了後に次の実行を行う。
2. 「**RetRek 情報のダウンロード**」を選択、実行した場合、描画の元となった、SMILES 等の情報がテキストファイルとして保存される。
3. 「**検索結果の削除**」を選択、実行した場合、選択されているレコードがデータベースから削除される。一度削除されたレコードは、ブラウザーの戻るボタン等では復活しない。

The screenshot shows a web browser window titled "Database manager" with the address bar displaying "localhost/syncPdf#myDetails". Below the browser window, there is a button labeled "ユーザー検索画面へ戻る". Below this, there are four radio buttons: "PDFをダウンロード", "PPTXをダウンロード" (selected), "RetRek情報のダウンロード", and "探索結果の削除". Below the radio buttons, there is a blue button labeled "実行する" and the text "mission ok".

Below the browser window, there is a section titled "star05" with a "Reaction route summary" diagram. The diagram shows a reaction route starting from "8-2" and branching into two paths: one leading to "9" and then to "0", and another leading to "1" and then to "0". Below the diagram, it says "5 variations from 2 routes over 100 queries".



## 7.3 結果ファイルの説明

結果ファイルの典型例を示す。一ページ目、左上に物質名（呼称）、下に化学式の画像と SMILES が示され。中央の“2 routes over 100 queries”は 100 ルート要求して 2 ルートが見つかったことを表す。また、中央上部の Reaction route summary は、route#6 は[8-2→9→0]=[8,7,6,5,4,3,2,9,0]で、はじめの物質と 8 個の生成物で、8 段階の合成反応であることを示す。route#2 は[8-2→1→0]で、route#2 とは[9]と[1]が異なる。具体的な反応経路が二ページ以降に示される。収束反応を含む場合、反応の順番の捉え方が一意ではなく、適切に記述できていない場合がある。

star05

Reaction route summary

reactions

8-2 → 9 → 0  
          ↘ 1 ↗

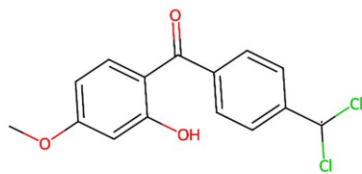
2 routes over 100 queries

Routes start at similarity of 0.39(2),0.39(6),

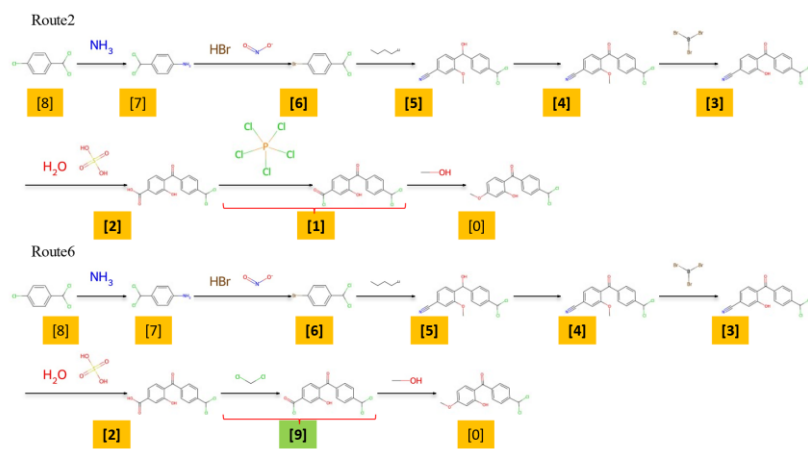
route #id

6  
2

1 ページ目



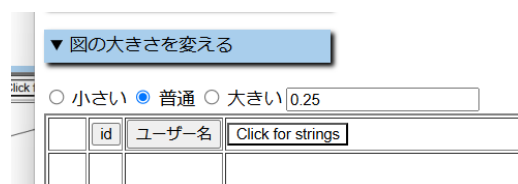
COc1ccc(C(=O)c2ccc([C](Cl)Cl)cc2)c(O)c1



2 ページ目

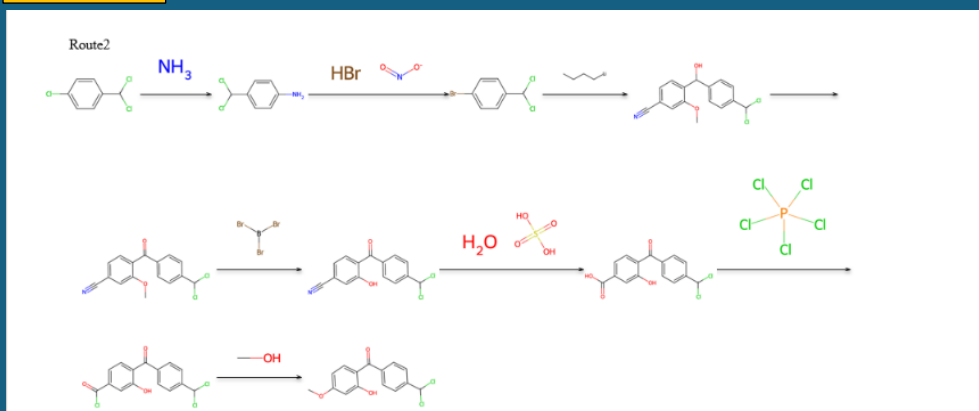
## 7.4 補足

画像ファイルは svg フォーマットで作成し、pdf には svg 、pptx には jpg に変換して貼り付けている。jpg は約 1000x1000 pixel から、余白を除いた画像サイズで、サイズ指定に関わらず、同じ画像が用いられる。(i.e. 画像の解像度は同一)

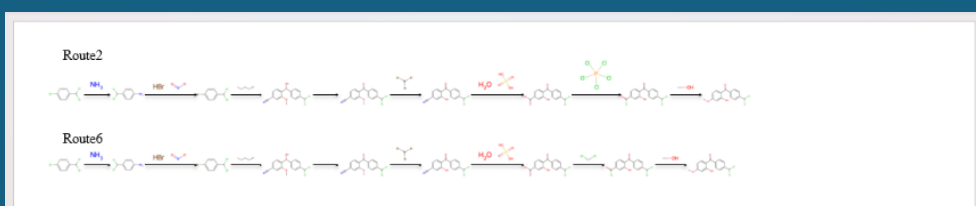


画像サイズは 0.05 から 0.5 で指定可能で、範囲外の値は下限/上限に変更される。一連の反応が数十段階に及ぶ場合、サイズを変更して一ページに収まるようにしないと、適切に表示できない場合がある（修正予定）。

サイズ 0.45



サイズ 0.1



## 8. ログアウト

「ユーザー検索画面」に戻り、右上の「profile」をクリックし、現れた「profile 画面」右上の「ユーザー名」をクリックし、現れた「logout」メニューをドラッグしてログアウトする。

この手順でログアウトせず、ブラウザーのタブを閉じるなどでセッションを切断すると、次回の接続時に「起動画面」の右上に「login」ボタンの代わりに「dashborad」ボタンが現れる。このボタンをクリックした後、同様な作業で「logout」を行う。