

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

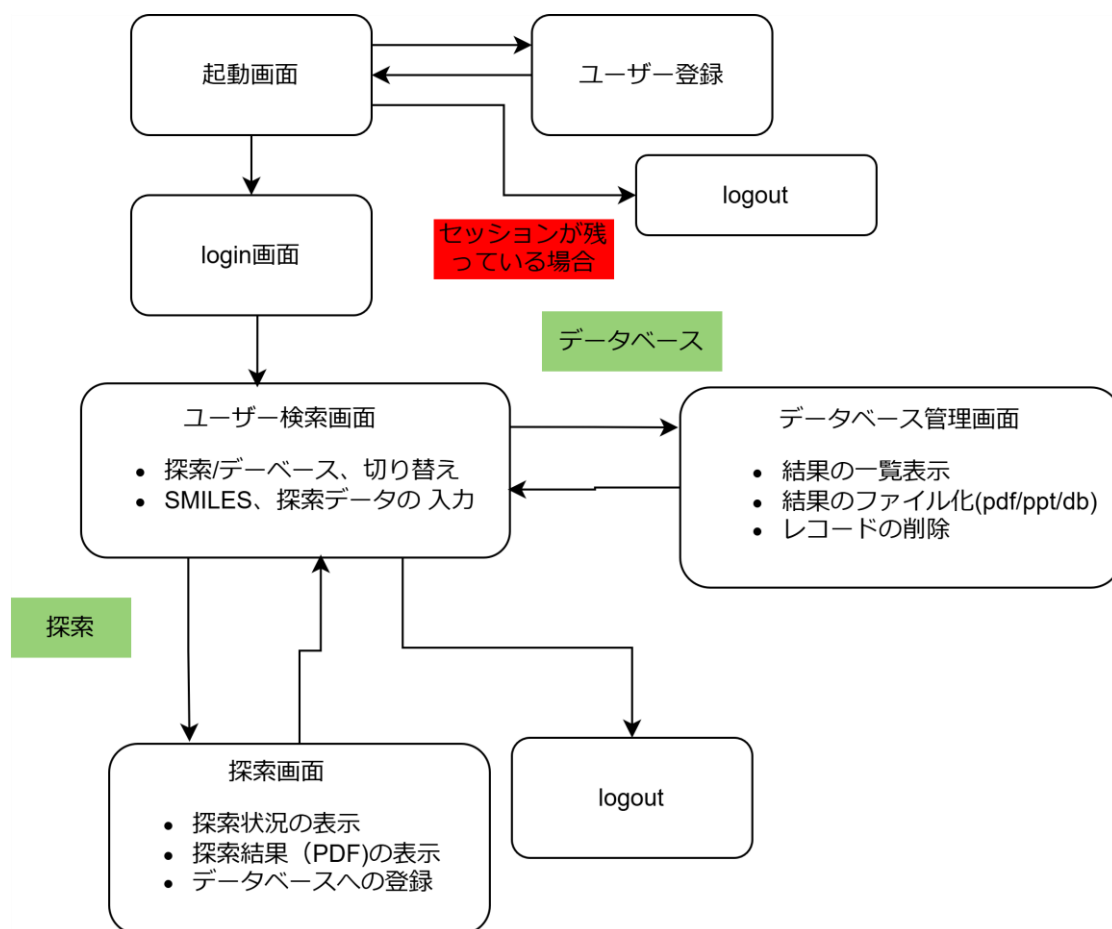
## 内容

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の概略を示す。

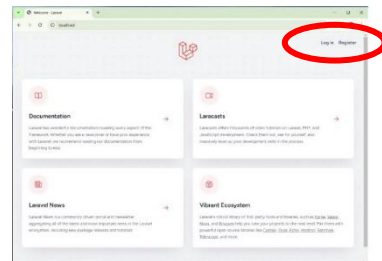
1. 「ユーザー登録」を行う。
2. ログインして、「ユーザー検索画面」で「SMILES 化学式」、及び、「物質名」を入力後、「反応経路の探索」を行う。
3. 「探索結果」は「進捗画面」に inline-pdf で表示される。結果保存は、この pdf をダウンロードするか、データベースに登録後、4 の手順で行う。
4. 2 の「ユーザー検索画面」より、「データベース」を利用する。「探索経路」を「一覧表」より選択し、画像サイズを指定し、pdf/pptx の作成、ダウンロードする。



## 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。



The screenshot shows the 'RetRek - ユーザー検索画面' in a web browser. It features input fields for 'SMILES化学式:' and '物質名(保存ファイル名/空欄なら日付を利用):'. Below these is a '詳細設定' button. A section for '作業内容の切り替え:' contains radio buttons for 'RetRek', '経路探索' (selected), '一括処理', and 'データベース'. There is also a '反応経路の探索' button. At the bottom, it says 'お気に入りの合成経路' and 'お気に入りの合成経路はありません。'

## 6. 経路探索

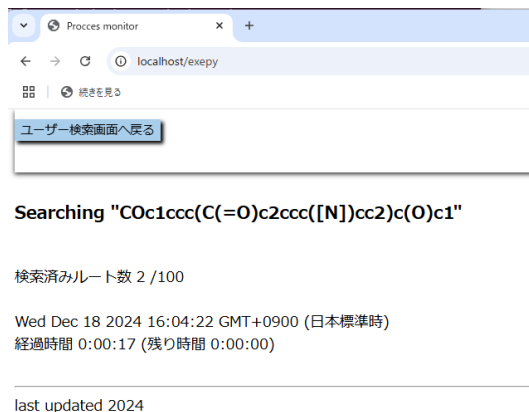
経路探索を行うには、「SMILES 化学式」と「物質名」を入力し、「反応経路の探索」をクリックする。物質名はファイル名にも利用するので、スペースなどは含まない文字列を入力する。「SMILES」、及び、「物質名」は過去の探索と同一でも別レコードとしてデータベースには登録される。

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。



The screenshot shows the 'Process monitor' window in a web browser. It displays the search progress for the SMILES string 'COC1ccc(C(=O)c2ccc([N])cc2)c(O)c1'. The progress bar shows 2 out of 100 routes completed. The timestamp is 'Wed Dec 18 2024 16:04:22 GMT+0900 (日本標準時)' and the elapsed time is '0:00:17 (残り時間 0:00:00)'. At the bottom, it says 'last updated 2024'.

## 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

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

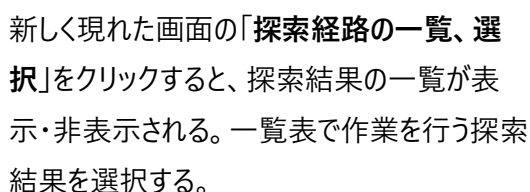
Routes start at similarity of

1

2

Chemical structure: COc1ccc(C(=O)c2ccc([N])cc2)c(O)c1

「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。



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でボタンを表示させ、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、任意の大きさで指定できる。

The screenshot displays the 'Database manager' interface. At the top, there's a navigation bar with 'Database manager' and a search bar containing 'localhost/exeepy'. Below this is a table of search results. The table has columns: 'id', 'ユーザー名' (Username), 'Click for images', '日付' (Date), '物質名' (Substance Name), '検索件数' (Number of search results), '検索の重み' (Search weight), and '検索条件' (Search conditions). The table contains five rows of data, each representing a search result for a specific chemical structure. The chemical structures are displayed in the 'Click for images' column. The first structure is a coumarin derivative with a chlorine atom at the 4-position. The second structure is a coumarin derivative with a chlorine atom at the 4-position. The third structure is a coumarin derivative with a chlorine atom at the 4-position. The fourth structure is a coumarin derivative with a chlorine atom at the 4-position. The fifth structure is a coumarin derivative with a chlorine atom at the 4-position. Annotations highlight key features: 1. Chemical structure of a coumarin derivative. 2. 'Click for images' button. 3. 'Click for strings' button. 4. '図の大きさを調べる' (Check image size) button.

	id	ユーザー名	Click for images	日付	物質名	検索件数	検索の重み	検索条件
1	<input type="radio"/>	kisa	<chem>c1ccc(OCCCCC1)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2</chem>	2024年10月30日16時44分	DAINSORB-T-7	40	'[5,0.5,2,2,1]'	","50","","10','0',
2	<input type="radio"/>	kisa	<chem>Fc1cc(-c2ccccc2C2CCCC2C2CCCC2)cc1</chem>	2024年10月30日16時44分			0.5,2,2,1]'	","50","","10','0',
3	<input checked="" type="radio"/>	kisa	<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccccc2)dc1</chem>	2024年10月30日16時44分			0.5,2,2,1]'	","50","","10','0',
4	<input type="radio"/>	kisa	<chem>COc1ccc(C(=O)c2ccc(S([N])=O)cc2)cc1</chem>	2024年10月30日16時44分			0.5,2,2,1]'	","50","","10','0',
5	<input type="radio"/>	kisa	<chem>[C][C]OP(=S)(O[C][C])Oc1ccc(C(=O)c2ccccc2)cc1</chem>	2024年10月30日16時44分			0.5,2,2,1]'	","50","","10','0',

## 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 URL "localhost/syncPdf#myDetails". Below the address bar, there is a button "ユーザー検索画面へ戻る". A row of radio buttons allows selecting an action: "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 these buttons is a blue "実行する" button and the text "mission ok".

Below the browser window, a PDF viewer shows a document titled "star05". The document contains a chemical structure and a "Reaction route summary" diagram. The diagram shows a reaction path from "8-2" to "9" and "1", which then converge to "0". Below the diagram, it states "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

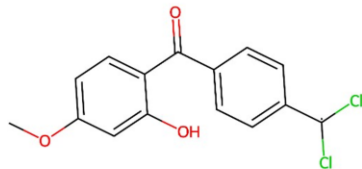
route #id

6  
2

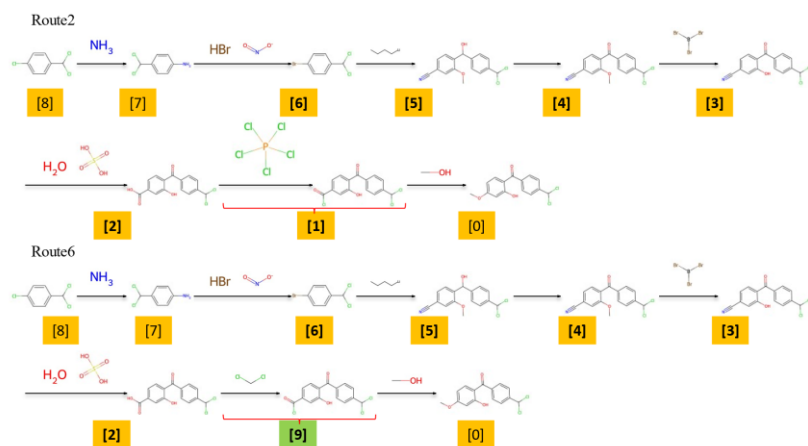
2 routes over 100 queries

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

1 ページ目



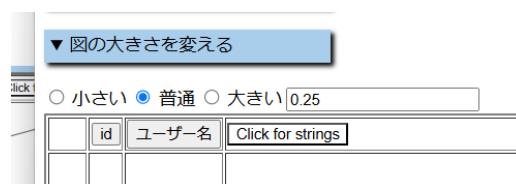
COc1ccc(C(=O)c2ccc([C](Cl)Cl)cc2)c(O)c1



2 ページ目目

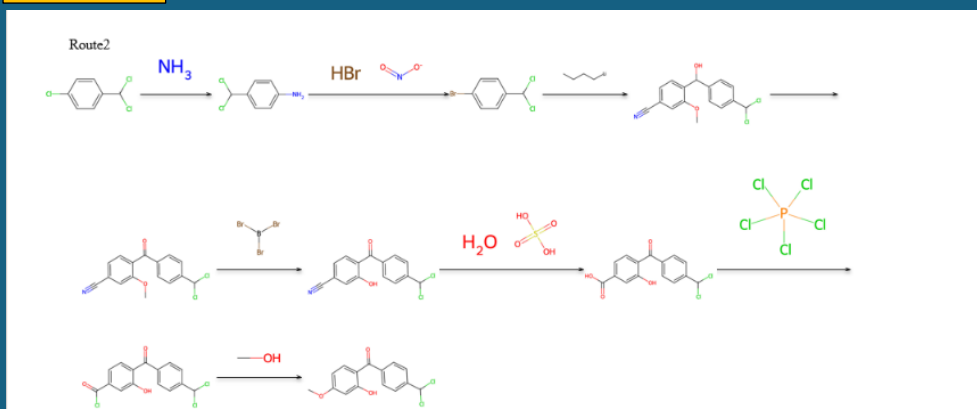
## 7.4 補足

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、同じ画像オブジェクトを用いている。(i.e. 画像の解像度は同一)

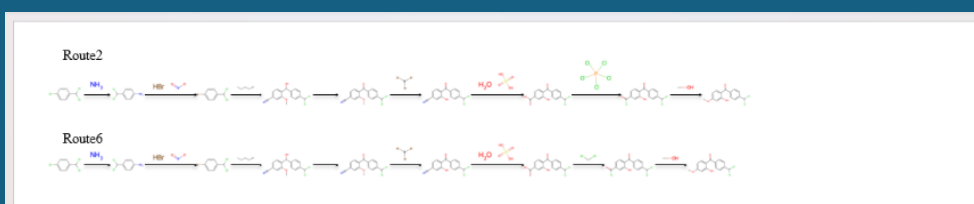


画像サイズは 0.05 から 0.5 で指定可能で、範囲外の値は下限/上限に変更される。一連の反応が数十段階に及ぶ場合、サイズを変更して一ページに収まるようにしないと、適切に表示できない場合がある（修正予定）。

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。