




2025 年 7 月 4 日

RETREK-UI

バージョン 2.2

KISA

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.   | サーバーへの接続 .....        | 4  |
| 2.   | ユーザー登録 .....          | 4  |
| 3.   | ログイン.....             | 4  |
| 4.   | メインメニュー .....         | 4  |
| 5.   | 経路探索(1) .....         | 5  |
| 6.1  | 進捗表示(1).....          | 5  |
| 6.   | 経路探索(2) .....         | 7  |
| 7.1  | 進捗表示画面(2) .....       | 7  |
| 7.   | ファイル変換：データベースの利用..... | 8  |
| 8.   | データベースの管理.....        | 9  |
| 10.  | ログアウト.....            | 10 |
| 11.  | 補足 .....              | 10 |
| 11.1 | 結果ファイルの説明.....        | 10 |
| 11.2 | 画像サイズ.....            | 12 |

|      |                         |    |
|------|-------------------------|----|
| 11.3 | 仕様に起因する不具合、及び、その対策..... | 13 |
|------|-------------------------|----|

|      |                      |    |
|------|----------------------|----|
| 11.4 | ユーザー認証用サーバーの不具合..... | 14 |
|------|----------------------|----|

## 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. <http://35.232.56.236> に接続、「ユーザー登録」を行い、ログインする。
2. 「メインメニュー」より「経路検索(1)」画面へ移動し、「SMILES 化学式」、及び、「物質名」を入力後、「探索」を行う。
3. 「進捗画面」に移行し、探索終了後「探索結果」は 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. の「メインメニュー」より、「ファイル変換」画面へ移動し、出力したい探索経路を「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。

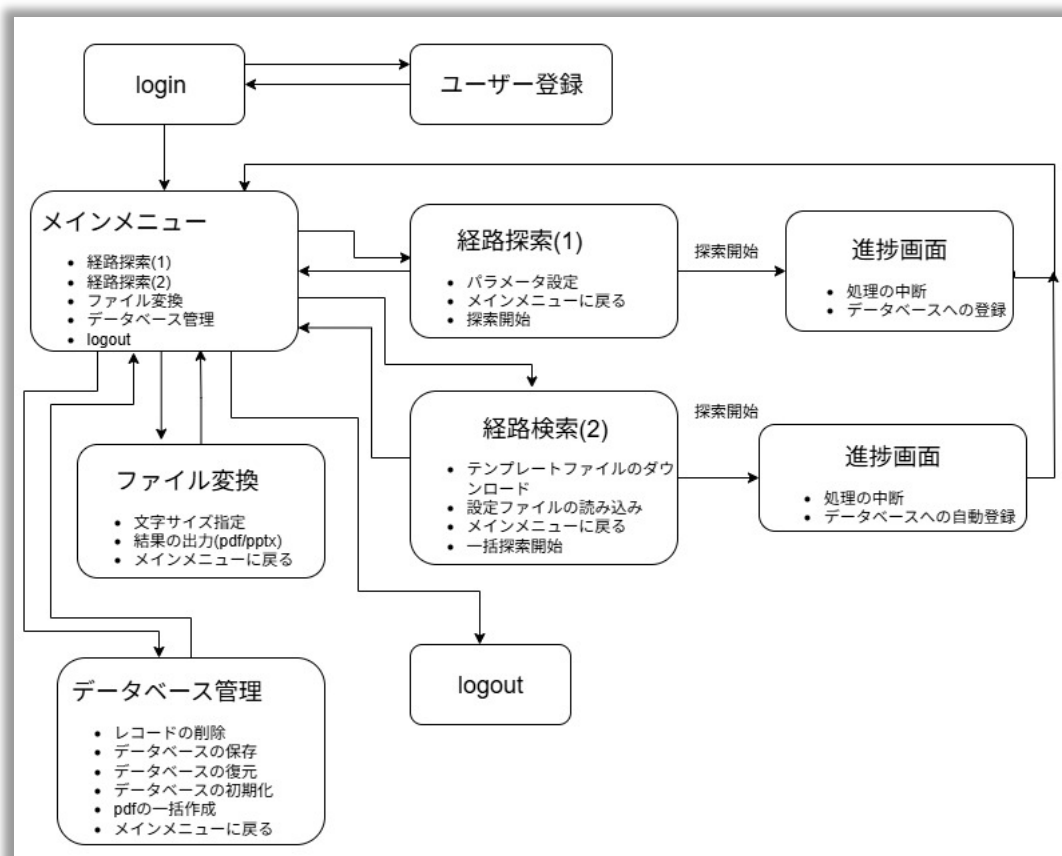


図 1 操作の概略

## 1. サーバーへの接続

任意のブラウザで <http://35.232.56.236> に接続すると、「**login 画面**」が表示される。

ただし、前回の利用時にログアウトせずにブラウザを閉じるなどした場合、自動でユーザー認証が行われ、「**ログイン画面**」を経由せずに「**メインメニュー画面**」に接続される。

## 2. ユーザー登録

初回利用時には、「**login 画面**」内の「**新規登録**」ボタンをクリックして、「**ユーザー登録画面**」より登録を行う。

ユーザー情報の Email の項目には@を含む文字列を入力する。実存する Email アドレスの必要はない。

図 2 login 画面

## 3. ログイン

「**login 画面**」より、登録した Email/Password でログインする。前回、logout していない場合、ユーザー認証はスキップされ、「**メインメニュー画面**」が表示される。

パスワードを忘れた場合、(Forgot your password?)より、再設定を行う。再設定は、メール認証になるが、サーバー内で閉じたメールサービスを利用するため、実在するメールアドレスの必要はない。パスワードの再設定用に送られたメールは、<http://35.232.56.236:8025> で開くことができる。

図 3 ユーザー登録画面

## 4. メインメニュー

「メインメニュー」より、目的の操作を選択する。また、logout 及び、ユーザーの削除を行う。探索結果を保存するデータベースを共有か個人用にするかを切り替える。なお、データベースの切り替えは、経路探索画面内でも行える。

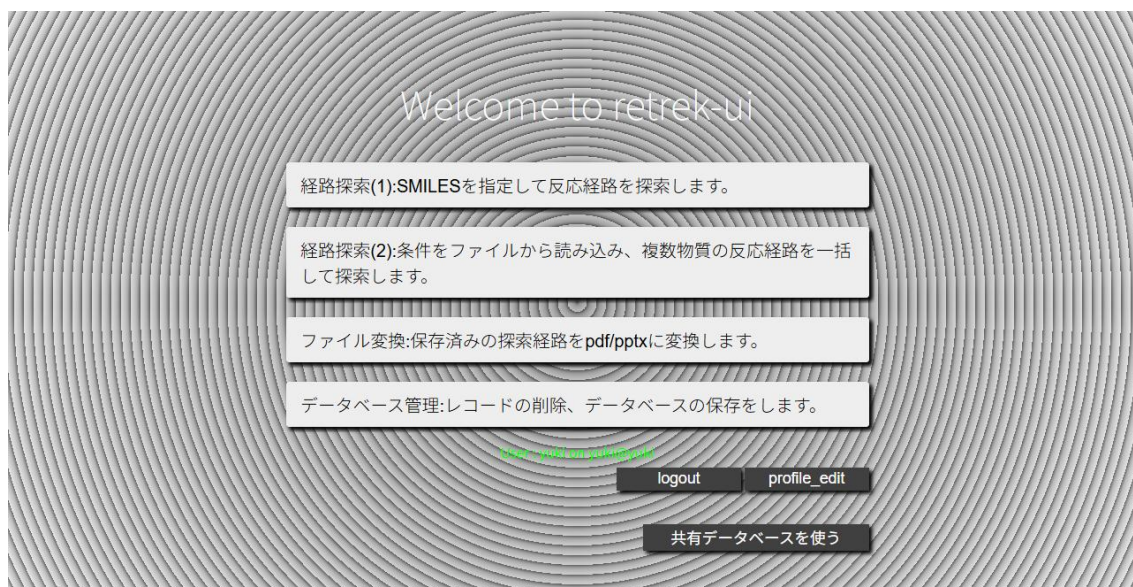


図 4 メインメニュー画面

## 5. 経路探索(1)

経路探索を行うには、「**SMILES 化学式**」と「**物質名**」を入力し、「**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には、「詳細設定」ボタンで折りたたまれているテーブルを開き、入力する。



図 5 経路検索(1)画面

### 5.1 進捗表示(1)

進行中の経路探索の、探索済みルート数、経過時間などの進捗状態が表示される。同じペースで探索が進んだ場合の終了までの目安を「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。

「処理を中止する」ボタンで処理が中断され「メインメニュー」に戻る。

探索済みルート数が探索数（デフォルトでは1000経路）になると探索が終了する。

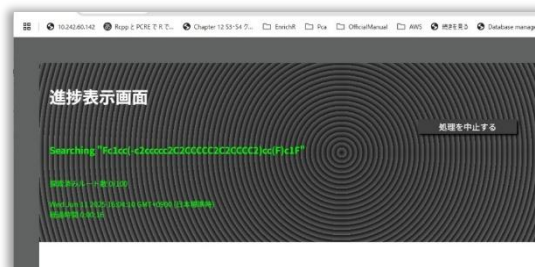


図 6 進捗表示画面(1)



図 7 進捗表示画面(1)：探索終了後

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。重複する経路を取り除くため、表示される探索数は要求した探索数より少ない。

新たに現れた「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「メインメニューに戻る」をクリックする。



## 6. 経路探索(2)

経路探索(2)では、ファイルを読み込み、複数の探索を一括しておこなう。

「**テンプレートファイルをダウンロードする**」でひな型をダウンロードし、メモ帳等のエディターでファイルの編集を行う。ファイルはカンマ区切りで、一文字目が#の行は処理を行わない。パラメータの順番は、経路探索(1)の詳細設定の表の通りで、一行目にも記載されている。[save\_tree]、[comp\_prob\_mod]、[chem\_axon]の有無に対応する箇所は、何かの文字が書かれていれば有と解釈する。(例えば、,,, → ,0,0,0)

```
#smiles,substance,route_num,knowledgeWeights,expansion_num,time_limit,save_tre,comp_prob_mod,chem_axon
```

```
c1cc(O)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2,DAINSORB_T-0,100,[5,0.5,2,2,1],50,10,0,,,
```

「**ファイルを選択**」で開いたウィンドウで設定ファイルを読み込み、「**探索**」で経路探索を開始する。



図 8 経路検索画面(2)

### 6.1 進捗表示(2)

経路探索する SMILES の一覧、及び、その右に作業状況が表示される。作業状況は、探索前に ready、進行中に Searching、正常終了時に Completed と表示される。不正な SMILES、及び、パラメータ (の数) の場合、false\_smiles、false\_config と表示され、処理は行わない。



「中止」か「**処理継続で戻る**」をクリックすると、「**メインメニュー**」に戻る。「中止」ボタンを押さない限り、(ブラウザーを閉じても)処理は継続される。探索結果は自動でデータベースに保存される。

図 9 進捗表示画面

探索処理中は、「**メインメニュー**」より「**経路検索画面(1)(2)**」を開くと、この「**進捗表示(2)**」に移動する。

全 SMILES の経路探索が終わると、自動でメインメニューに戻る。



## 7. ファイル変換：データベースの利用

「メインメニュー」より「ファイル変換」をクリックして画面を移動する。この画面で検索結果を pptx 等に変換して、ダウンロードする。

操作説明(1):「探索経路の一覧、選択」をクリックし、探索結果の一覧表を表示する。現れた一覧表の①[Click for images/smiles]で、SMILES/画像の表示を切り替える。②で処理を行う探索結果を選択する。一覧表の下に pdf が表示されるので、必要であれば確認する。作成するレポートの画像サイズを変えたいときは、③「図の大きさを変える」で選択ボタンを表示させ、好みのサイズを選択する。テキストボックスに直接数値を入力することで、任意の大きさを指定できる。サイズの目安等、詳しくは「11.2 画像サイズ」に記載する。

図 10 ファイル変換画面(1)

操作説明(2):操作(1)を行った後、一覧表の下  
の、ラジオボタンより「PDF をダウンロード・

**PPTX をダウンロード・RetRek 情報をダウンロード**」を選択して、「実行する」ボタンをクリックする。「実行する」ボタンの上に「\*\*\*を作成中」と表示

され、ファイルが作成された後、ダウンロード用のファイルブラウザーが現れるので保存する。ファイルの作成には、検索経路の数により、数十秒から数分かかる。



図 11 ファイル変換画面(2)

## 8. データベースの管理

「メインメニュー」より「データベース管理」をクリックして画面を移動する。一覧表下のボタンをクリックすることで操作を行う。ただし、経路探索が進行中の場合、書き込み先に指定しているデータベースの削除、および、データベースの復元は行えない。

| 共有データベースの管理   |                                     |       |  |  |
|---|-------------------------------------|-------|--|--|
| <a href="#">メインメニューに戻る</a>  |                                     |       |  |  |
| 選択  | pdfを表示                              | ユーザー名 | Click for images                                     |  |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 1  | yuki  | Fc1cc(-c2ccccC2CCCCc2C2CCCC)cc(F)c1F                 | 2025年06月04日09時18分 ok 100 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]           |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 2  | yuki  | C1-CC-C(C-C1)O                                       | 2025年06月04日09時31分 ok2 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]           |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 3  | yuki  | [C][C]OP(=S)(O[C][C])OC1C=C(C(O)-c2ccc(OC)cc2O)C=CC1 | 2025年06月04日09時31分 star03R1 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]      |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 4  | yuki  | CoC1ccc(C(=O)C2=CC(Cl)CC=C2)c(O)c1                   | 2025年06月04日09時33分 star04R2 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]      |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 5  | yuki  | [C][C]OP(=S)(O[C][C])OC1C=C(C(O)-c2ccc(OC)cc2O)C=CC1 | 2025年06月04日09時39分 star03R1 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]      |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 6  | yuki  | CoC1ccc(C(=O)C2=CC(Cl)CC=C2)c(O)c1                   | 2025年06月04日09時40分 star04R2 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]      |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 7  | yuki  | c1cc(O)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2                     | 2025年07月04日04時52分 DAINSORB_T-0 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]  |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 8  | yuki  | c1c(CCOc(=O)C=C(C)O)ccc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2       | 2025年07月04日04時53分 DAINSORB_T-31 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"] |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 9  | yuki  | c1cc(O)cc(O)c1-C(=O)-c2c(O)cc(OC)cc2                 | 2025年07月04日04時53分 DAINSORB_P-7 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"]  |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 10 | yuki  | c1cc(OCCCCCCC)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2              | 2025年07月04日04時55分 DAINSORB_T-7 100 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"] |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 11 | yuki  | c1cc(OCCCC)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2                 | 2025年07月04日04時55分 DAINSORB_T-53 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"] |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 12 | yuki  | c1cc(OC(=O)C=C)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2             | 2025年07月04日04時56分 DAINSORB_T-83 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"] |
| <input type="checkbox"/>  | <input checked="" type="radio"/> 13 | yuki  | c1cc(OCC=O)cc(O)c1-N2N=c(cccc3)c3=N2                 | 2025年07月04日04時56分 DAINSORB_T-84 10 [5,0,5,2,2,2,1] ["50","10","0"] |
| <a href="#">選択したレコードの削除</a> <a href="#">データベースの保存</a> <a href="#">データベースの復元</a> <a href="#">データベースの初期化</a> <a href="#">一括ダウンロード</a> |                                     |       |  |  |
| <a href="#">表に戻る</a>  |                                     |       |  |  |
| <span>≡</span> unutilid             1 / 2             - 110% +             📄 🔍             ⬇️ 🔄                                     |                                     |       |  |  |

図 12 データベースの管理画面

1. レコードの削除：上の一覧表の「選択」欄で、削除したい検索結果を選択する。「選択したレコードの削除」ボタンをクリックするとデータベースから削除される。
2. データベースの保存：「データベースの保存」ボタンをクリックすると、ダウンロード用のファイルブラウザが現れるのでダウンロード・保管する。
3. データベースの復元：「データベースの復元」ボタンをクリックすると、アップロード用のファイルブラウザが現れるので「保管したデータベース」ファイルを選択する。ファイルをアップロードすると、サーバーにあるデータベースに上書きされる。
4. データベースの初期化：「データベースの初期化」ボタンをクリックすると、サーバーにあるデータベースの全データが削除、初期化される。
5. 一括ダウンロード：「一括ダウンロード」ボタンをクリックすると、一覧表の選択欄で選択してある検索結果の pdf、及び、ReRek 情報ファイルを含むフォルダを zip 圧縮した後、ダウンロード用のファイルブラウザが現れるのでダウンロードする。

## 10. ログアウト

「メインメニュー」の「logout」ボタンをクリックしてログアウトする。ログアウトをせずに、ウィンドーを閉じ、再び、同一ブラウザから接続すると、ログインした状態で「メインメニュー」に接続される。ユーザーを変更したい場合は、ログアウトをする必要がある。

## 11. 補足

### 11.1 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 が示される。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

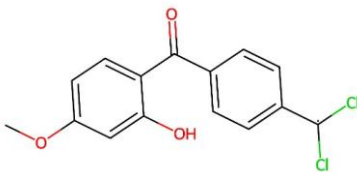
8-2 → 9 → 0  
          ↓  
          1

route #id

6  
2

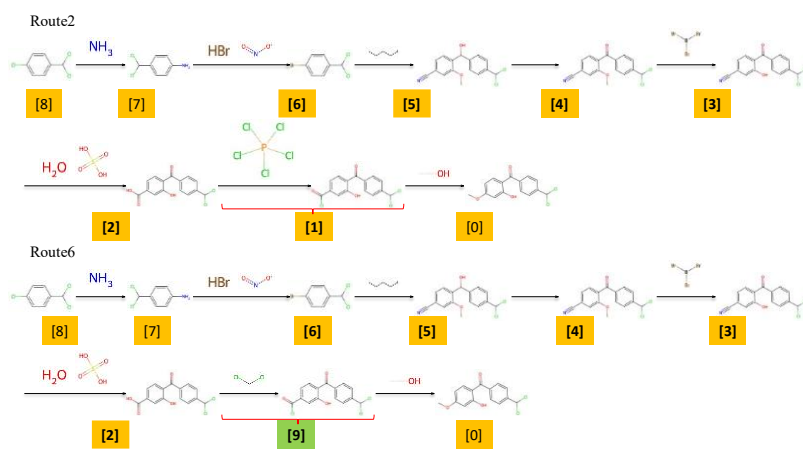
2 routes over 100 queries

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



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

1 ページ目

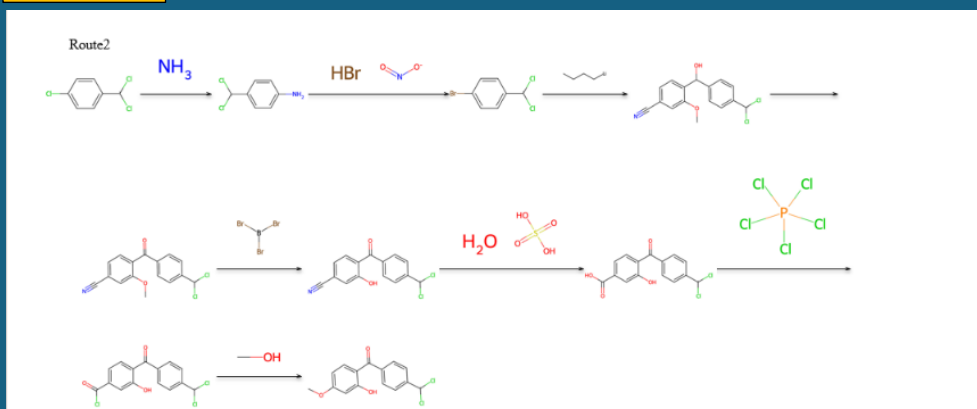


## 11.2 画像サイズ

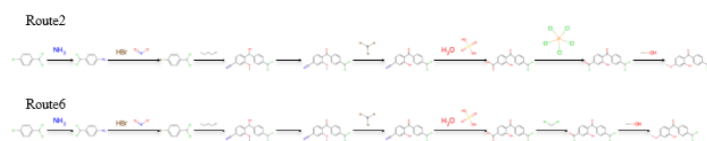
画像ファイルは svg フォーマットで作成し、pdf には svg 、pptx には jpg に変換して貼り付けている。jpg は約 1000x1000 pixel から、余白を除いた画像サイズで、サイズ指定に関わらず、同じ画像オブジェクトを用いている。(i.e. 画像の解像度は同一)

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



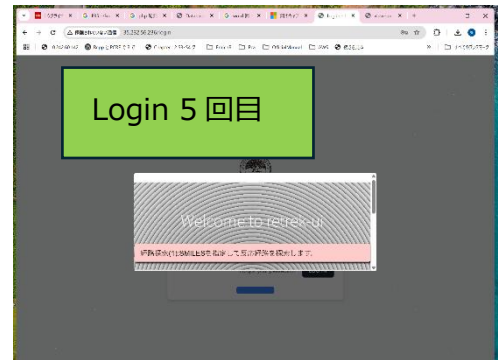
サイズ 0.1



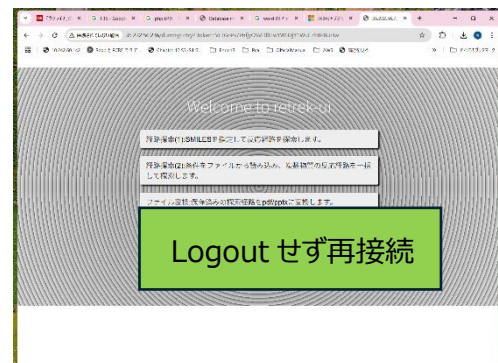


## 11.3 仕様に起因する不具合、及び、その対策

利用しているフレームワーク(Laravel のオリジナル)の仕様で、login 後にフレームとして、作業領域が作られるため、login/logout を繰り返すと、作業領域が小さくなり続ける。また、余白の灰色領域をクリックすると、親となる「login 画面」に推移して、作業中のフレームが消える。



解決策として、login 後に、ブラウザを閉じ、<http://35.232.56.236> に再接続すると、login 画面がスキップされ、余白の無いフレームで作業を行うことが可能になる。



## 11.4 (Unknown database 'retrek-ui') と出た時の対応

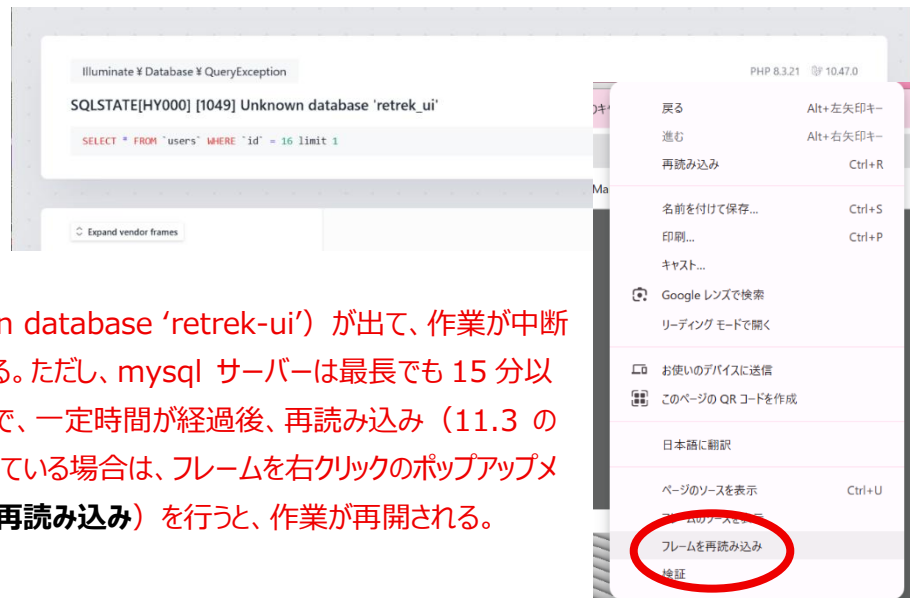
使用しているフレームワーク(Laravel)では、login 時のユーザー情報の管理を mysql サーバーで行っているが、現環境では、システムを稼働させているクラウドサーバーが不定期に、この mysql サーバー(docker コンテナ)を shutdown する(原因不明)。

対策として、15 分毎に mysql サーバーを確認して、起動していない場合は再起動をさせている。

Mysql サーバーが起動していないタイミングでは、login が行えず、また、ユーザー登録直後にサーバーがダウンすると、登録したユーザーデータが消えることが起きる。

また、上に加え、  
検索中にも、画面の推移などでユーザー情報を利用しているために、右図のような

エラー (Unknown database 'retrek-ui') が出て、作業が中断される可能性がある。ただし、mysql サーバーは最長でも 15 分以内には復旧するので、一定時間が経過後、再読み込み (11.3 のフレームで作業をしている場合は、フレームを右クリックのポップアップメニューで**フレームの再読み込み**) を行くと、作業が再開される。



## 11.5 「進捗表示(2)」への再接続

探索プロセスの実行中に、「経路検索(1)」並びに「経路検索(2)」を選択すると「進捗表示(2)」画面に推移し、実行中の経路探索の進捗確認が行える。

別の表現では、実行できる探索プロセスを一ユーザー一系統に限定しているため、進行中の経路探索の終了後、あるいは、中止後でないと、新たな「経路探索」は行えない。