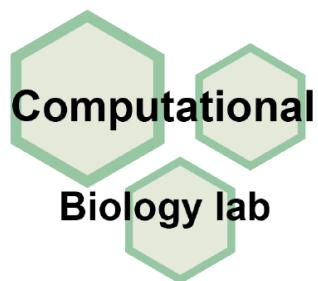


# User Guide

© 2025 Computational Biology Laboratory,  
The University of Tokyo  
<https://www.bi.a.u-tokyo.ac.jp/>  
All Rights Reserved.



# **Contents**

1. はじめに
2. Hugging Face Access Token の取得方法
3. インプットファイルの作成方法
4. ColabReaction の使用方法
5. 計算結果の解析方法
6. ローカル環境へのインストール方法
7. 引用情報

## はじめに

ColabReaction は、分子反応経路を迅速かつ直感的に解析するための Web ベースの計算化学ツール です。Google Colaboratory 上で動作するため、複雑なインストール作業は不要で、ブラウザだけですぐに使い始めることができます。

- ⌚ 数分で反応経路を可視化
- ⌚ 専門的なコマンド操作なしで高精度な結果を取得
- ✍ 初学者から専門研究者まで幅広く対応

本ツールは、以下の公式サイトからアクセスできます：

🔗 <https://ColabReaction.net>

🔧 ソースコードと技術的情報

ColabReaction のソースコードは GitHub にて公開されています：

💻 <https://github.com/BILAB/ColabReaction>

ノートブックの内部処理や拡張機能を確認・修正・再利用できます。

---

❓ 問い合わせ・フィードバック

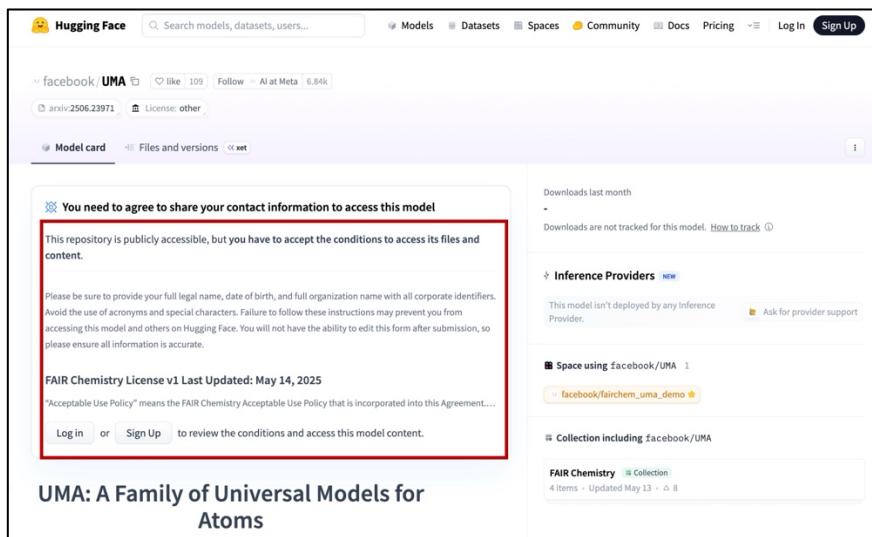
ご質問・不具合の報告・機能提案などがある場合は、GitHub リポジトリの「**Issues**」ページからご連絡ください：

➡ [GitHub Issues ページ](#)

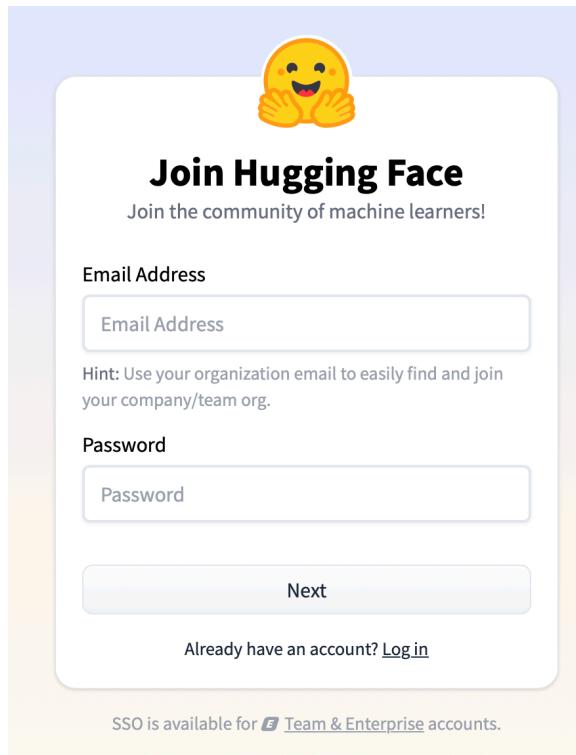
ユーザーのフィードバックは、今後の機能改善に活用させていただきます。

# Hugging Face Access token の取得方法

1. ColabReaction を使用する前に、<https://huggingface.co/facebook/UMA> にアクセスし、UMA の Access Token を申請してください。申請には Hugging Face のアカウントが必要です。下図赤枠部分の Sign Up を選択して申請を行います。



2. メールアドレスとパスワードの設定を行います。



3. ユーザー名の設定を行います。

The screenshot shows the 'Complete your profile' form. It includes fields for 'Username' and 'Full name'. There are sections for 'Avatar (optional)' with an 'Upload file' button and a 'Twitter account' field. Another section for 'GitHub username (optional)' and 'LinkedIn profile (optional)'. A 'Homepage (optional)' field and an 'AI & ML interests (optional)' field are also present. At the bottom, there is a checkbox for accepting the 'Terms of Service' and 'Code of Conduct', followed by a 'Create Account' button.

4. Hugging Face からメールが届くので、「**Confirm your email address by clicking on this link:**」のリンクをクリックしてください。

5. アカウント作成が完了すると以下の画面になります。Expand to review and access をクリックしてください。

The screenshot shows the Hugging Face model card for 'facebook/UMA'. At the top, there is a search bar and navigation links for Models, Datasets, Spaces, Community, Docs, Pricing, and a globe icon. Below the header, a yellow banner says 'Please check your email address for a confirmation link' with a 'Resend confirmation email' button. The main content area shows basic model information: 'facebook/UMA' (114 likes, 6.92k followers), 'arxiv:2506.23971', 'License: other', 'Model card', 'Files and versions', and a 'More' button. A red box highlights a message: 'You need to agree to share your contact information to access this model'. This message is preceded by 'This repository is publicly accessible, but you have to accept the conditions to access its files and content.' Below this, there is a note about providing full legal name, date of birth, and organization name, and a warning about avoiding acronyms and special characters. At the bottom, it says 'FAIR Chemistry License v1 Last Updated: May 14, 2025' and 'Acceptable Use Policy' (with a link). There is also a 'Expand to review' and 'Expand to review and access' button. To the right, there are sections for 'Downloads last month', 'Inference Providers', 'Space using facebook/UMA', 'Collection including facebook/UMA', and 'FAIR Chemistry Collection'.

6. 下部のフォームに必要事項を記入してください。「I accept the terms and conditions」にチェックを入れ、「Agree and send request to access repo」をクリックしてください。

By agreeing you accept to share your contact information (email and username) with the repository authors.

**First Name**

**Last Name**

**Date of birth**

**Country**

**Affiliation**

I accept the terms and conditions  
Your country and region (based on approximate Internet address) will be shared with the model owner.

Agree and send request to access repo

7. 申請が完了すると以下の画面になります。申請が受理されるまで、少し時間がかかります。

 You need to agree to share your contact information to access this model

This repository is publicly accessible, but you have to accept the conditions to access its files and content.

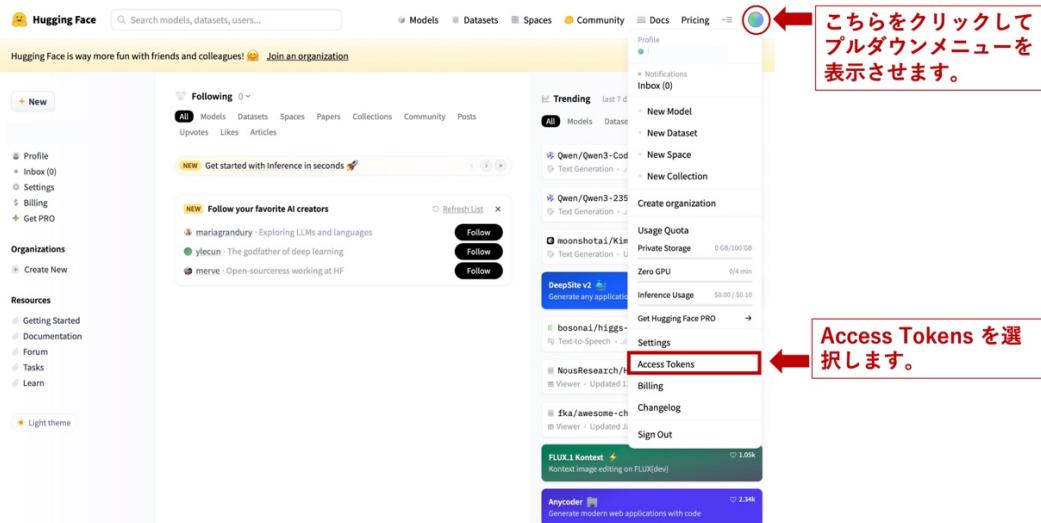
Please be sure to provide your full legal name, date of birth, and full organization name with all corporate identifiers. Avoid the use of acronyms and special characters. Failure to follow these instructions may prevent you from accessing this model and others on Hugging Face. You will not have the ability to edit this form after submission, so please ensure all information is accurate.

**FAIR Chemistry License v1 Last Updated: May 14, 2025**

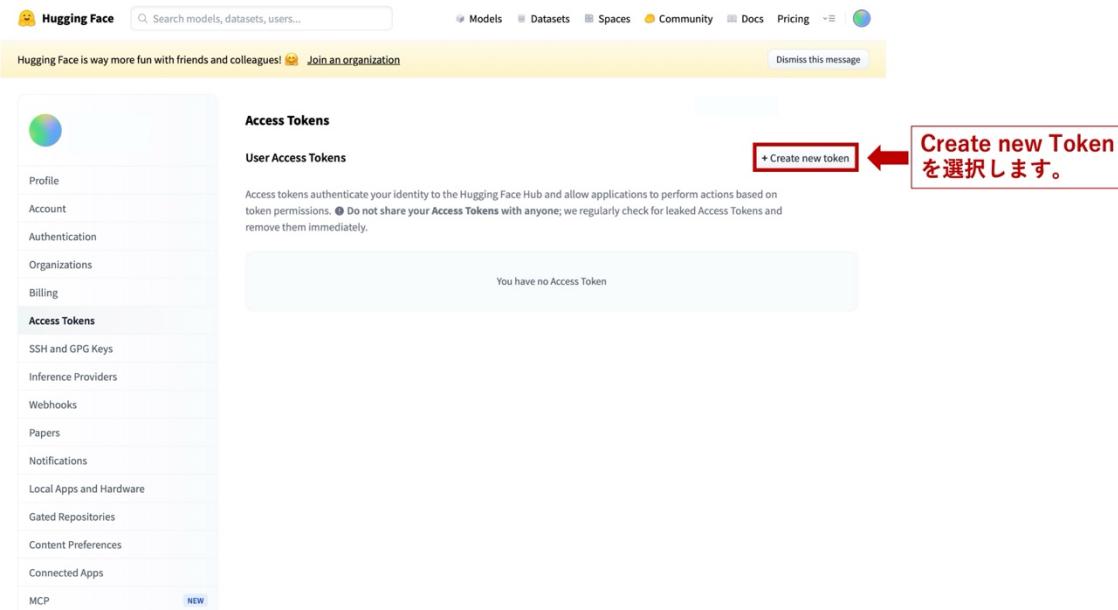
“Acceptable Use Policy” means the FAIR Chemistry Acceptable Use Policy that is incorporated into this Agreement....

Your request to access this repository has been submitted and is awaiting a review from the repository authors. You can check the status of all your access requests in [your settings](#).

## 8. 申請が完了したら、右上のメニューから「Access Token」を選択してください。



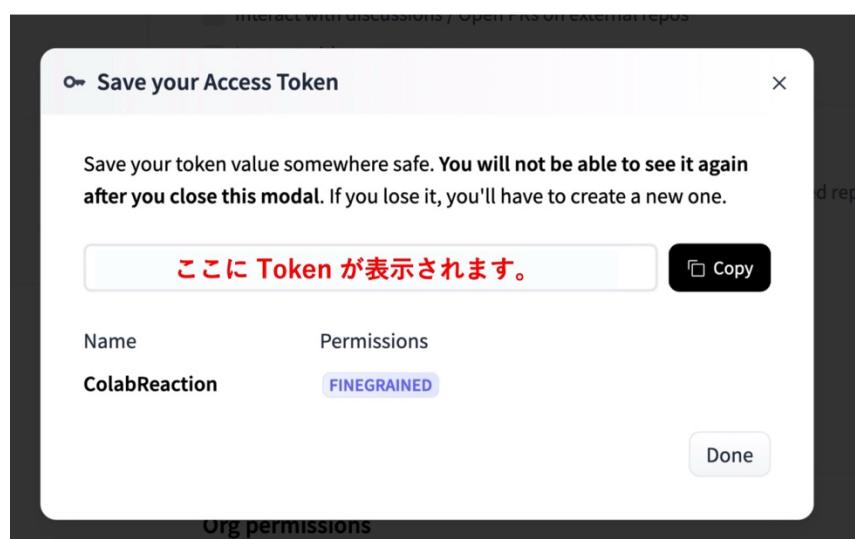
## 9. 画面右上の「+ Create new Token」をクリック。Repositories Permissions の項目で「Facebook/UMA」を選択し、新しい Token を作成してください。



10. Token name には ColabReaction と入力してください。または任意の名前でも構いません。Repositories permissions から facebook/UMA を選択してください。



11. 表示された Token Value は今後の操作で必要になるため、必ず控えておいてください。



# インプットファイルの作成方法

## 分子可視化ソフトウェアでの分子作成

ColabReaction では、反応物(reactant)および生成物(product)の分子構造ファイルを入力として使用します。これらの分子構造は、以下のような一般的な分子可視化ソフトウェアを用いて作成してください：

- GaussView(Gaussian 社の分子エディタ)
- Avogadro(オープンソースの分子エディタ)

作成した構造は、以下のいずれかの形式で保存してください

.xyz, .sdf, .mol, .com, .gjf, and .pdb.

## ナンバリング(原子の並び順)についての注意点

ColabReaction では、ダブルエンド手法(reactant と product の構造から反応経路を探索する方法)を採用しています。この手法では、2 つの構造のナンバリング(原子の並び順)が一致していることが重要です。

! 例: reactant で原子 1 が C、原子 2 が O、原子 3 が H である場合、product でも同様に原子 1 が C、原子 2 が O、原子 3 が H でなければなりません。

ナンバリングが異なると、反応座標の補間やアラインメントに失敗し、正しい経路が得られない可能性があります。構造の作成後は、分子エディタ上で原子の並び順を確認・調整することを強く推奨します。

GaussView では、Tools > atom list から手動で並び順を合わせることが可能です。

ナンバリングが異なっている場合、分子が弾け飛ぶような反応動画が見られます。

# ColabReaction の使用方法

ColabReaction は、Google Colaboratory 上で動作するノートブック型アプリケーションです。以下の手順に従って操作を進めてください。

## ① ColabReaction.net にアクセス

まず、以下のリンクから ColabReaction にアクセスします：

⌚ <https://ColabReaction.net>

---

## ② ノートブックの構成と実行方法

ColabReaction のノートブックは、以下の 2 つのセクションで構成されています：

**Setup Section**: 前準備(ファイルのアップロードや設定)を行う部分

**Execution Section**: 反応経路探索の計算を実行する部分

Google Colaboratory では、各セルにある「▶」ボタンをクリックして実行することで操作が進行します。

---

## ③ Setup Section(設定セクション)

このセクションでは、4 つのセルを順番に実行するだけで初期設定が完了します：

**Installation for App**

必要な依存パッケージ(ASE、FAIRCHEM など)をインストールします。

⌚ 所要時間: 約 2 分



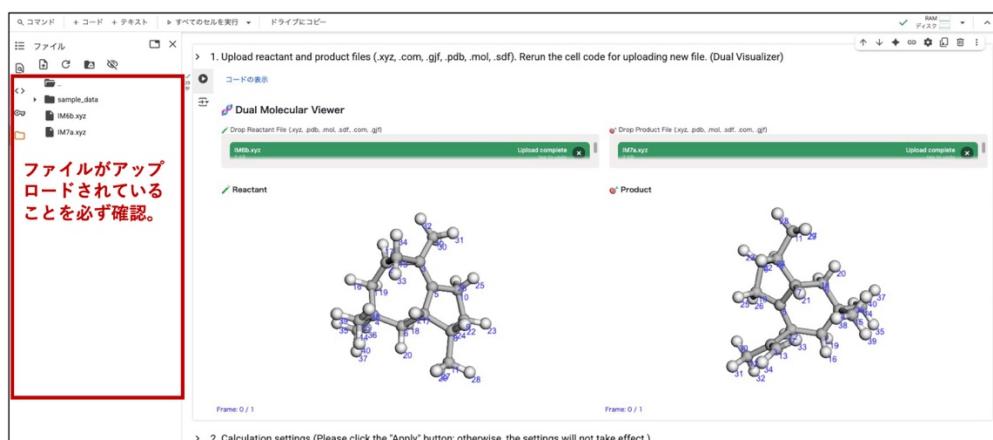
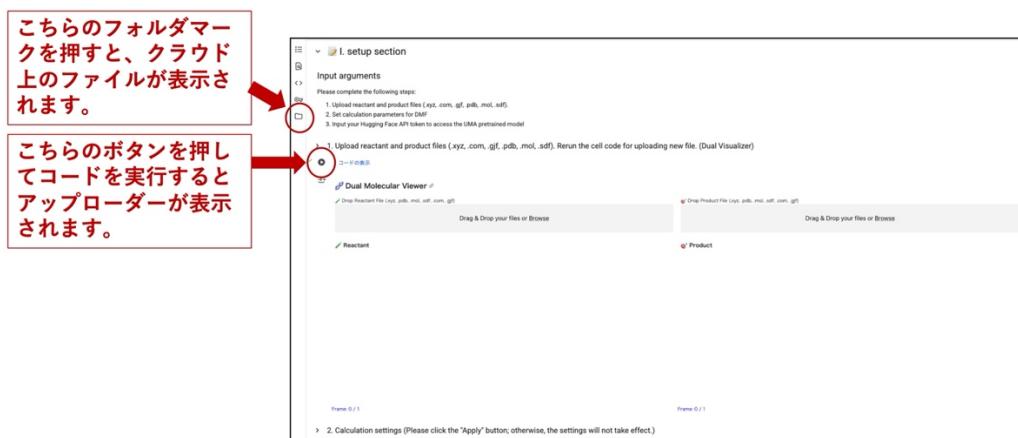
以下のエラーメッセージが表示されますが、無視して下さい。Panel のバージョンに関するエラーですが、ColabReaction の動作や計算結果には影響しません。

```
Attempting uninstall: panel
Found existing installation: panel 1.7.4
Uninstalling panel-1.7.4...
Successfully uninstalled panel-1.7.4
ERROR: pip's dependency resolver does not currently take into account all the packages that are installed. This behaviour is the source of the following dependency conflicts.
holoviews 1.21.0 requires panel>=1.0, but you have panel 0.0.post1.dev4642+gd80ecae which is incompatible.
Successfully installed comm-0.2.2 ipywidgets-8.1.7 jedi-0.19.2 jupyter_bokeh-4.0.5 panel-0.0.post1.dev4642+gd80ecae panel-3dmoi-0.1.0 plotly-6.2.0 py3dmol-2.5.1 rdkit-2025.3.3 widgetsnbextension-4.0.14
real    2m12.162s
user    1m31.910s
sys     0m12.615s
```

### Step 1 – 構造ファイルのアップロード

「」ボタンをクリックするとアップローダーが表示されます。 所要時間: 約 30 秒 reactant と product のファイルをアップロードします。対応形式は以下の通りです: .xyz, .com, .gjf, .pdb, .mol, .sdf

ファイルをアップロードすると3次元構造が表示されます。Google Colab 左側の部分で必ずクラウド上のディレクトリを確認し、ファイルが正常にアップロードされているかどうかを確認してください。

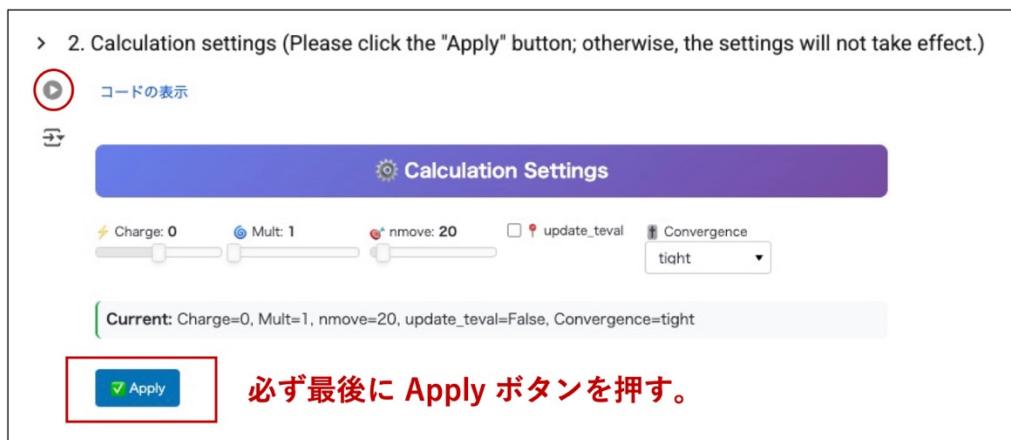


## Step 2 – 計算条件の設定

計算に使用するパラメータ(分子電荷、スピン多重度、探索ステップ数など)を入力します。

➡ 入力後は必ず "Apply" ボタンをクリックしてください。ボタンを押さないと設定が反映されません。

Step2 開始時にインプットファイルをチェックします。組成式や分子のナンバリングが不一致の場合、エラーメッセージが表示されます。



## Step 3 – Hugging Face Token の入力

UMA モデルを使用するために、取得済みの Hugging Face Access Token を入力します。

💡 各セルにある「▶」ボタンをクリックするか、セルを選択して Shift+Enter キーで実行できます。実行すると Hugging Face Access Token の入力欄が現れるので、入力してエンターキーを押してください。



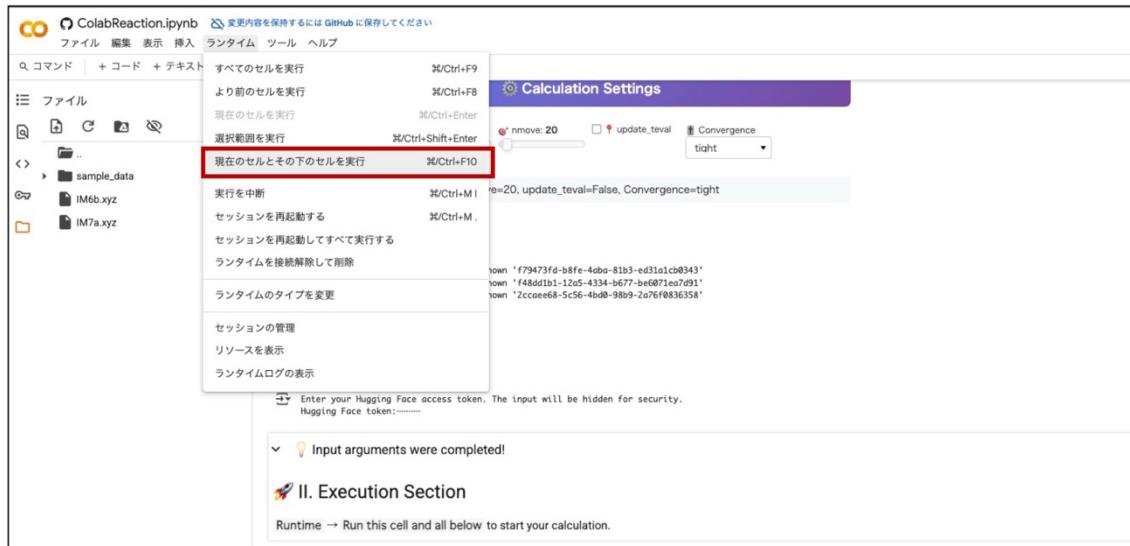
## ④ Execution Section(計算セクション)

Setup が完了したら、「II. Execution Section」に移ります。

II. Execution Section セルをクリックして選択します。

上部メニューの「ランタイム(Runtime)」→「現在のセルとその下のセルを実行」を選択します。

➡ 実行中はノートブックのセルが「実行中」表示になります。計算には分子のサイズや条件に応じて数分～20 分程度かかる場合があります。



## ⑤ 出力結果の取得

全ての計算が完了すると、結果ファイル一式が自動的に .zip 形式でダウンロードされます。

このファイルには以下が含まれています：

### 🔑 Key Output Files

#### DMF\_final

- DMF/UMA で最適化された最終的な反応経路
- .xyz: XYZ 形式の座標ファイル
- .traj: ASE トラジェクトリーファイル
- .pdb or .sdf: 入力ファイル形式が .pdb, .sdf または .mol2 形式の際に生成する座標ファイル
- \_gv.log: GaussView 対応の反応アニメーションファイル

#### DMF\_energy.csv

- DMF/UMA で最適化された反応経路のエネルギーファイル
- “Image” は、energy evaluation points を意味する

#### DMF\_ipopt.out

- DMF 初期経路の構築時(CFB-ENM モデル使用)における IPOPT による最適化ログ

## 📎 Supplementary Files

### `DMF_tmax`

- 各反応経路反復ステップにおける、経路上の最大エネルギー点(tmax)の構造情報
- .xyz: XYZ 形式の座標ファイル
- .traj: ASE トラジェクトリーファイル

### `timing.log`

- 計算に要した処理時間のログファイル

### `DMF_init`

- CFB-ENM(Correlated Flat-Bottom Elastic Network Model) を用いて生成された初期経路の構造情報
- .xyz: XYZ 形式の座標ファイル
- .traj: ASE トラジェクトリーファイル

### `fbenm_ipopt.out`

- 最適化の各ステップにおけるエネルギーの記録

### `energy_history.txt`

- 最適化の各反復ステップにおけるエネルギーの記録

### `force_history.txt`

- 最適化の各反復ステップにおける原子ごとの力の記録

### `local_maxima`

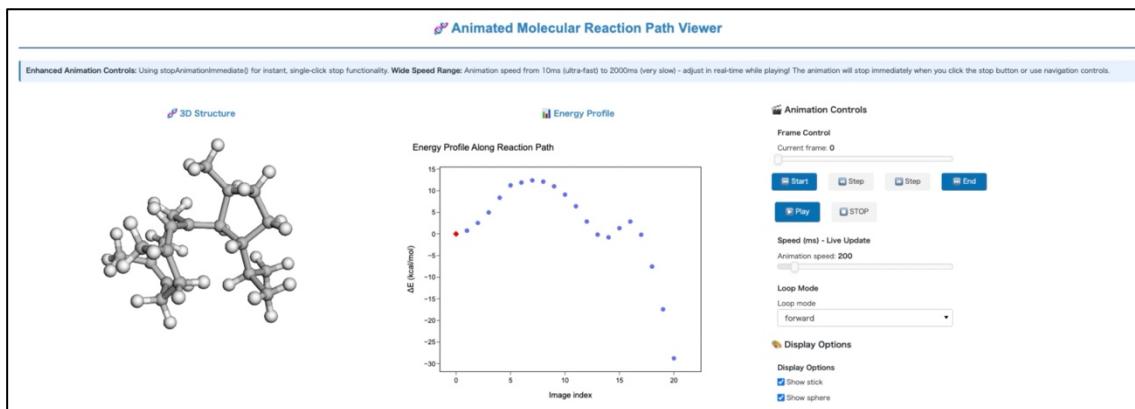
- .log: 振動計算の結果を GaussView で可視化するためのファイル

# 計算結果の解析方法

## 1. アニメーションの表示

計算終了後に「Animated Molecular Reaction Path」が表示されます。左側には分子の3次元構造が表示されます。中央にはエネルギーダイヤグラムが表示されます。右側にはアニメーションの再生コントローラーが表示されます。

エネルギーダイヤグラムの任意の点をクリックすると、どのプロットに対応した3次元構造が表示されます。右側のコントローラーで「 Play」ボタンを押すとアニメーションの再生が開始されます。コントローラー中央にある Speed というスライダーを調節することで、アニメーションの再生速度を変更することができます。「 Step」ボタンをクリックすると一コマずつ反応動画を進めることができます。



## 2. 振動数解析および遷移状態構造についての注意事項

ColabReaction では、エネルギーダイヤグラム上のすべての極大点に対して振動数解析を実行し、上位 3 つの虚振動モードをアニメーション表示します。

ただし、UMA/ASE による振動数解析はあくまで近似的なものであり、複数の虚振動が得られる場合があります。このため、振動数の絶対値や、振動モードの順位は必ずしも正確ではない点にご留意ください。

得られた虚振動のうち、意味のある反応座標に対応していると考えられるモードを選択し、その構造をもとに遷移状態構造最適化計算へと進んでください。

### ⚠️ 重要な注意事項

ColabReaction により得られる極大点構造は、遷移状態に非常に近い構造ではあります、厳密な意味での遷移状態構造ではありません。また、表示されるエネルギー

ダイヤグラムも、反応経路に沿ったエネルギープロファイルの概形を示すものであり、定量的な精度は保証されません。

研究成果を学術論文等で発表する際には、必ず以下の手順を実施してください：

- 得られた極大点の構造を初期構造とした遷移状態構造最適化計算
- それに続く IRC (Intrinsic Reaction Coordinate) 計算

これにより、遷移状態の厳密な同定と、反応経路の正当性の検証が行えます。

## ローカル環境へのインストール方法

ColabReaction は Google Colaboratory 上での実行を推奨していますが、ローカル環境においてもインストールおよび実行が可能です。

以下の手順は、Fedora 40 (conda 25.7.0) を搭載したスタンドアロン型ローカルサーバー、および Rocky Linux 8.9 (conda 25.3.1) 上で Torque ジョブスケジューラを用いた PC クラスターにおいて検証しました。

環境管理には Miniconda3 を使用しました。

以下に示すステップに従うことで、ソフトウェア環境を再現可能です。

### 1. conda 環境の作成と有効化

```
conda create -n colabreaction python=3.11 -y  
conda activate colabreaction
```

### 2. conda チャンネルの設定

```
conda config --env --remove-key channels 2>/dev/null || true  
conda config --env --add channels pytorch  
conda config --env --add channels nvidia  
conda config --env --add channels conda-forge  
conda config --env --add channels defaults  
conda config --env --set channel_priority strict
```

### 3. 基本パッケージのインストール

```
conda install -y -c conda-forge python=3.11 nodejs=20 rdkit numba ¥  
jupyterlab ipykernel  
python -m pip install --upgrade pip
```

### 4. CUDA 対応 PyTorch のインストール

```
python -m pip install --index-url https://download.pytorch.org/whl/cu124 ¥  
torch==2.6.0 torchvision==0.21.0 torchaudio==2.6.0
```

## 5. 追加依存パッケージのインストール

```
python -m pip install --no-cache-dir "panel @ ¥
git+https://github.com/luvwinnie/panel@d80acae43fa3"
python -m pip install --no-cache-dir "panel-3dmol @ ¥
git+https://github.com/luvwinnie/panel-3dmol.git@1a4398b66c2a"
```

```
conda install -y -c conda-forge numpy scipy ase cyipopt
python -m pip install --no-cache-dir git+https://github.com/shin1koda/dmf.git
```

## 6. PyTorch Geometric ライブラリのインストール

```
python -m pip install --no-cache-dir pyg-lib torch-scatter torch-sparse torch-
cluster torch-spline-conv -f https://data.pyg.org/whl/torch-2.6.0+cu124.html
```

```
python -m pip install --no-cache-dir torch-geometric
```

## 7. 可視化および補助パッケージのインストール

```
python -m pip install --no-cache-dir "param==2.2.1" "jupyter_bokeh==4.0.5" ¥
"comm==0.2.3" "plotly==6.3.0" "py3Dmol==2.5.2" "fairchem-core==2.3.0" ¥
git+https://github.com/shin1koda/dmf.git
```

```
conda install -y -c conda-forge ipywidgets
```

## 8. Jupyter カーネルの登録

```
python -m ipykernel install --user --name=colabreaction --display-name ¥
"Python (colabreaction)"
```

## 9. JupyterLab の起動方法

JupyterLab 起動前に, **Local\_ColabReaction.ipynb** を JupyterLab を実行する directory に置いて下さい。

### 9-1. スタンドアロン型ローカルサーバーの場合

(サーバー上で実行)

```
jupyter lab --no-browser --port=8888 --ip=127.0.0.1
```

(ローカル PC 上のウェブブラウザで実行)

以下の URL を開く:

<http://localhost:8888>

## 9-2. Torque 管理下のクラスター環境の場合

(サーバー上で実行し、計算ノードを確保)

```
qsub -l -q <queue_name> -l ¥  
    nodes=<compute_node>:ppn=8:gpus=1,walltime=01:00:00  
jupyter lab --no-browser --port=8888 --ip=127.0.0.1
```

(計算ノードが割り当てられた後、サーバー上で実行)

```
jupyter lab --no-browser --port=8888 --ip=127.0.0.1
```

(ローカル PC 上で、別ターミナルから実行)

```
ssh -J <username>@<headnode> -L 8890:localhost:8888  
<username>@<compute_node>
```

(ローカル PC 上のウェブブラウザで実行)

以下の URL を開く:

<http://localhost:8890>

備考:

利便性のため、`~/.ssh/config` ファイルに `LocalForward` オプションを設定しておくことを推奨します。

## 引用情報

ColabReaction をご自身の研究で使用された場合は、以下の論文を引用してください。

1. Karasawa, M.; Leow, C. S.; Yajima, H.; Arai, S.; Nishizaki, H.; Terada, T.; Sato H. *ChemRxiv* **2025**. DOI: [10.26434/chemrxiv-2025-zvkqk] (<https://dx.doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-zvkqk>)

また、ColabReaction の基盤となる DMF/UMA 手法に関する理論的背景については、以下の文献もあわせて引用することを推奨します。

2. Nakano, M.; Karasawa, M.; Ohmura, T.; Terada, T.; Sato, H. *ChemRxiv* **2025**. DOI: [10.26434/chemrxiv-2025-md8k6-v2] (<https://dx.doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-md8k6-v2>)
3. Koda, S.; Saito, S. Locating Transition States by Variational Reaction Path Optimization with an Energy-Derivative-Free Objective Function. *J. Chem. Theory Comput.* **2024**, 20 (7), 2798-2811.
4. Koda, S.; Saito, S. Flat-Bottom Elastic Network Model for Generating Improved Plausible Reaction Paths. *J. Chem. Theory Comput.* **2024**, 20 (16), 7176-7187.
5. Koda, S.; Saito, S. Correlated Flat-Bottom Elastic Network Model for Improved Bond Rearrangement in Reaction Paths. *J. Chem. Theory Comput.* **2025**, 21 (7), 3513-3522.
6. Wood, B. M.; Dzamba, M.; Fu, X.; Gao, M.; Shuaibi, M.; Barroso-Luque, L.; Abdelmaqsoud, K.; Gharakhanyan, V.; Kitchin, J. R.; Levine, D. S.; et al. UMA: A Family of Universal Models for Atoms. *arXiv preprint* **2025**, <https://ai.meta.com/research/publications/uma-a-family-of-universal-models-for-atoms>.
7. Levine, D. S.; Shuaibi, M.; Spotte-Smith, E. W. C.; Taylor, M. G.; Hasyim, M. R.; Michel, K.; Batatia, I.; Csányi, G.; Dzamba, M.; Eastman, P.; et al. The Open Molecules 2025 (OMol25) Dataset, Evaluations, and Models. *arXiv preprint* **2025**, arXiv:2505.08762. [physics.chem-ph]
8. fairchem; <https://github.com/facebookresearch/fairchem>