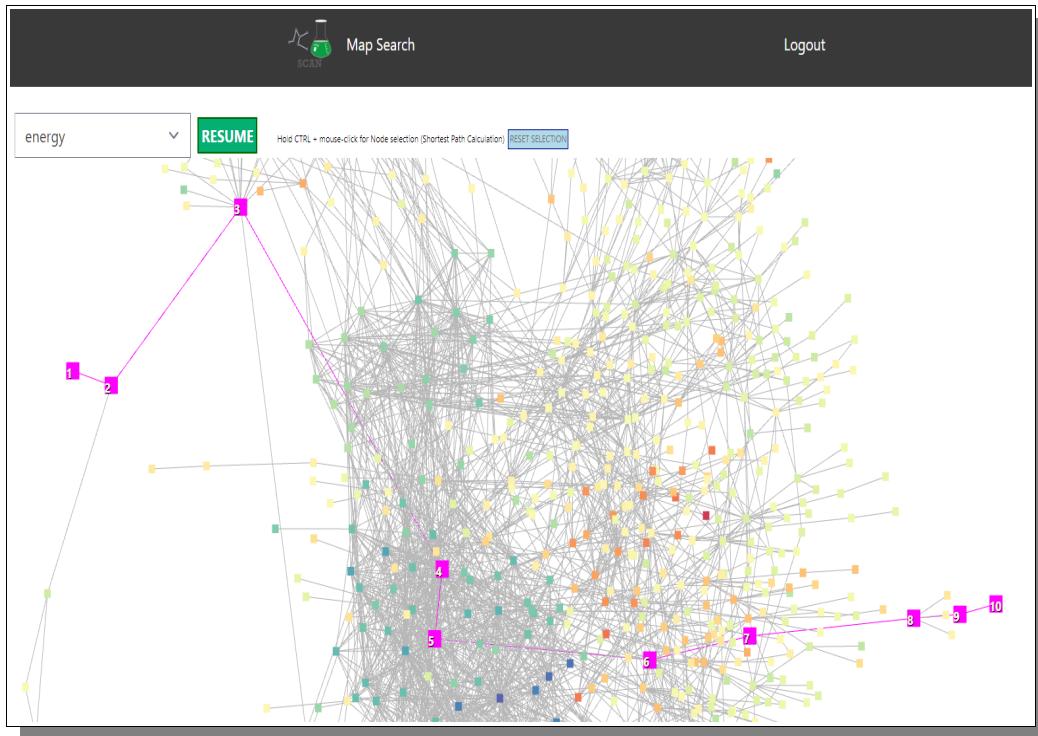


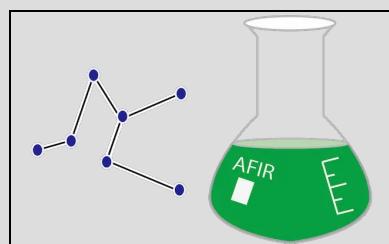


TAKAHASHI GROUP (情報化学研究室)

北海道大学



化学物質の作用やネットワークを検索するためのウェブアプリケーション



SCAN

使用説明書

日本語訳

北海道大学 - 高橋グループ - 情報化学研究室

SCAN 使用説明書

寄稿者

SCAN システム開発者

Micke Nicander Kuwahara
Jun Fujima

この文書の最終更新日

2023年4月10日,21:16

SCAN ウェブアプリケーション

[化学物質の作用とネットワークを検索する]

著作権 © 2018 Keisuke Takahashi, Micke Nicander Kuwahara

高橋グループにて(情報化学研究室) 北海道大学

SCANはGNU GPL License, Version 3.0の下でライセンスされています；

このファイルは、本ライセンスに準拠する場合を除き、使用することができません。

お客様は、次の場所で本使用許諾書のコピー入手することができます：

<https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.en.html>

適用される法律で要求される場合、または書面で合意される場合を除き、ソフトウェアは本ライセンスの下で頒布されるものは、「現状のまま」頒布されます、また、明示または黙示を問わず、いかなる種類の保証または条件も付けないものとします。本製品を使用するために必要なライセンスは「ライセンス」を参照してください。は、本ライセンスに基づく制限を受けることになります

詳細については、プロジェクトのGitHubをご覧ください。

<https://github.com/scan-team/scan-platform-test>

高橋グループ

北海道大学, 理学部, 化学専攻,

北区北 10 条西 8 丁目第 7 ビル 7-510 号室,

札幌, 060-0810, 日本.

scan-team@sci.hokudai.ac.jp

目次

寄稿者.....	1
目次.....	2
序文.....	3
はじめに.....	4
SCAN 建築.....	4
ウェブベースのブラウジングインターフェース.....	5
取扱説明書.....	6
SCAN フロントページ.....	7
SCAN トップメニュー.....	7
Scan フロントページフッター.....	7
ログインとユーザー アカウント.....	8
地図検索ページ.....	9
地図 詳細表示.....	11
リアクションマップの属性の一部.....	11
マップノードビュー.....	13
ノードの詳細表示.....	13
ノード属性の一部.....	14
マップエッジビュー.....	15
エッジ詳細図.....	16
一部のエッジ属性.....	17
マップグラフビュー.....	17
基本的な相互作用.....	19
高度な相互作用.....	19
ノードの選択.....	19
最短経路の選択.....	20
選択解除.....	20
グラフ描画モード.....	21
使用可能なグラフ描画モード.....	21
概要.....	23
図解インデックス.....	24

序文

クリエイターからひと言。



のマニュアルは、<https://scan.sci.hokudai.ac.jp> にある SCAN ウェブアプリケーションを使用しようとする人のための広範なガイドとなるよう試みています。インタラクティブな化学反応プラットフォームである SCAN は、化学反応ネットワークを分析するために開発されました。SCANは化学反応経路ネット

ワークデータベース、可視化、ネットワーク解析ツールを提供します。特に、SCANはウェブベースのプラットフォームであり、簡単な操作でインタラクティブな化学反応経路ネットワークの可視化およびデータサイエンス技術を行うことができます。SCANは、ユーザーフレンドリーなグラフィックユーザーインターフェースを提供するように設計されており、プログラミングやスキルセットに関する既存の知識をオプションとすることができます。したがって、SCANは化学反応ネットワークを分析し理解するための代替ツールとして提案される。

SCANは、基本的に化学反応データに特化したネットワークデータの可視化および分析ツールです。現在、ユーザーが個人的な化学反応ネットワークをアップロードするオプションはありませんが、その代わりに、SCANの開発チームと協力している独立したデータチームによって SCAN に提供されている、あらかじめロードされたデータマップを読み込み、閲覧、分析する機会が与えられています。データチームから提供されるデータは、北海道大学前田智教授率いる研究グループ iCReDD が作成した AFIR データ (Artificial Force Induced Reaction) である。SCAN の開発チームからすると、アプリケーションに読み込んで解析できるデータの種類に制限はないのですが、当面は AFIR データのみを提供することにしています。

つまり、SCAN ソフトウェア開発チームは、現在利用可能なデータの選択とアップロードには関与していませんし、データの内容については一切責任を負いません。私たちの関心は、ツールセットと、そのデータやサイト上のあらゆるデータでできることにあります。

データに関するお問い合わせは、北海道大学 iCReDD (<https://www.icredd.hokudai.ac.jp>) チームまでご連絡ください。

もし、当社のソフトウェアを使用する際に、ソフトウェア自体に関連する問題や改善点を発見された場合は、お気軽に当社までご連絡ください。SCAN はまだ未完成ですが、私たちの目標は、すべての化学研究者のために使いやすく、役に立つものにすることです。

2023年4月10日

SCAN ソフトウェアプロジェクトリーダー
高橋グループディレクター - 情報化学研究所
Professor Keisuke Takahashi

SCAN ソフトウェアシステムリードデベロッパー
Micke Nicander Kuwahara

章
1

はじめに

SCANとは何か、研究者・化学者として何ができるかを知ってください。

化学反応を理解することは、反応物から生成物がどのように作られるかという根本的な謎に答えることになります。第一原理計算では、化学反応は膨大な数の中間体を含むため、複雑な問題であることが明らかにされます。言い換えれば、化学反応は多数の分子間相互作用からなる複雑なネットワークの一形態として扱うことができる。分子間相互作用の詳細を実験で捉えることは難しいが、このような複雑な反応マップを理解するためには、第一原理計算が大きな役割を果たす。特に化学反応の自動探索ツールとしては、Berny アルゴリズムを用いた凍結ストリング法、シングルエンド/ダブルエンド成長ストリング法、人工力による反応（AFIR）、反応機構生成ツール（RMG）、kinbot などが数多く開発されている。しかし、このような複雑な反応ネットワークをどのように理解し、どのように知識を抽出するのかという問題があり、ネットワークから知識を抽出するためのツールが必要となっている。

化学反応ネットワークから知識を抽出するためには、複数のステップとプロセスが必要です。特に、化学反応データベースの整理、統計解析、ネットワークの可視化、グラフ理論が関与している。ネットワークの可視化ツールとしては、Cytoscape や Gephi などがあり、ネットワークの可視化とグラフ理論による解析が可能です。さらに、中心性解析などのグラフ理論が中間体の決定に有効であることが実証されている。しかし、これらのプロセスは互いに強く結びついているため、各プロセスの個別展開では知識の抽出が制限される可能性があることを意味しています。また、ネットワークデータの可視化や解析には、特殊なスキルや高度なプログラミングスキルが必要とされることが多く、それが解析の障壁となることもある。そのため、これらのプロセスを同時に利用できる、集中的かつインタラクティブで使い勝手の良いプラットフォームを構築することが重要である。ここでは、Searching Chemical Action and Network (SCAN) を紹介し、インタラクティブな化学反応ネットワークのためのプラットフォームを設計し、AFIR 法によって化学反応ネットワークを生成することを提案します。SCAN プラットフォームは、<https://scan.sci.hokudai.ac.jp/>、第一原理計算で生成された化学反応ネットワークデータを探索、視覚化、分析することができます。このように、SCAN は複雑な化学反応ネットワークを検索し、理解することができます。

SCAN 建築

SCAN のコンセプトは、第一原理計算で生成された化学反応ネットワークを保存・共有し、インタラクティブなネットワークの可視化とネットワーク解析を提供することです。データの柔軟な再利用を実現するために、データレイク、データウェアハウス、データマートからなるレイヤードアーキテクチャを採用しています。ここでは、プロトタイプの化学反応ネットワークデータとして、

SCAN 使用説明書

過去に公開された AFIR 法で生成した化学反応ネットワークデータを使用する。AFIR で生成された化学反応ネットワークデータには、生データに分類される多数のログファイルが含まれています。これらの生データは、何も手を加えず、そのままの形で保存される。このデータ保存単位をデータレイクと定義する。データレイクから提供された生データは、ネットワークの可視化やネットワーク分析のために前処理され、データウェアハウスに保存されます。最後に、データウェアハウスにはデータマートがアクセスし、データの可視化、データ分析、データ共有のためのアプリケーション・プログラミング・インターフェースなどのアプリケーションサービスを提供する。

ウェブベースのブラウジングインターフェース

ウェブアプリケーションは、3層構造のアーキテクチャを基盤として構築されています。Web アプリケーションはデータマートに直結しており、ユーザーはプログラミングやデータ前処理の経験がなくても、Web グラフィックユーザーインターフェースに直接アクセスして、ネットワークの可視化、ネットワーク分析、データダウンロードを行うことができます。特に、化学反応解析に必要な知識やスキルを持たない研究者にも、化学反応解析へのアクセスを拡大することができる点が魅力的です。

The screenshot shows the 'Map Search' interface of the SCAN application. At the top, there is a logo with the letters 'SCAN' and a flask icon, followed by 'Map Search' and 'Logout'. Below the header, the title 'Map Search' is displayed. A search bar contains the letter 'C' and a dropdown menu set to 'atoms'. Below the search bar are two dropdown menus: 'Sort' (set to 'id') and 'Order' (set to 'asc'). A blue 'SEARCH' button is located to the right of these controls.

Below the search controls, a message states 'Results: 14 map found.' There are two search results listed, each enclosed in a box with a 'switch view' button:

Result 1:
Chemical structure: OC(=O)C(F)(F)N
Id: 01GP0GY4CJ35799A4K1TTYJ68R
Atoms: C,O,H,N,H,C,F,F
Lowest_energy: -482.440709102611
Highest_energy: -481.838406291197
EQs: 1765, **TSs:** 6526
Created: January 5, 2023
Updated: January 5, 2023

Result 2:
Chemical structure: OC(=O)C(F)(F)N
Id: 01GPOH20WYRYEQ8EJBK0KHV347
Atoms: C,O,H,N,H,C,F,F
Lowest_energy: -482.275795362779
Highest_energy: -481.885083146466
EQs: 1231, **TSs:** 6714
Created: January 5, 2023
Updated: January 5, 2023

章

2

取扱説明書

あなたは今、コンピュータの前に座り、ブラウザを開き、SCANのウェブサイトを現在のタブに読み込ませています。では、どうする？何をどうすればいいのでしょうか？一歩一歩、一緒に探していきましょう。

この章では、SCANを研究や仕事で使うために必要なこと、データマップを読み込む方法、データマップを様々な方法で研究する方法などを説明しようと思います。ノードグラフを開いて分析し、化学反応データの各ノードやエッジの詳細を調べる方法。しかし、あなたが何か新しい発見をするかどうかは、あなた次第であり、このマニュアルの範囲ではありません。私たちはソフトウェア開発者であり、化学者ではありません。しかし、このツールを提供することで、あなたの訓練された目と幅広い知識が、あなたが今まで見たことのない新しい何かを発見し、そこから発展させることを期待しています。このウェブツールを最大限に活用するための方法をお教えしましょう。

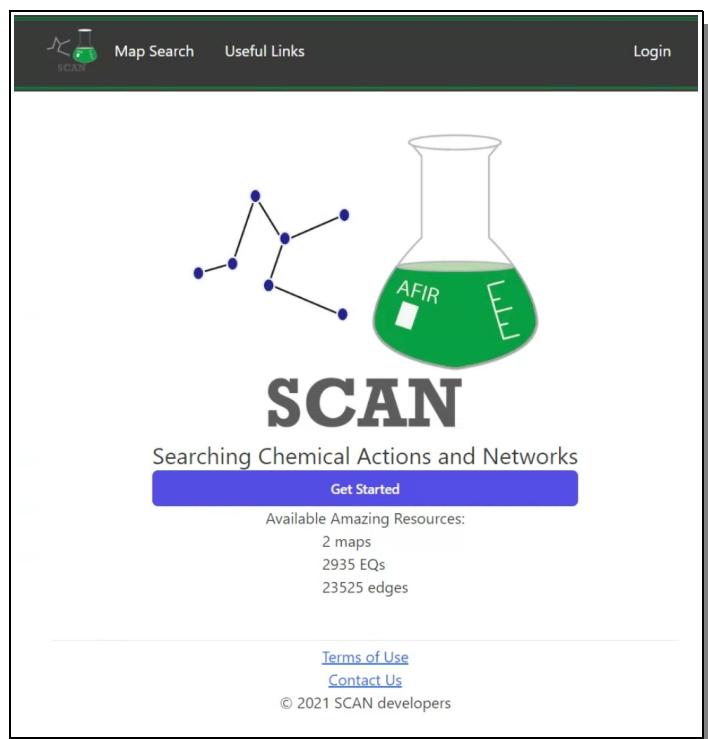


Figure 1: SCANの訪問者が最初に出会う景色です。

SCAN フロントページ

SCAN Web アプリケーションの訪問者が最初に見るのは、Figure 1 に見られるような SCAN フロントページです。一番上にあるのはトップメニューで、利用可能なオプションがあり、SCAN 訪問の間中、簡単で素早いナビゲーションのために存在することになります。その下には SCAN のロゴと完全なアプリケーション名が表示されています。その下には反応地図検索エリアへのクリックアクセスボタンがあり、SCAN データベースに保存されている現在利用可能なデータ量に関するいくつかの情報の上にあります。ページの下部には、「使用条件」ページへのリンクと、サポートやその他の問い合わせのための SCAN 開発チームのメールアドレスへの「連絡先」リンクがあります。

SCAN トップメニュー

SCAN のトップメニュー (Figure 2) は、基本的に 4 つの選択肢しかなく、実用的には実質 1 つの選択肢しかないと言ってもいいほど、小さく効果的です。



Figure 2: SCAN Web アプリケーションのトップメインメニュー

左の小さな SCAN ロゴは、オリジナルの Start Front Page、いわば Home に戻るためのクリック可能なリンクです。地図検索」は、利用可能な反応地図のいずれかを検索することができるページにユーザーを連れて行きます。Useful Links' は、有用なリンクや文書のリストにユーザーを連れて行きます。最後のメニューは、右端にある「ログイン」（すでにログインしている場合は「ログアウト」）オプションです。

Web アプリケーションのデータやツールにアクセスするためには、ユーザーがログインし、適切な SCAN アカウントを持っていることが必要である。

Scan フロントページフッター

SCAN のフロントページの下部には、小さなフッター (Figure 3 のように) があり、有用な情報とアクセスポイントが記載されています。

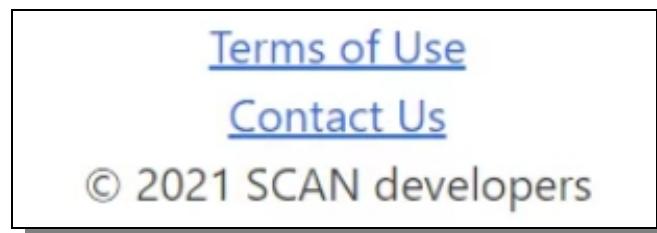


Figure 3: フッターリンクは、最初のフロントページでのみ使用可能です。

利用規約」リンクは、SCAN ウェブアプリケーションの使用に関するすべての法的問題を表示するページに移動します。「お問い合わせ」リンクは、ユーザーに関連するメールプログラムを開き、ユーザーが気になることについて SCAN 開発チームにメールを送信することができます。

SCAN 使用説明書

ログインとユーザーアカウント

ユーザが初めて SCAN ウェブアプリケーションにアクセスした場合、それ以上アクセスするためには SCAN アカウントを作成する必要があります。これを行うには、アプリケーションの上部にある「ログイン」メニュー項目をクリックするだけで、現在のビューがログイン/サインアップのビューに置き換えられます（下の Figure 4 に示されているように）。

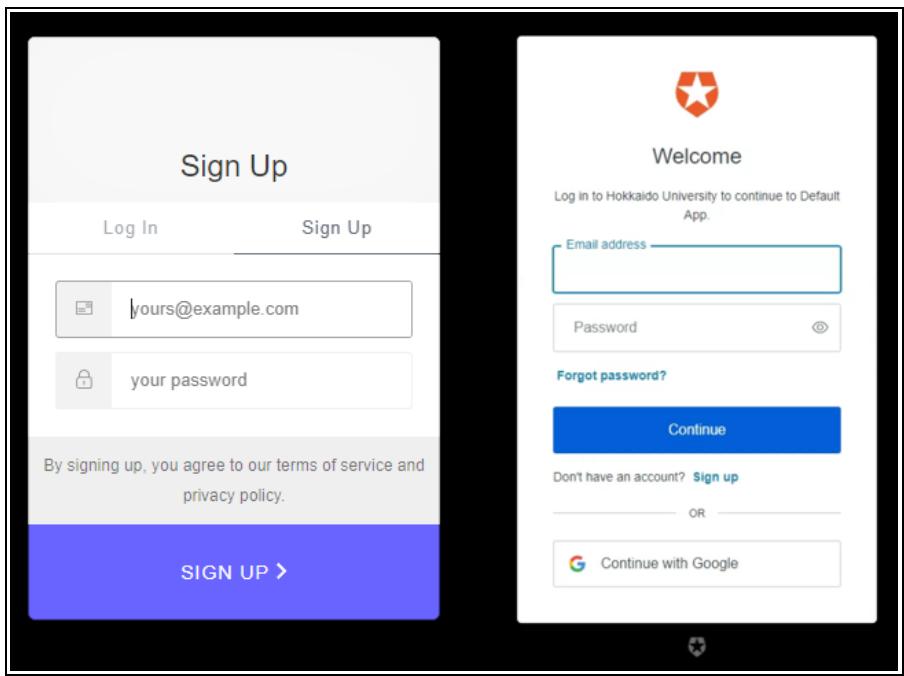


Figure 4: 左側が「サインアップ」フォームで、リピーターの場合は右側の「ログイン」フォームが使用されます。

アカウントの作成は迅速かつ簡単で、ユーザーは作成後すぐにサインインすることができ、それ以上の手間はかかりません。特に、パスワードを忘れてしまい、パスワードを変更するためのメールを送るよう要求された場合は、有効なメールアドレスを使用することが重要です。また、Google アカウントと紐付けることも可能です。ログインが認証システムによって承認されると、ユーザーはすぐに SCAN Web アプリケーションのフロントページに戻りますが、唯一の違いは、メインメニューの右上隅に、以前の「ログイン」の代わりに「ログアウト」というオプションがあることです（Figure 5 の下図参照）。

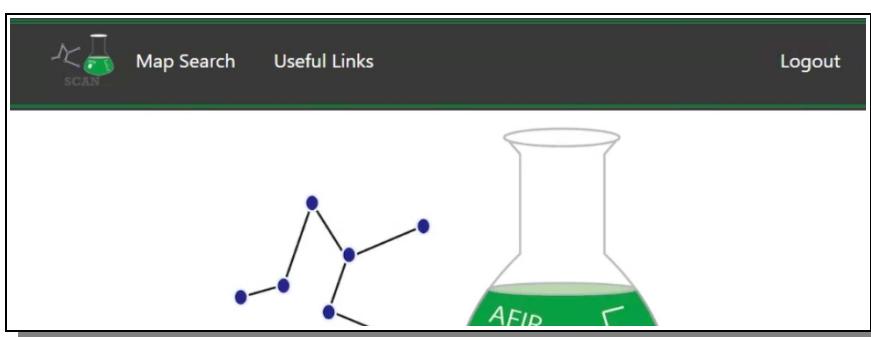


Figure 5: ユーザーが以前に、そして最近ログインしていた場合、自動的に再ログインされます。

地図検索ページ

SCAN ウェブアプリケーションをロードした後、本当の楽しみが始まるのは地図検索ページであり、通常、速度が速くなる場所です。地図検索ページは基本的に、Figure 6 のように小さくてシンプルな検索フォームで構成されています。

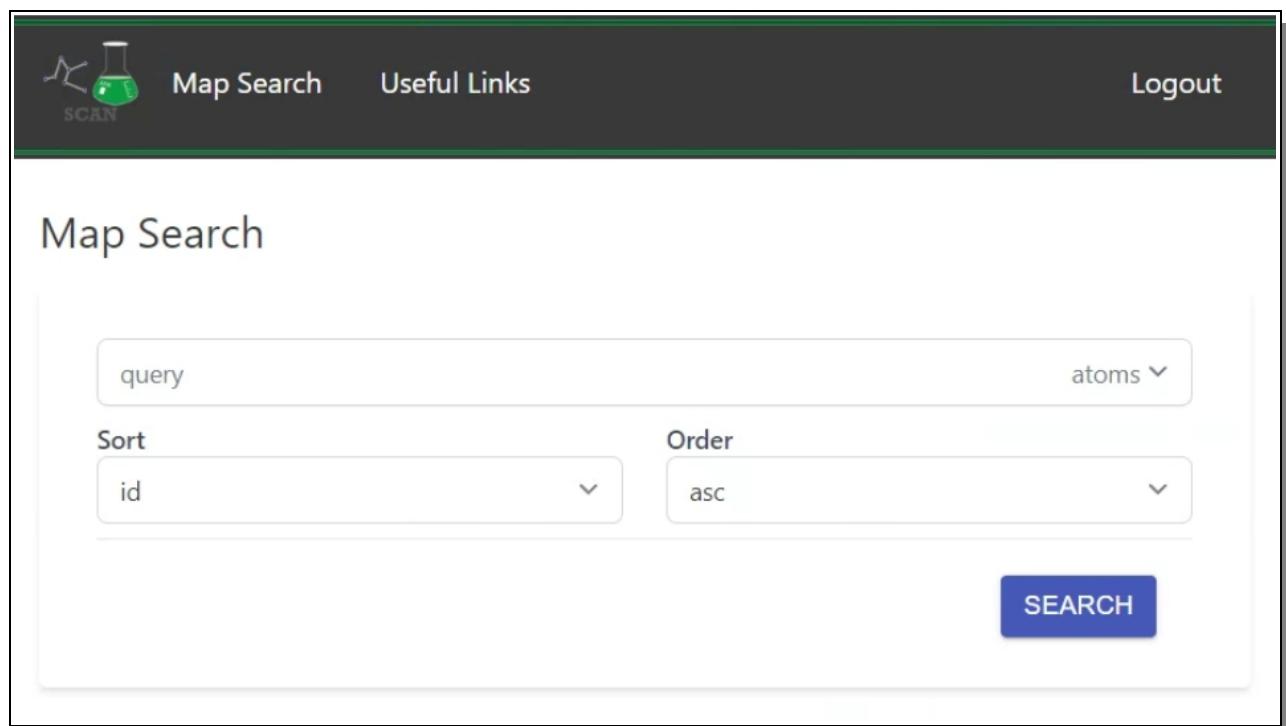


Figure 6: スキャンマップサーチは、SCANの魅力をさらに掘り下げるための入り口です。

クエリファイルでは、ユーザーは興味のある原子を入力し、その原子を含むマップがあるかどうかを検索することができます。クエリーを入力して「Search」をクリックしてしばらくすると、Figure 7 に見られるように、反応地図のリストを含む結果が下に表示されます。

リストの各項目は特定の分子の反応マップであり、上部、右側の分子の化学的説明は反応マップの名前であり、その特定のマップに行くためのクリックできるリンクでもある。その下に、内部データベース ID（正確に参照するのに良い）、含む原子のリスト、分子のあるバージョンの最低エネルギー値と別のバージョンの最高エネルギー値など、マップを説明する他の有用な属性がある。また、マップのノードである EQ の数（ベース分子のバージョンを意味する）、エッジまたはリンクである TS の数（分子が別のバージョンに変換するために取ることができるパス）も表示されています。マップが作成され、更新されたときの情報も最後に表示されます。アイテムブロックの左側には、分子のインタラクティブな 3D モデルがあり、専用の四角の中でマウスを使って回転させたり、見たりすることができる。

結果リストが長い場合、ユーザーは Figure 8 に見られるように、地図が含む複数の属性に基づいてリストを並べ替え、目的の地図を見つけやすくすることができます。

Figure 7 の各 3D 分子の上部にある「Switch View」ボタンをクリックすると、分子の表示方法を変更することができます。Figure 9 のように、2つ目のビューは 3D ですが、よりカラフルで 2D 的な印象を与えます。

SCAN 使用説明書

Map Search

C atoms

Sort: id Order: asc

SEARCH

Results: 2 map found.

switch view

[NC\(=O\)N.O.O](#)
Id: 01FKZ1SHNKGVCTB9727XAKERS
Atoms: O,C,N,H,H,N,H,H,O,H,H,O,H,H
Lowest_energy: -377.61648301912
highest_energy: -377.2944551885
EQs: 1159, TSs: 12156
Created: November 8, 2021
Updated: November 8, 2021

switch view

[NC\(=O\)N.O.O](#)
Id: 01FKZV7J81R92AG1YRBGJFQWRS
Atoms: O,C,N,H,H,N,H,H,O,H,H,O,H,H
Lowest_energy: -377.773878213754
highest_energy: -377.254546715411
EQs: 1776, TSs: 11369
Created: November 8, 2021
Updated: November 8, 2021

Showing 1 to 2 of 2 results < 1 >

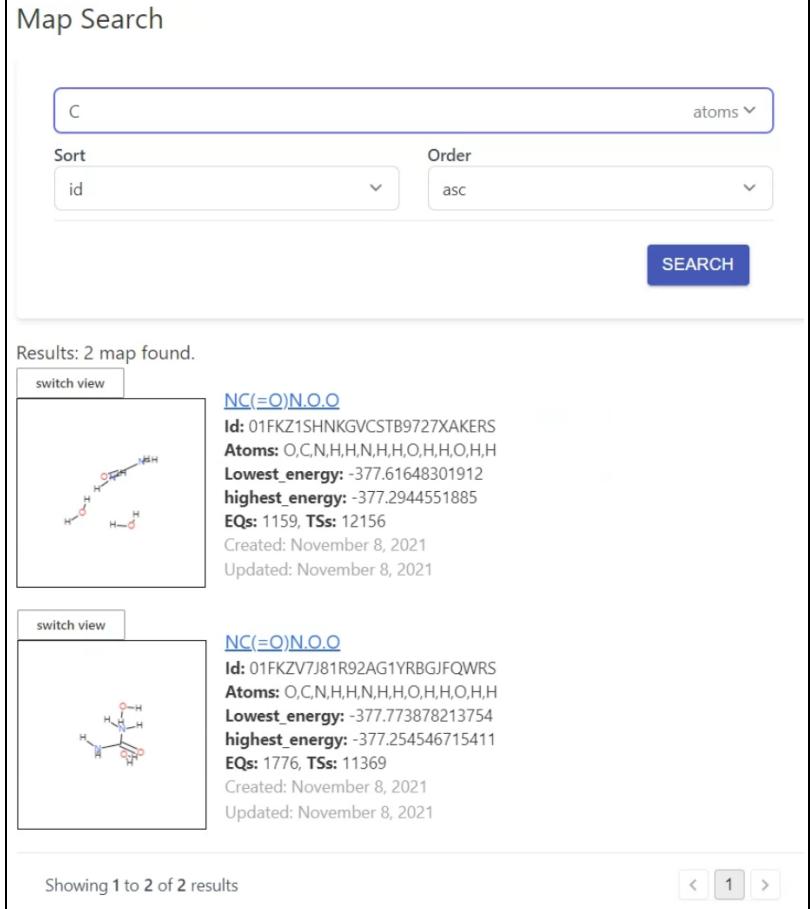


Figure 7: 選択した原子を含む反応マップを表示する検索結果です。

Sort: id Order: asc

id
atom_name
inibyz
fname_top_abs
fname_top_rel
natoms
lowest_energy
highest_energy
neq
nts
npt
jobtime
universal_gamma
infile
scpathpara
jobtype
pathype
nobondrearrange
siml_tempearture_kelvin
siml_pressure_atm

SEARCH

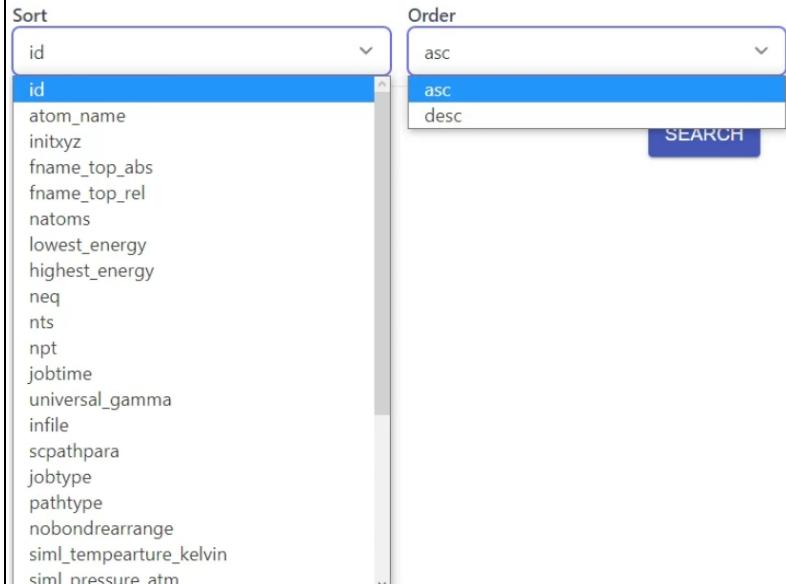


Figure 8: リアクションマップの検索結果は、属性に基づくソートと順序付けの両方が可能です。

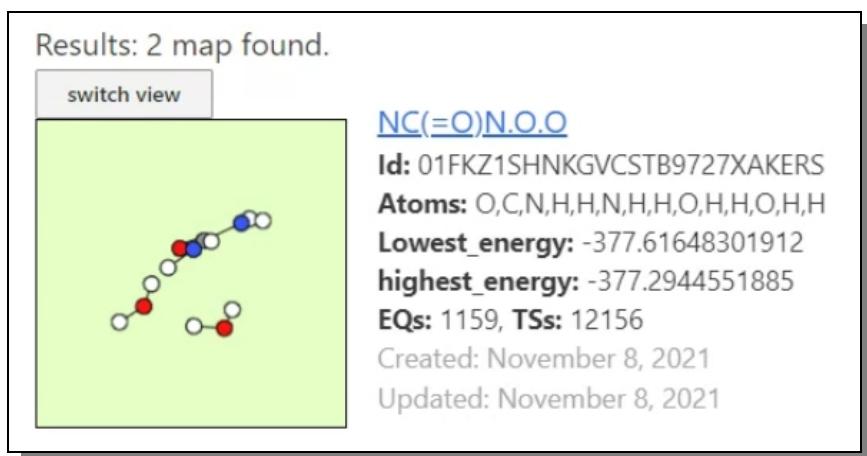


Figure 9: 3D分子を見る際に使用するビューは2種類あります。

どのマップを詳しく見るか決めたら、青い分子名のリンクをクリックし、反応マップ詳細表示ページに移動します。

地図 詳細表示

特定の地図をクリックすると、その地図に含まれる利用可能なすべての属性を示すページに送られます。このような地図情報ページの例を Figure 10 に示します。

以下、これらの属性のうち、より重要なものをより詳細に説明する。

リアクションマップの属性の一部

atom_name

これらはすべて、含む原子の名前である。

natoms

分子内に存在する原子の数です。

lowest_energy

これは、反応マップに存在する最も低いエネルギー値である。

highest_energy

これは、反応マップに存在する最も高いエネルギー値です。

neq

これは反応マップに存在するノードの数で、分子の可能なバリエントの数です。この値はクリック可能で、ユーザはすべてのノードを個別にリストした新しいページに移動することができます。

SCAN 使用説明書

npt

これは反応マップに存在するエッジ（リンク）の数で、ある分子バリエントから別の分子バリエントへの可能な経路の数です。この値はクリックすることができます、すべてのエッジを個別にリストした新しいページにユーザーを移動させます。

siml_temperature_kelvin

異なるバージョンの地図に使用されたケルビンの度数はどれか。

Go to GraphViewer	
NC(=O)N.O.O	
id:	01FXZ1SHNKGVCSB9727XAKERS
atom_name	[“O”, “C”, “N”, “H”, “H”, “N”, “H”, “H”, “O”, “H”, “H”, “O”, “H”, “H”]
natoms	14
lowest_energy	-377.61648301912
highest_energy	-377.2944551885
neq	1159
nts	0
npt	12156
jobtime	2021-09-13T09:50:35
universal_gamma	100
infile	none
scpathpara	none
jobtype	sc-afir
pathtype	luppath
nobondrearrange	0
siml_temperature_kelvin	[200,300,400]
siml_pressure_atm	1
level	wb97xd/sv
spinmulti	1
totalcharge	0
jobstatus	finished
ngradient	4049988
nhessian	118978
elapsedtime_sec	112936
registerant	
creator	
created_at	2021-11-08T14:54:48
updated_at	2021-11-08T14:54:48
Go to GraphViewer Download Graph as CSV	

Figure 10: 各リアクションマップに含まれるアトリビュートの全リストです。

属性リストの下部には、反応マップを CSV ファイルとしてダウンロードするボタンがあります。上部と下部の両方に「グラフビューワーへ」というクリック可能なリンクがあり、これをクリックすると、反応マップを研究するためのさらにエキサイティングな方法が表示されます。

SCAN 使用説明書

マップノードビュー

ノードリストビューページは、基本的にマップ詳細ページからアクセスでき、反応マップ内に含まれるすべての分子のリストが含まれています。各分子は、いくつかの主要な属性と、特定の分子を示す3D可視化ビューポートとともに表示されます。このようなリストの例をFigure 11に見ることができます。

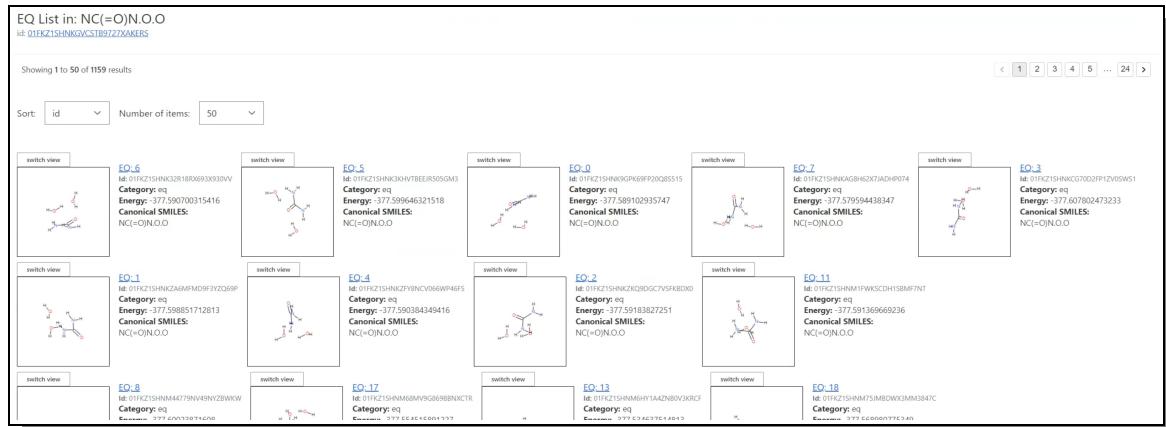


Figure 11: 反応マップのすべての個別ノードのリスト

画面上部には反応マップの名前と ID が表示され、ノード/分子リスト表示のすぐ上には、Figure 12 に見られるように ID 番号ではなくエネルギーでリストをソートするオプションと、1 ページに表示する数を選択するオプションがある。

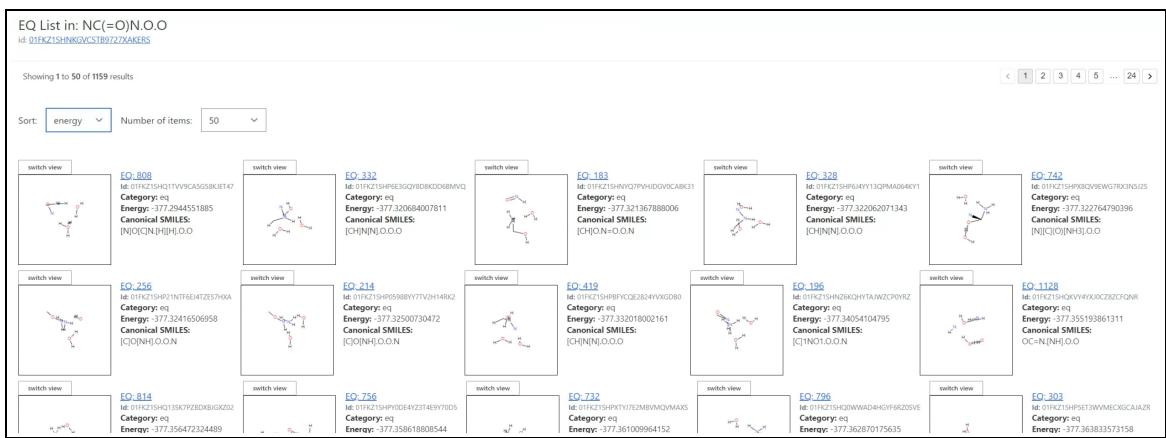


Figure 12: 代わりにエネルギー値でソートされたノードリスト

表示された分子の「ノード」をクリックすると、その分子の詳細データが表示されます。

ノードの詳細表示

特定の分子反応マップノードをクリックすると、選択された分子マップノードが含むすべての利用可能な属性を示すページに送られる。このようなノード情報ページの例をFigure 13に見ることができます。

サイトページには 17 の属性が表示されているが、すべてが同じように重要というわけではないので、以下では重要度の高いものについてのみ、さらに詳細な情報が表示されている。

SCAN 使用説明書

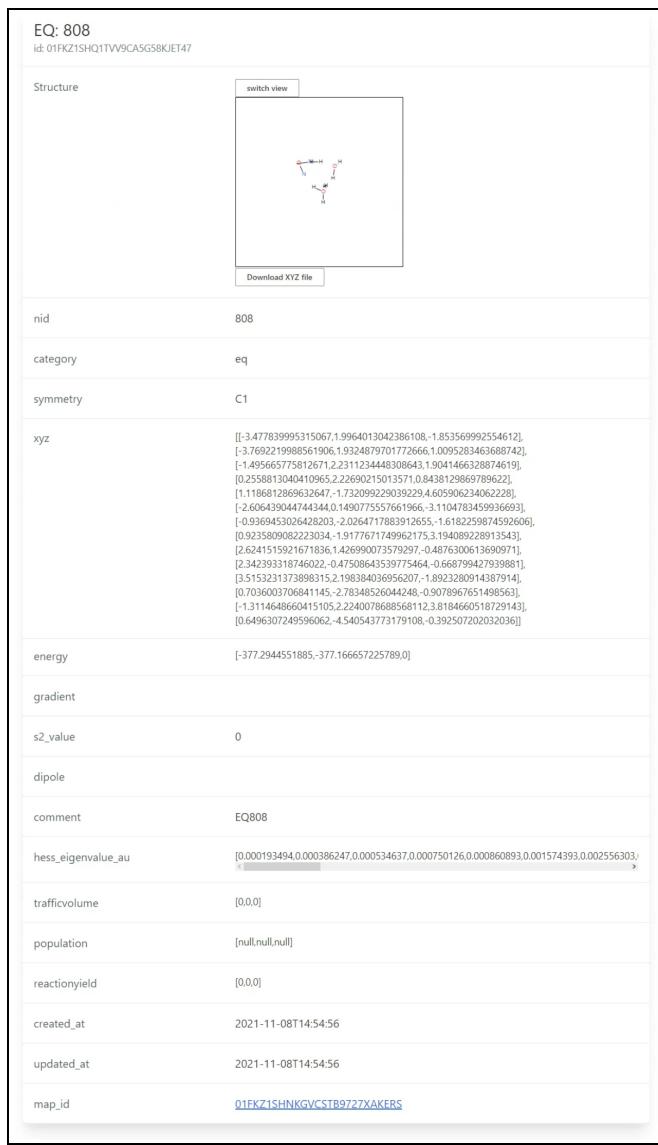


Figure 13: 特定の分子、反応マップノードの詳細表示で、そのすべてのデータ属性が表示されます。

ノード 属性の一部

Structure

これは、マップノード用の分子3Dビジュアライゼーションです。表示スタイルの切り替えや、分子のxyzデータをダウンロードして外部で利用・共有するオプションもあります。

Nid

ノードID、簡単に識別するためのものです。

category

SCAN 使用説明書

eq はノードのカテゴリ識別

xyz

3次元空間で分子を記述する *xyz* 形式。

energy

この分子のエネルギー値

gradient

分子勾配濃度

dipole

分子双極子モーメントの値（存在する場合）

hess_eigenvalue_au

このノードのヘシアン固有値

reactionyield

この特定の分子が反応によって生成される収量。

マップエッジビュー

エッジリストビューページは、基本的にマップ詳細ページからアクセスでき、反応マップに含まれる、ある分子から別の分子へのすべてのリンク/パスのリストが含まれています。各リンクは、いくつかの主要な属性と、関係する特定の分子を示す3D可視化ビューポートで表示されます。このようなリストの例を Figure 14 に示します。

Edge List in: NC(=O)N.O.O
id:01FK215HNG6G6C5389177069480

Showing 1 to 50 of 1256 results

Sort: id Number of items: 50

Edge ID	Category	Energy	Comment	Connection 1	Connection 2	Canonical SMILES
Edge_1	pt	-377.534959107318	T54 CON(8,-1)	1	2	NC(=O)N.O.O
Edge_2	pt	-377.597564643813	T54 CON(8,-1)	2	1	NC(=O)N.O.O
Edge_3	pt	-377.5562774669	T54 CON(8,-1)	1	3	NC(=O)N.O.O
Edge_4	pt	-377.59414064ACM9P	T54 CON(8,-1)	2	4	NC(=O)N.O.O
Edge_5	pt	-377.594175178734	T54 CON(8,-1)	3	5	NC(=O)N.O.O
Edge_6	pt	-377.594175178734	T54 CON(8,-1)	4	6	NC(=O)N.O.O
Edge_7	pt	-377.594175178734	T54 CON(8,-1)	5	7	NC(=O)N.O.O
Edge_8	pt	-377.594175178734	T54 CON(3,12)	6	8	NC(=O)N.O.O
Edge_9	pt	-377.594175178734	T54 CON(3,12)	7	9	NC(=O)N.O.O
Edge_10	pt	-377.594175178734	T54 CON(3,12)	8	10	NC(=O)N.O.O
Edge_11	pt	-377.594175178734	T54 CON(3,12)	9	11	NC(=O)N.O.O
Edge_12	pt	-377.594175178734	T54 CON(3,12)	10	12	NC(=O)N.O.O

Figure 14: このリアクションマップが含むエッジのリストです。

画面上部には反応マップの名前と ID が表示され、エッジ/リンク/パスのリスト表示のすぐ上には、ID 番号の代わりにエネルギーや接続でリストをソートするオプションがあります。

SCAN 使用説明書

表示された「エッジ」のうち、その ID リンクをクリックすると、そのエッジパスの詳細データを見るることができます。

エッジ詳細図

特定の分子反応マップエッジ / リンクをクリックすると、選択した分子マップエッジが含むすべての利用可能な属性を示すページに送られる。このようなエッジ情報ページの例を Figure 15 に見ることができます。

サイトページには 16 の属性が表示されているが、すべてが同じように重要というわけではないので、以下ではより重要なものについてのみ、さらに詳細な情報が表示されている。

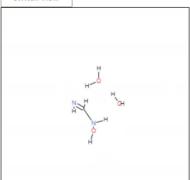
Edge: 6463 id: 01FKZ1SS0KCJH3G4TZ4ADCKZW0	
Structure	 switch view f Download XYZ file
edge_id	6463
category	pt
symmetry	C1
xyz	<pre>[[-0.4818328044730434,-2.1091064711079444,-2.729034671067274], [-1.8729221459726815,0.1971347761418972,3.158595829523276], [-0.8759015523964826,2.3766935496805535,2.554137233441417], [-1.1279643068496586,3.23944277510124,-0.6752121487785278], [0.9955229582782006,2.231145320021118,3.0731665176501193], [-0.7050857817668885,-2.1402453485920745,2.275986746359536], [-3.8088953264522884,0.062447695384576146,1.4450352872086534], [-0.972903780315393,-3.0658340741156844,0.5628211614724956], [1.9797263174819522,-1.8626072027257543,2.58771606009086], [2.401483587418929,-2.847402124113238,4.09221820459632], [-0.3721078090471724,-2.3767944745920095,-3.0201911346627073], [-1.106745045866475,2.727547058167272,-2.4976784782503], [-1.872786847166591,3.961804820433616,-3.6160365711886455], [-0.6609676141008851,-0.26348789450318943,-2.8775346949619145]]</pre>
energy	-369.953169333922,-369.826102663697,0]
gradient	
s2_value	0
dipole	
comment	TS6463 CON(560,456)
hess_eigenvalue_au	<pre>[-87.097039875,-85.968539902,0.000001003,0.00022038,0.000603462,0.0006552,0.002401591]</pre>
connection0	560
connection1	456
created_at	2021-11-08T14:54:55
updated_at	2021-11-08T14:54:55
map_id	01FKZ1SHNKGVCSB9727XAKERS

Figure 15: 特定のパス、リアクションマップエッジの詳細なビューとそのすべてのデータ属性を表示します。

一部のエッジ属性

Structure

これは、マップエッジのための分子3Dビジュアライゼーションです。表示スタイルの切り替えや、分子のxyzデータをダウンロードして外部で利用・共有するためのオプションも備えています。

edge_id

エッジID、識別しやすいように。

category

*pt*は、エッジのカテゴリー識別です。

xyz

3次元空間で分子を記述するxyz形式。

energy

この反応経路のエネルギー値

gradient

勾配濃度

dipole

双極子モーメント値（存在する場合）

hess_eigenvalue_au

この反応経路のヘシアン固有値は

connection

*connection0*と*connection1*は、このエッジが接続する2つのノードのIDである。

マップグラフビュー

「Go to GraphViewer」をクリックすると、ビューが切り替わり、アプリケーションのメインメニューの下に新しいインターフェースがロードされます。このインターフェースには、シンプルな上部サブメニュー、いくつかの指示とボタン、そして反応マップデータが、すべての分子とその変換経路を表すノードとリンクのネットワークグラフとして表示される大きな描画エリアがあります。

SCAN 使用説明書

デフォルトのネットワークはすぐに描かれ、ノードのエネルギー値によって重み付けされます。エネルギー値が高い（0に近い）ほど赤（暖かい）色になり、低い（負の）ほど青（冷たい）色になります。この表示の例は、Figure 16 に見ることができます。

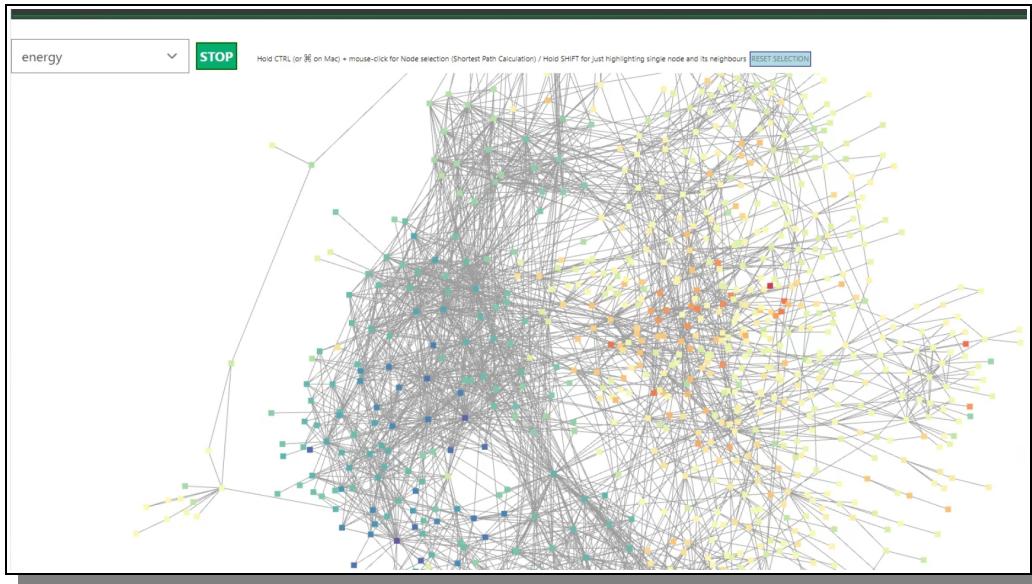


Figure 16: 反応マップは、各分子のノードとその接続エッジからなるノードグラフとして表示されます。

すぐに気づくのは、すべてのノードとマップ全体が、かなり激しく揺れていることです。これは、ネットワークグラフが、ノード間の重力などの基本設定に従って、各ノードの位置を調整しようとするためです。そのため、上部に「STOP」という緑色のボタンがあり、各ノードの現在の位置が保持されます。この状態で、ユーザーは手動でノードをドラッグ＆ドロップで個別に移動させることができます。その後、緑色のボタンは「RESUME」に変わり、ユーザーは必要に応じて自動位置補正機能を再開し、再び始めることができます。Figure 17 はこの状態を示しています。

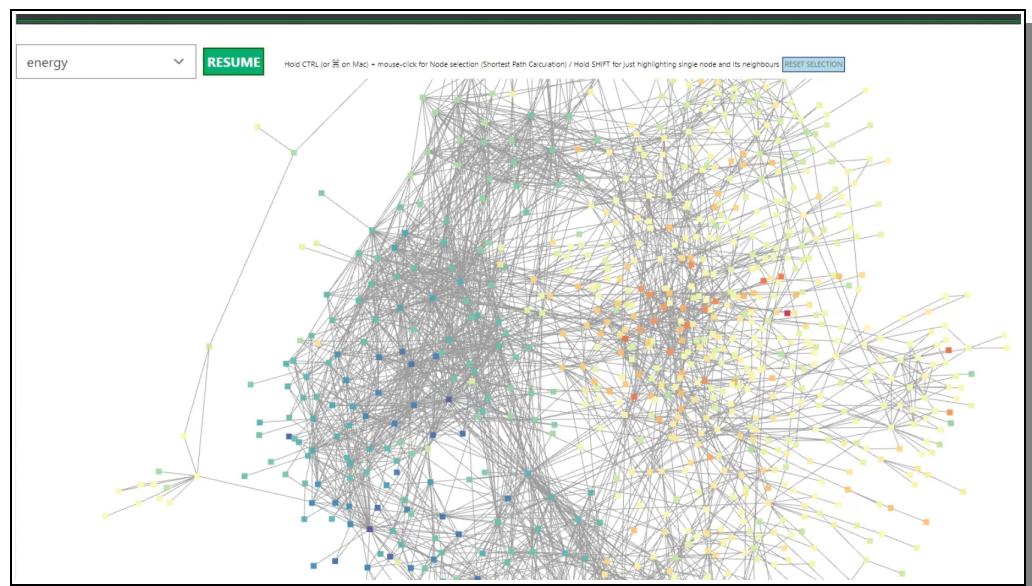


Figure 17: ノードの自動調整停止後、それぞれを手動で移動することができます。

基本的な相互作用

ユーザーがネットワークグラフ全体に対してできる基本的な操作は、白い領域でマウスをドラッグしてパンすることと、マウスホイールでズームすることです。

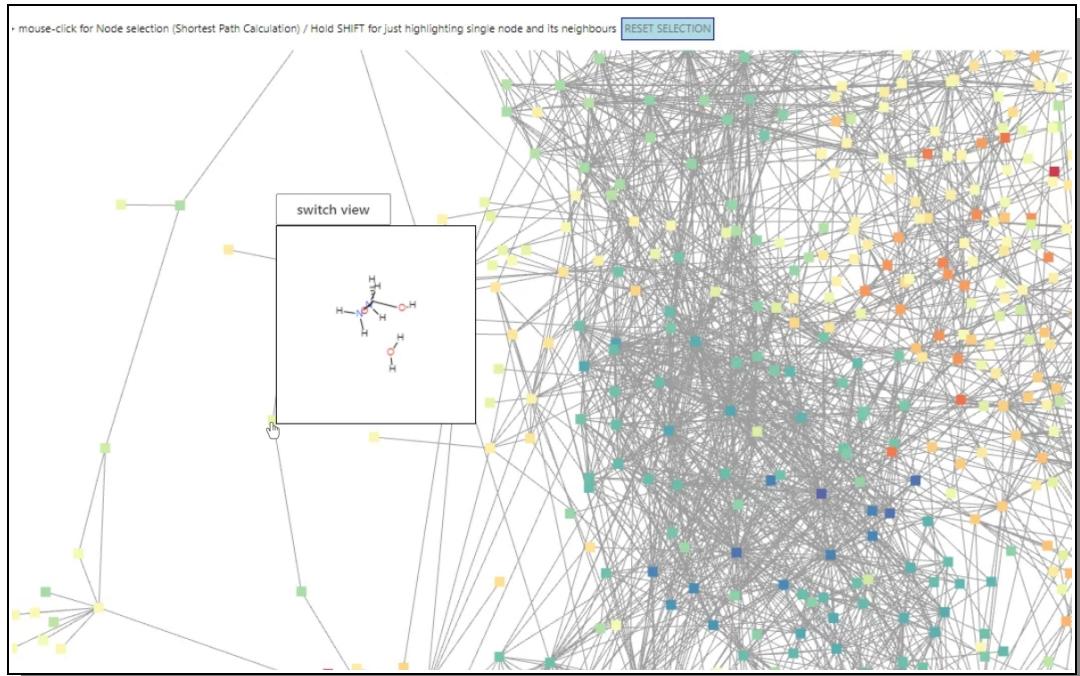


Figure 18: ノードの上にマウスを置くと、分子の 3D ビューが表示され、ユーザーが操作することができます。

Figure 18では、特定のノードの上にマウスを置くとポップアップ・ウィンドウが表示され、そのノードの分子のインタラクティブな 3D ビューポートが表示される様子がわかります。マウスで分子を自由に回転させることができます。「Switch View」ボタンで分子の描画スタイルを変更することができます。

ノードをダブルクリックすると、新しいタブが開き、選択したノードの詳細情報ページが表示されます（Figure 13 参照）。

ノードの色と大きさは情報量と関連性がありますが、その正確な意味は、ネットワークグラフが現在どのモードで表示されているかによって異なりますので、後でさらに説明します。

高度な相互作用

これらの相互作用がどのように行われるかは、ネットワークグラフの上にある説明書にも簡単な言葉で説明されており、より良いヘルプやサポートが受けられるようになっています。

ノードの選択

SHIFT キーを押しながらノードをクリックすると、そのノードが選択されます（サイズが大きくなり、黄色に変化します）。選択されたノードに接続されているすべての隣接ノードも半選択され（サイズが大きくなり、ピンク色に変わる）、ユーザーが簡単に関係を追跡できるようになります。これは Figure 19 で見ることができます。

SCAN 使用説明書

最短経路の選択

CTRL キー（アップルコンピュータでは mac キー）を押しながらノードをクリックすると、2つのノード間の最短経路を計算するプロセスが開始されます。クリックしたノードが黄色に変わり、システムはユーザーが CTRL キーを押しながら別のノードをクリックするのを待ちます。ユーザーは、他のノードを選び、CTRL キーを押しながらクリックすることができます。

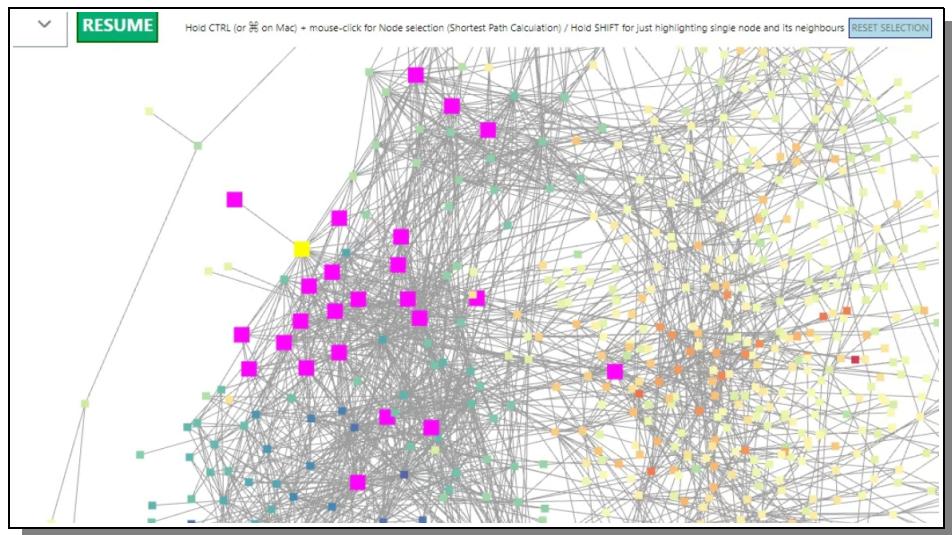


Figure 19: ノードとその近傍が選択される。

それが終わるとすぐに、システムは最初のノードから最後のノードまでの最短経路を計算します。それらをすべてピンク色でマークし、最初にクリックしたノードの1から順に、各ノードに番号を付けます。これでユーザーは、2つのノード間の最短経路と、どのノードが何個関係しているかを見ることができます。この例は、Figure 20 に見ることができます。

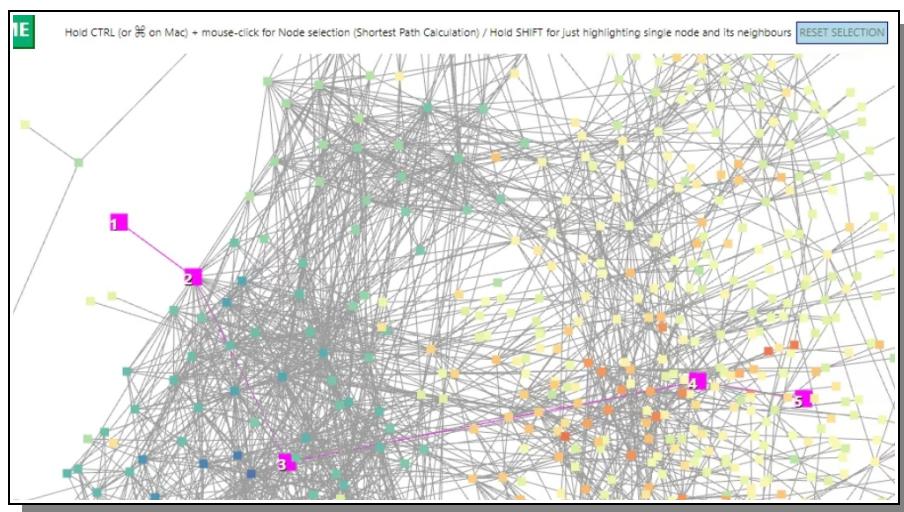


Figure 20: 2つのノード間の最短経路のことです。

選択解除

現在選択されているノードの選択を解除するには、ネットワークグラフの上にある水色のボタン「RESET SELECTION」をクリックするだけで、グラフがデフォルト状態に戻り、代わりに他のノードを選択する準備が整います。

グラフ描画モード

ネットワークグラフの上の左側には、ネットワークの重み付けや構造を変更するためのドロップダウン・ボックスがあります。一番上のデフォルト設定は「エネルギー」で、反応マップのエネルギー値をネットワークグラフの重みとして使用します。すでに Figure 16 と Figure 17 で示したとおりである。

他のモードは Figure 21 で見ることができます、以下にさらに説明する。Figure 22 には、ネットワークグラフの計算と描画の異なるモードの他の例が示されている。

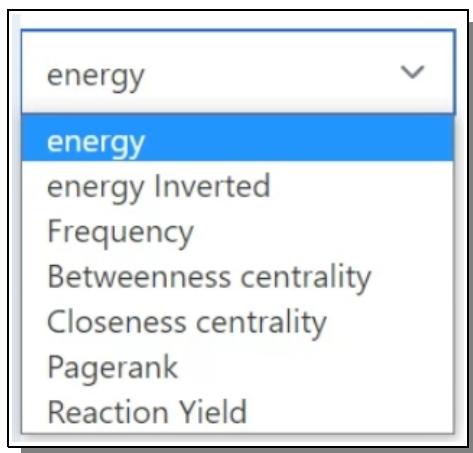


Figure 21: さまざまなグラフ描画モードが用意されています。

使用可能なグラフ描画モード

エネルギー (Energy)

は、各分子ノードのエネルギー値を重みとして使用し、青、黄、赤のように、低いものから中間、高いものへと色を変化させます。

エネルギー反転 (Energy Inverted)

同じ重みが使われていますが、この場合、色が反転しているので、低い値はより赤く、高い値はより青くなります。これは、関心のある分子をより簡単に識別するためのものです。

周波数 (Frequency)

このモードでは、分子の出現頻度に基づいてグラフを描画します。

中心性 (Betweenness Centrality)

このモードは、ノードの重要性を示す指標です。このモードは、ネットワーク内の他のノード間の最短経路に多く存在するノードは重要であるという考えに基づいています。ノードの *betweenness centrality* は、そのノードを通過するネットワーク上のすべてのノードのペア間の最短パスの数として定義されます。

SCAN 使用説明書

近接中心性 (Closeness Centrality)

このモードは、ノードの重要性を示すもう一つの指標です。このモードは、ノードがネットワーク内の他のノードに直接または間接的に素早く到達できる場合に重要であるという考えに基づいています。

ページランク (PageRank)

このモードでは、ネットワークの構造とノード間のリンクに基づいて、ネットワーク内の各ノードにスコアが割り当てられます。基本的な考え方とは、ノードがネットワーク内の他の重要なノードからリンクされている場合、そのノードはより重要であるというものです。

反応収率 (Reaction Yield)

このモードでは、歩留まりをネットワークグラフの重みとして使用します。また、このモードには、以下に説明するような追加設定があります。

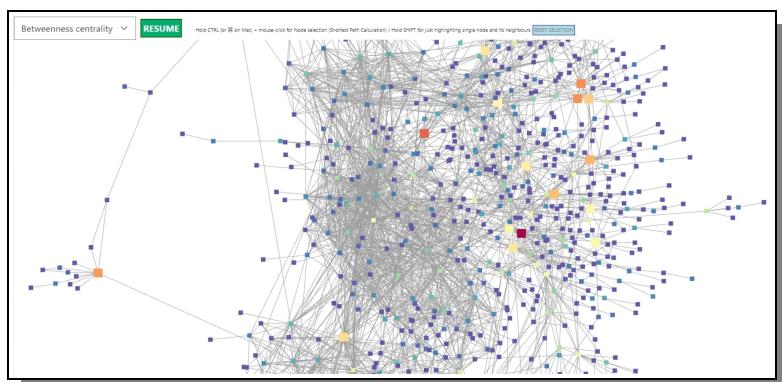


Figure 22: 別のグラフ描画モード、この例では Betweenness Centrality の計算を使用します。

各モードをどのように使用し、読み、解釈するかは、ネットワークグラフを研究するユーザーや研究者次第であり、見たものをどう受け止め、さらに発見するかは、すべてユーザ一次第である。

他のモードとわずかに異なるのは、最後の「Reaction Yield」モードだけです。このモードには、以下に説明するように、さらにいくつかの設定があり、Figure 23で見ることができます。

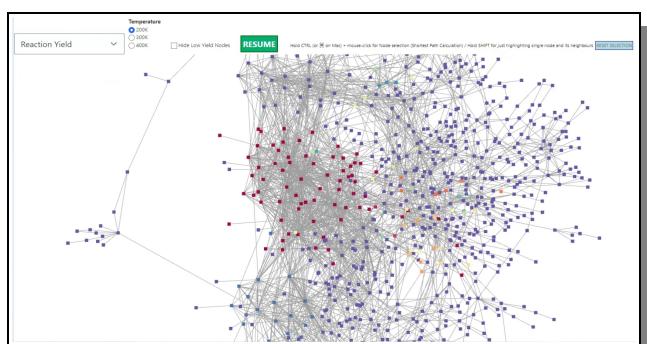


Figure 23: デフォルトの Reaction Yield Network グラフです。

SCAN 使用説明書

最初の設定（ラジオボタン）は、反応に適用される温度（200, 300, 400K（ケルビン））に基づき、高収率ノードはより暖かく赤色で、低収率または無収率ノードはより冷たく青色で描画されます。温度を変更すると、Figure 24 に示すように、グラフノードの収量が変化します。

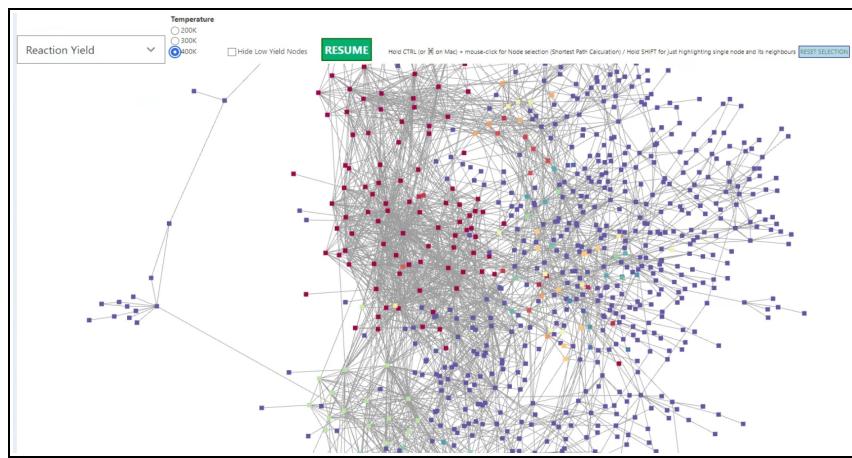


Figure 24: 400K 反応での収量値

2つ目の設定（チェックボックス）は、すべての低収量ノードとそのエッジを非表示にして、ビューを乱雑にせず、重要なノードに集中できるようにするものです。この例は、Figure 25 に見ることができます。

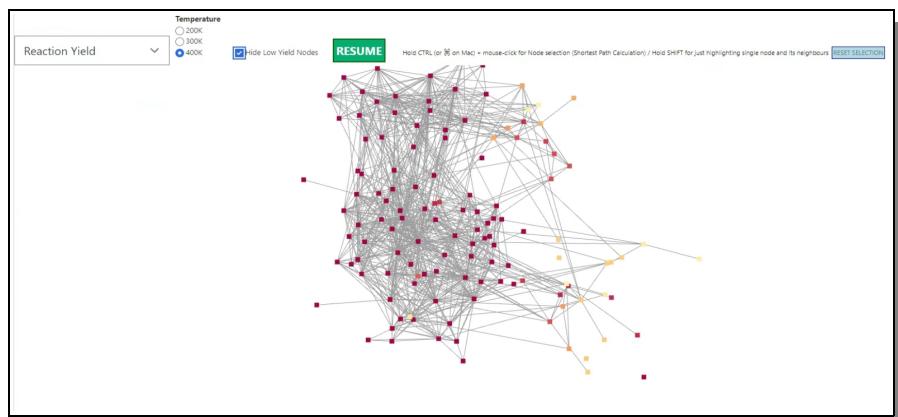


Figure 25: 高収量ノードのみを表示し、それ以外は非表示にする。

概要

このマニュアルで、SCAN Web アプリケーションとその使用方法について、必要なことはすべて説明できたと思います。いつ、何をすればいいのかわからなくなったりしたときは、いつでもここに戻ってきて来てください。

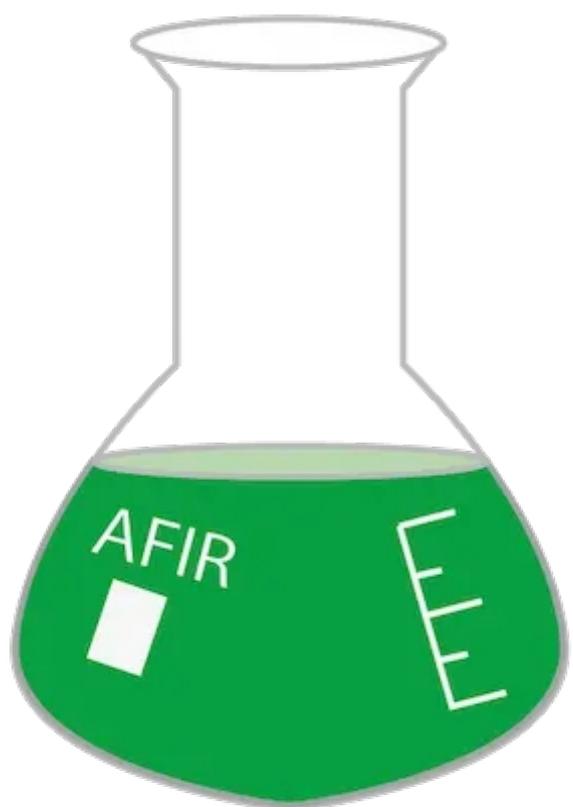
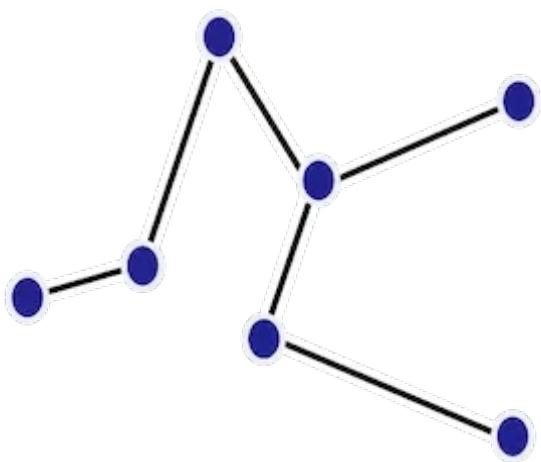
「SCAN-User」としての新しいステータスを獲得したことを祝福します。さて、いよいよ本格的な研究の時間です。お楽しみに！



図解インデックス

Figure 1: SCAN の訪問者が最初に出会う景色です。	6
Figure 2: SCAN Web アプリケーションのトップメインメニュー.....	7
Figure 3: フッターリンクは、最初のフロントページでのみ使用可能です。	7
Figure 4: 左側が「サインアップ」フォームで、リピーターの場合は右側の「ログイン」フォームが使用されます。	8
Figure 5: ユーザーが以前に、そして最近ログインしていた場合、自動的に再ログインされます。	8
Figure 6: スキャンマップサーチは、SCAN の魅力をさらに掘り下げるための入り口です。	9
Figure 7: 選択した原子を含む反応マップを表示する検索結果です。	10
Figure 8: リアクションマップの検索結果は、属性に基づくソートと順序付けの両方が可能です。	10
Figure 9: 3D 分子を見る際に使用するビューは 2 種類あります。	11
Figure 10: 各リアクションマップに含まれるアトリビュートの全リストです。	12
Figure 11: 反応マップのすべての個別ノードのリスト	13
Figure 12: 代わりにエネルギー値でソートされたノードリスト	13
Figure 13: 特定の分子、反応マップノードの詳細表示で、そのすべてのデータ属性が表示されます。	14
Figure 14: このリアクションマップが含むエッジのリストです。	15
Figure 15: 特定のパス、リアクションマップエッジの詳細なビューとそのすべてのデータ属性を表示します。	16
Figure 16: 反応マップは、各分子のノードとその接続エッジからなるノードグラフとして表示されます。	18
Figure 17: ノードの自動調整停止後、それぞれを手動で移動することができます。	18
Figure 18: ノードの上にマウスを置くと、分子の 3D ビューが表示され、ユーザーが操作することができます。	19
Figure 19: ノードとその近傍が選択される。	20
Figure 20: 2 つのノード間の最短経路のことです。	20
Figure 21: さまざまなグラフ描画モードが用意されています。	21
Figure 22: 別のグラフ描画モード、この例では Betweenness Centrality の計算を使用します。	22
Figure 23: デフォルトの Reaction Yield Network グラフです。	22
Figure 24: 400K 反応での収量値.....	23
Figure 25: 高収量ノードのみを表示し、それ以外は非表示にする。	23

応援ありがとうございます



SCAN