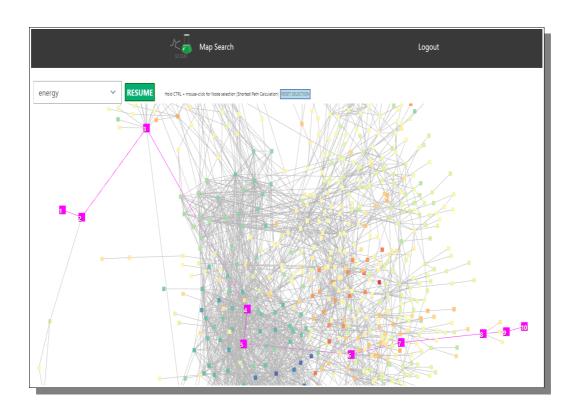
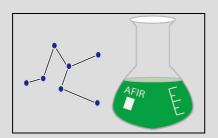


# TAKAHASHI GROUP (情報化学研究室)

# 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

サーバ設定手順書

#### 北海道大学 - 高橋グループ - 情報化学研究室

# SCAN サーバ設定手順書

#### 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17日,14:01

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、次の場所で本使用記話書のコピーを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	
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
サーバ設定手順書	6
前提条件	6
環境を整える	7
Auth0 アカウントの設定と構成	7
スキャンサーバーの構成	10
Github から SCAN を取得する	
SCANプロジェクト設定ファイルの作成と編集	11
スキャンサーバーの構築とスタートアップ	13
データ登録の手順	15
サンプルデータの登録	
概要	
図解索引	16
テーブル索引	16

# 序文

クリエイターからひと言。

のマニュアルは、GitHub の  $\underbrace{https://github.com/scan-team/scan-platform-test}$  にある公開 SCAN サーバを自分でセットアップしたい人のための広範なガイドになろうとしている。対話型化学反応プラットフォーム SCAN は、化学反応ネットワークを解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、可視化ツール、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とデータサイエンス技術を実行することができます。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。このように、SCANは化学反応ネットワークを分析・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。 SCAN は、もともと AFIR データを主な対象として開発されましたが、これは石に刻まれた制限では ありません。SCAN のコードとサーバー設定マニュアルをダウンロードした開発者は、自由にデー タベースを変更し、好きなデータを使うことができます。

つまり、SCANのソフトウェア開発チームは、データの選択とアップロードには関与していませんし、データの内容に関しても一切の責任を負いません。私たちの関心は、ツールセットと、選ばれたデータでできることだけにあります。

AFIR データに関する問題は、北海道大学 iCReDD (<a href="https://www.icredd.hokudai.ac.jp">https://www.icredd.hokudai.ac.jp</a>) チーム (リーダー: 前田聡教授) にご連絡ください。

2023年4月17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

### 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。

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。

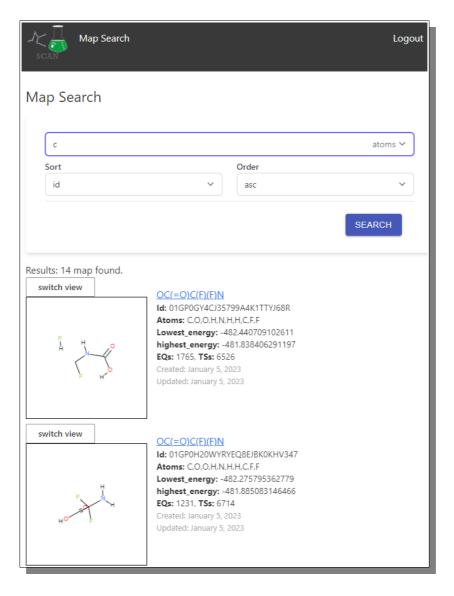
#### SCAN 建築

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、

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。



# 章 2

# サーバ設定手順書

SCAN のオンラインを訪問し、それがあなたの探しているものであるかもしれないと感じたが、あなた自身のサーバーを持ちたいと思うようになりました。ここでは、あなた自身の SCAN サーバーのダウンロードとインストールをお手伝いします。



の章では、ローカルとパブリックの両方で使用するための独自の SCAN サーバー環境のインストールとセットアップについて知っておく必要があるすべてのことを説明しようとします。やるべきことは非常に多く、大変な作業になるかもしれません。しかし、このマニュアルがあれば大丈夫でしょう。では、さっそ

#### 前提条件

SCAN の方向性を検討し始める前に、まずあなたのシステムがこのための準備ができていることを確認する必要があります。この文書では、SCAN サーバーを導入する前に、以下の準備が必要であることを説明しています。

- 1. Ubuntu または Linux の OS を搭載したパソコンで、以下のシステムがインストールされ、動作していること:
  - a) Docker と Docker-Compose について
    - Docker について説明するのはこのドキュメントの範囲ではないので、それはすべて あなたの責任になりますが、Docker をまだ持っていない場合に始めるためのリンク はこちらです。
      - <a href="https://www.docker.com">https://www.docker.com</a>
  - b) Python3
    - Python についても、この文書で説明する範囲ではありませんが、Python について 必要なことをオンラインで調べることができる場所を知っていると思います。
- 2. [公開サーバーのみ、ローカル版では必要ありません]:
  - a) SCAN アプリのドメイン名を取得し、DNS に登録する。
  - b) 適切な SSL 証明書を取得する
  - c) Google Analytics IDの登録(オプションで、方法は本書の範囲外です。)

#### 環境を整える

コンピュータに必要な基盤が整っていることを確認したら、次は SCAN が動作するために必要なすべての必需品やパーツをインストールし、設定する番です。

#### Auth0アカウントの設定と構成

このセクションでは、SCAN ウェブプラットフォームのユーザーアカウントを作成および管理するために必要な authO 認証サーバーのアカウントを作成する方法について説明します。

1) ブラウザで https://auth0.com にアクセスします。

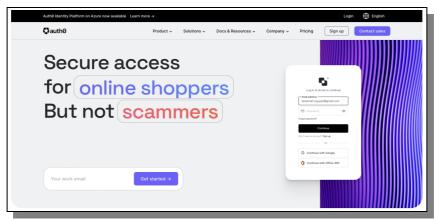


Figure 1: ユーザーアカウント管理者となる Auth0 サイトのフロントページ

- 2) 「Sign Up」ボタンをクリックすると、Figure 1のように右上のセクションにあるユーザー登録ページに移動します。
- 3) メールアドレスを入力し、「続ける」をクリックすると、アカウント作成画面に進みます。 パスワードを入力し、Continueをクリックします。この様子は、以下のFigure 2で確認 することができます。

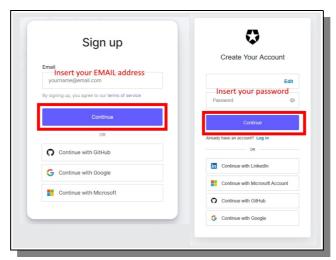


Figure 2: AuthOでUser Managerの基本アカウントを作成する場合は無料です。

4) アカウントタイプ」「会社名」「会社規模」を選択し、「次へ」をクリックします。テナントドメイン」と「地域」を確認し、「アカウントの作成」をクリックすると、Figure 3 のようなアカウントが作成されます。

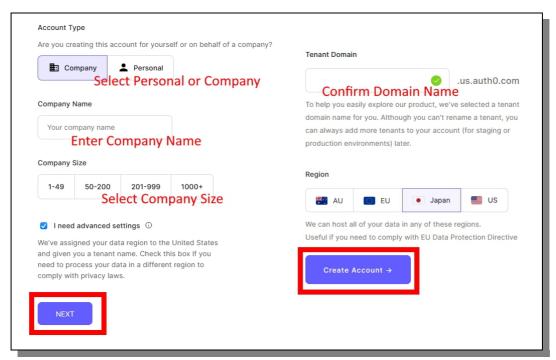


Figure 3: ドメイン名は、ここまでのプロセスで事前に取得しておく必要があります。

5) サインアップが完了すると、Figure 4のようにダッシュボードページが表示されます。

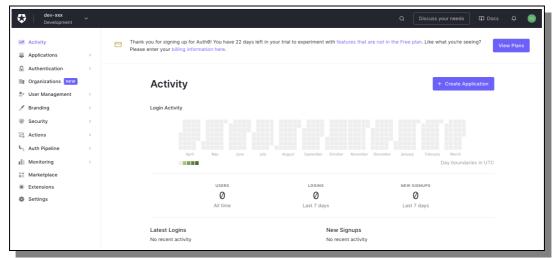


Figure 4: AuthOダッシュボードで、SCANサーバーのログインシステムを設定できるようになりました。

6) その画面の左上にある「アプリケーション」をクリックし、続いてその真下にある「アプリケーション」をクリックします。その後、メインエリアの新しい表示で、設定画面に移動するために、"Default App"をクリックします。今説明したことは、下のFigure 5で見ることができます。

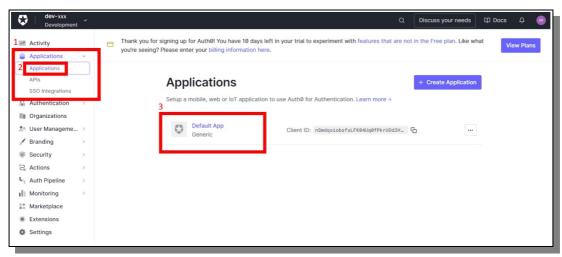
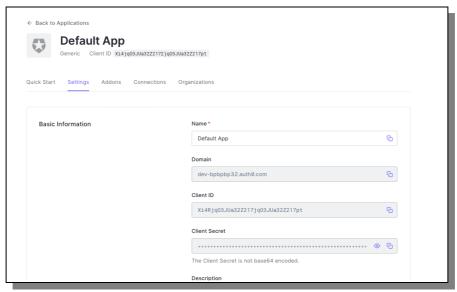


Figure 5: クリックすると、Default Appの設定画面が表示されます。

7) 設定」タブの下に、Figure 6のようにスクロールしていくと、記入する箇所があります。



Figure~6:~ COビューを下にスクロールすると、変更または追加する必要があるパーツにたどり着きます。

8) "Application Login URI "フィールドに SCAN サーバーの URL を入力します (設定ページを さらに下にスクロールすると見つかります)。Figure 7に、問題のフィールドが表示されています。

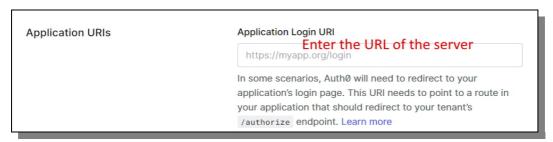


Figure 7: このステップの前に、urlを正しく登録したことを確認してください。

9) 次に「許可されたコールバック URL」までスクロールダウンし、そのフィールドに Figure 8 に示すように「サーバー URL/api/auth/callback」を入力します。



Figure 8: 先ほどと同じ url を入力しますが、パスを追加してください。

10) 10) 上記セクションの下に、「許可されたログアウトURL」があります。このフィールド に、Figure 9に示すように、サーバーのURLを追加します。



Figure 9: パスを追加することなく、これまでと同じ URL を記入するだけです。

11) 作業が終わったら、Figure 10 にあるように、下にスクロールして、画面下部の「変更を保存」をクリックします。

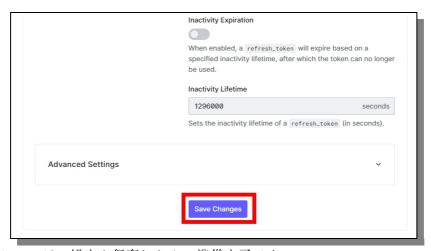


Figure 10: 設定を保存したら、準備完了です。

#### スキャンサーバーの構成

このセクションでは、SCAN コードをサーバーにダウンロードし、実行するために必要な設定と構成について説明します。このドキュメントの範囲では、これらの部分についてこれ以上詳しく説明することはありませんので、あなたが使用している OS (Linux や Ubuntu) や GitHub 全般に精通していることを前提とします。もし、これらの部分を十分に使いこなせていないのであれば、ネットでチュートリアルを見つけて勉強することをお勧めします。

#### Github から SCAN を取得する

- 1) SCAN をインストールする Linux サーバーの管理者としてログインし、ファイルシステム上の SCAN がインストールされる場所に移動してください。
- 2) SCAN の GitHubページ(<a href="https://github.com/scan-team/scan-platform-test">https://github.com/scan-team/scan-platform-test</a>) に素早くアクセスしてください。これは、私たちがクローンして作業するプロジェクトです。また、ReadMe をざっと見て、すべてがこのドキュメントと同等に見えることを確認する。 (ReadMe は変更があった場合、最初に更新されるので、もし違うことが記載されていれば、そちらが優先されます)。
- 3) GitHubからSCANのリポジトリをサーバーにクローンします。

\$ git clone https://github.com/scan-team/scan-platform-test.git my-scan \$ git submodule update --init --recursive

4) SCANプロジェクトが GitHub からあなたのサーバーにダウンロードし終わったら、プロジェクトのルートに移動してください。

#### SCAN プロジェクト設定ファイルの作成と編集

5) ルートにある .env. sample ファイルのコピーを作成し、そのコピーに .env という名前を付ける。

\$ cd my-scan/
\$ cp .env.sample .env

6) 6) .env ファイルを開いて編集し(お好みのコード/テキストエディタを使用)、Figure 11 に示すように、以下の Table 1 に説明と例を示すように、必要な変更を加えます。

項目名	説明	例
API_ALLOWED_HOSTS	サーバーの URL を指定する	https://yourhostname:8001/
AUTH0_SECRET	ランダム文字列	Oi2Aich1theace6jaiyoekae3ahuizuoz
AUTH0_BASE_URL	サーバーURL	https://yourhostname/
AUTH0_ISSUER_BASE_URL	AUTHO アプリの設定:	https://xxxx.auth0.com
	Domain	
AUTH0_CLIENT_ID	AUTHO アプリの設定:	
	ClientID	
AUTH0_CLIENT_SECRET	AUTHO アプリの設定:	
	ClientSecret	
NEXT_PUBLIC_SCAN_API_PROXY_R	サーバーURL に api/proxy	https://yourhostname/api/proxy
ООТ	を追加	
FASTAPI_SIMPLE_SECURITY_SECRE	API アクセスキー(管理用)、	caaph5eicahneewuiKei3peeV
T	ランダム文字列	e8shi3I
NEXT_PUBLIC_GOOGLE_ANALYTICS	Google Analyticsのデータ	G-X3ZZ5HVYYZ
_ID	収集のための ID	

Table 1: これらは、正しく設定する必要がある環境変数です。



Figure 11: プロジェクトのルートフォルダにある. env ファイルを正しく設定することは、重要な部分です。

7) scan-reverse-proxy/conf.d/directory から nginx.conf.example のコピーを作成し、nginx.conf と命名する。

```
$ cp nginx.conf.example nginx.conf
```

8) nginx.confファイルを開いて編集し(お好みのコード/テキストエディタを使用)、Figure 12に示すように、また以下の Table 2に説明と例を示すように、必要な変更を加えます。

項目名	説明	例
ssl_certificate	SSL 証明書ファイル名 <sup>1</sup>	/etc/ssl/certs/cert.pem
ssl_certificate_key	SSL 秘密鍵ファイル名	/etc/ssl/certs/server.pem

Table 2: SSL 証明書キーの登録が必要です

Figure 12: お使いのコンピュータのSSLキーの場所を指すように名前を変更します。

9) SCANルートフォルダから docker-compose.yml.example のコピーを作成し、docker-

<sup>1</sup>パスの部分 /etc/ssl/certs を変更する必要はありません (これらは以下の docker-compose.yml で正しくポイントされます)。

compose.yml と命名します。

```
$ cp docker-compose.yml.example docker-compose.yml
```

10) docker-compose.yml ファイルを開いて編集し(お好みのコード/テキストエディタを使用)、 Figure 13 に示すように、以下の Table 3 に説明と例を示すように、必要な変更を加えます。

項目名	説明	例
nginx: volumes: -	ローカルの ssl のパスを、nginx	YourSSLPath: /etc/ssl/certs
	が使用する仮想パスにリポイン	
	ティングします。	

Table 3: SSL 証明書の正しいローカルロケーションを見つけることを確認します。

Figure 13: お客様のローカルにある SSL 証明書の場所

#### スキャンサーバーの構築とスタートアップ

ここまでで、Dockerのビルドプロセスを実行し、SCAN サーバーの初回実行を確認する部分まで来ました。

1) プロジェクトのルートフォルダにいることを確認し、ビルドスクリプトを実行します。

#### \$ ./build.sh

- 2) これで、dockerのビルドプロセスが開始され、おそらく何分もかかるかもしれません。その間、ターミナルには赤色を含む様々な色でプロセスに関する情報が書き込まれますが、すべてうまくいくはずです。最後には成功した旨のメッセージが表示されるはずです。
- 3) もし何か失敗したら、ここまでの部分がすべて正しく行われているかどうか、再確認してください。エラーメッセージを読み、GitHubのReadMeファイルと比較して、すべてが問題ないように見えるかどうかを確認します。このドキュメントが十分でない場合は、エラーメッセージをググってみてください。可能な限りの間違いを修正した後、上記のビルドコマンドをもう一度実行します。

**4)** Docker のビルドプロセスが正常に終了したら、今度はスタートスクリプトで SCAN サーバーを起動します。

#### \$ ./start.sh

5) このプロセスも時間がかかり、ターミナルに多くのメッセージが出力されますが、すべてがうまくいけば、最終的には、以下の Figure 14 のように、すべての docker コンテナの起動と実行が緑の「Done」と共に表示されます。

```
Creating scan_redis ... done
Creating mysql_host ... done
Creating scan_app ... done
Creating test_phpmyadmin ... done
Creating scan_api_internal ... done
Creating scan_api_public ... done
Creating nginx ... done
```

Figure 14: これは、システムがすべて正常に稼働していることを示す、あなたが望む表示です。

- 6) 6) 次に、ブラウザでウェブサイトを開きます。localhostで動作している場合はそれを使用し、そうでない場合は設定時に割り当てた ip または URL を使用します。(リモートでサーバーにアクセスしている場合、または何らかの理由で localhost を使用できない場合は、.env と Autho.com のすべてのリンクを、要求された IP 設定に合わせて更新する必要があります)
- 7) Figure 15 のように、ブラウザに Web サイトのスタートページが表示されます。ただし、利用可能な地図はゼロです。次のステップで追加する必要があります。



Figure 15: SCAN サイトのスタートページ

- 8) 「利用規約」リンクと「お問い合わせ」リンクは、あなたのセットアップにとって間違った情報を含んでいる可能性が高いので、オンラインで展開する前に、これらのファイルを探し、あなたの好みに合わせて編集してください。
- 9) **9)** 後でサーバーを停止したい場合は、**stop** スクリプトを実行し、サーバーが終了するのを 待ちます。

#### \$ ./stop.sh

#### データ登録の手順

ここでは、サンプルデータを登録する手順を説明します。自作データや GRRM (AFIR) データの実行など、DB に手を加える場合は、サンプルデータが正常に動作することを確認した上で行うようにしてください。

#### サンプルデータの登録

デモのサンプルデータをデータベースに読み込むことができます。尿素合成の反応経路ネットワークは、以下の2つが登録されています。

- Wöhler's urea
- 合成
- 1) 以下の URL からサンプルデータをダウンロードし、"export. sql"という名前を付けて SCAN サーバにアップロードします。

https://drive.google.com/file/d/1VjsEwVdje4G10b1fEesMRXmRQRBaajr1/view?usp=sharing
「リンクが機能していない場合は、SCAN GitHubにアクセスし、適切なリンクを探してください]

2) サンプルデータをデータベースに登録する。(export.sqlのパスや場所が、お使いのパソコンに合っていることを確認してください)

#### \$ scan-mariadb/import.sh ../export.sql

- 3) 3) 少し時間がかかるかもしれませんが、すべてが完了すると、端末に100%のデータ転送に到達し、すべてが正常に完了したことが表示されます。
- 4) **4)** さて、ウェブサイトを再起動すると、きっと上の Figure 15 のようになり、2 つの地図が利用できるようになっているはずです。

#### 概要

このサーバーセットアップマニュアルで、SCAN Web アプリサーバーのセットアップとメンテナンス方法について知る必要があるすべてのことをお伝えできたとしたら幸いです。

このたびはおめでとうございます!これからのご活躍をお祈りいたします。お楽しみに!



# 図解索引

Figure 1: ユーザーアカウント管理者となる Auth0 サイトのフロントページ7
Figure 2: Auth0で User Manager の基本アカウントを作成する場合は無料です。7
Figure 3: ドメイン名は、ここまでのプロセスで事前に取得しておく必要があります。8
Figure 4: Auth0 ダッシュボードで、SCAN サーバーのログインシステムを設定できるよう
になりました。
Figure 5: クリックすると、Default App の設定画面が表示されます。9
Figure 6: このビューを下にスクロールすると、変更または追加する必要があるパーツにた
どり着きます。9
Figure 7: このステップの前に、urlを正しく登録したことを確認してください。9
Figure 8: 先ほどと同じ url を入力しますが、パスを追加してください。10
Figure 9: パスを追加することなく、これまでと同じ URL を記入するだけです。10
Figure 10: 設定を保存したら、準備完了です。10
Figure 11: プロジェクトのルートフォルダにある.env ファイルを正しく設定することは、
重要な部分です。12
Figure 12: お使いのコンピュータの SSL キーの場所を指すように名前を変更します。12
Figure 13: お客様のローカルにある SSL 証明書の場所13
Figure 14: これは、システムがすべて正常に稼働していることを示す、あなたが望む表示
です。14
Figure 15: SCAN サイトのスタートページ14
テーブル索引
Table 1: これらは、正しく設定する必要がある環境変数です。11
Table 2: SSL 証明書キーの登録が必要です12
Table 3: SSL 証明書の正しいローカルロケーションを見つけることを確認します。13

# 応援ありがとうございます

