

In-house MassBank 構築マニュアル

2020/11/20

目次

1. 概要.....	3
1.1 はじめに	3
1.2 システム要件.....	3
2. MassBank システムのインストール.....	4
2.1 事前準備	4
2.2 インストーラおよびデータのダウンロード	5
2.3 MassBank のインストール.....	6
3. 付録.....	7
3.1 Apache のインストールおよび設定	7

1. 概要

1.1 はじめに

MassBank (<http://www.massbank.jp>) は、日本質量分析学会公式のメタボロームマススペクトルデータベースです。MassBank のリソースは、オープンソース & オープンデータで GitHub にて公開しており、どなたでも再利用可能です。本マニュアルは、MassBank をインハウスで構築するための手順を解説するものです。

1.2 システム要件

MassBank システムがインストール可能な OS (オペレーティングシステム) は Ubuntu 18.04 のみとなっております。Windows はサポートしておりません。

Ubuntu OS のインストーラーは以下の Ubuntu 日本語サイトよりダウンロードしてください。

<https://www.ubuntulinux.jp/News/ubuntu1804-ja-remix>

ハードウェアは、4 コア以上を搭載するプロセッサおよびメモリ 8GB 以上のコンピュータを用意してください。また、データセンターの VPS (仮想専用サーバー) にもインストール可能です。

2. MassBank システムのインストール

2.1 事前準備

Ubuntu OS 上で、MassBank システムのインストールに必要なパッケージをインストールします。

(1) Git のインストール

```
$ sudo apt-get install git
```

(2) Docker のインストール

```
$ sudo apt-get install docker
```

(3) Docker Compose のインストール

```
$ sudo apt-get install docker-compose
```

2.2 インストーラおよびデータのダウンロード

インストーラとデータを MassBank consortium の GitHub (<https://github.com/MassBank>) よりダウンロードします。

Why GitHub? Enterprise Explore Marketplace Pricing Search Sign in Sign up

MassBank consortium
The MassBank consortium develops an ecosystem of databases and tools for mass spectrometry reference spectra.
http://www.massbank.jp/ massbank-developer@lists.sf.net

Repositories 13 Packages People 4 Projects

Grow your team on GitHub Dismiss
GitHub is home to over 40 million developers working together. Join them to grow your own development teams, manage permissions, and collaborate on projects.
Sign up

Pinned repositories

MassBank-web
The web server application and directly connected components for a MassBank web server
Java ★ 5 🍴 12

RMassBank
Forked from sneumann/RMassBank
Playground for experiments on the official http://bioconductor.org/packages/devel/bioc/html/RMassBank.html
R ★ 4 🍴 9

MassBank-data
Official repository of open data MassBank records
Shell ★ 17 🍴 24

2つをダウンロード

インストーラとデータは、Git コマンドを使いダウンロードします。

```
$ sudo git clone https://github.com/MassBank/MassBank-web.git  
$ sudo git clone https://github.com/MassBank/MassBank-data.git
```

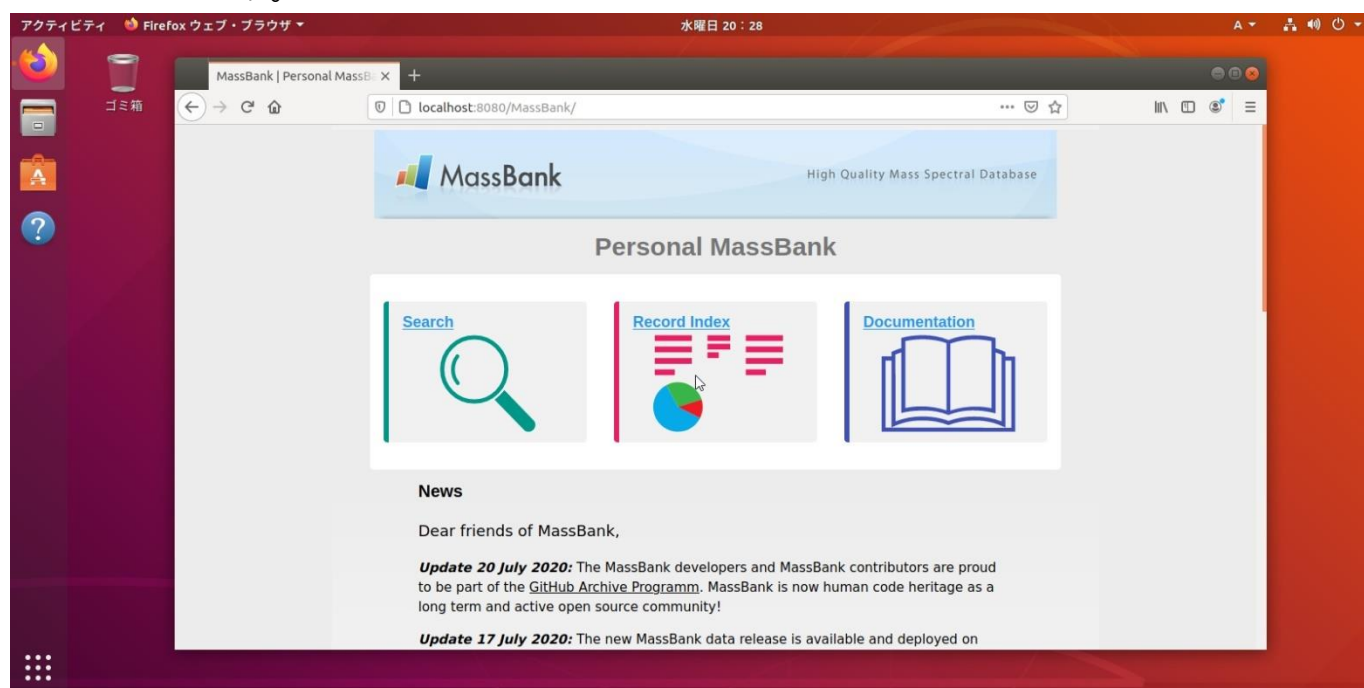
2.3 MassBank のインストール

MassBank-web ディレクトリから、install.sh を実行します。以下のコマンドを実行してください。

```
$ cd MassBank-web  
$ sudo ./install.sh start 0
```

これでインストール作業は完了です。

インストールした PC のブラウザにて、<http://localhost:8080/MassBank/> にアクセスします。以下の画面が表示されればインストールは成功です。画面下部にシステムバージョンが表示されますが、2020 年 11 月時点での最新バージョンは 2.1.6 です。



他の PC からアクセスする場合、URL は <http://PCのIPアドレス:8080/MassBank/> になります。

3. 付録

3.1 Apache のインストールおよび設定

Apache HTTP Server をインストールし、MassBank システムと連携させる設定について説明します。

(1) Apache のインストール

```
$ sudo apt-get install apache2
```

(2) Apache のモジュールを有効にします

```
$ sudo a2enmod proxy proxy_http
```

(3) Apache の設定ファイル /etc/apache2/sites-available/000-default.conf を編集します。

```
<VirtualHost *:80>  
    ProxyPass / http://localhost:8080/MassBank/  
</VirtualHost>
```

VirtualHost の設定部分に
この記述を追加します

(4) Apache を起動します。

```
$ sudo systemctl start apache2
```

(5) Apache 自動起動（OS 起動時）を有効にします。

```
$ sudo systemctl enable apache2
```

Apache と連携させた場合、アクセスするための URL は <http://PCのIPアドレス> になります。