

---

# 薬物動態予測モデルの作成チュートリアル 環境構築手順

富士通株式会社

2024 年 10 月 01 日

# Contents:

第 1 章	薬物動態パラメータ予測モデル作成 環境構築手順	2
1.1	Miniconda のインストール . . . . .	2
1.2	Miniconda の設定 . . . . .	5
1.3	仮想環境の作成 . . . . .	7
1.4	JupyterLab の起動の確認 . . . . .	9
1.5	補足 . . . . .	10
1.6	Miniconda のアンインストール . . . . .	12

Add your content using `reStructuredText` syntax. See the [reStructuredText](#) documentation for details.

# 第1章 薬物動態パラメータ予測モデル作成 環境構築手順

- 本チュートリアルでは、いくつかのライブラリをインストールした **Miniconda** の Python の仮想環境上で作業を行います。

本資料では、その仮想環境を構築する手順について説明します。

- なお、**Anaconda** でも同様の手順で仮想環境の構築が可能です。従業員数が 200 名以上の企業に所属されている場合、Anaconda の利用は**有償**となっておりますのでご注意ください。

参考：

<https://www.anaconda.com/blog/sustaining-our-stewardship-of-the-open-source-data-science-community>

- 本手順では、**Windows 環境でのインストール・設定手順のみ説明**しますが、Miniconda は Mac や Linux でもインストール可能です。

## 1.1 Miniconda のインストール

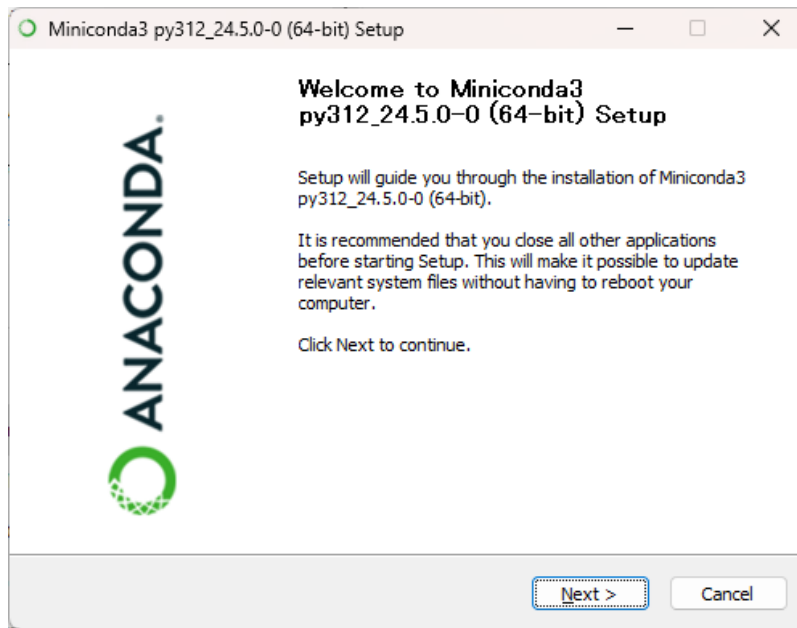
1. **Miniconda** のサイト (<https://docs.anaconda.com/miniconda/>) にアクセスして Miniconda のインストーラをダウンロードします。

Latest - Conda 24.5.0 Python 3.12.4 released Jun 26, 2024

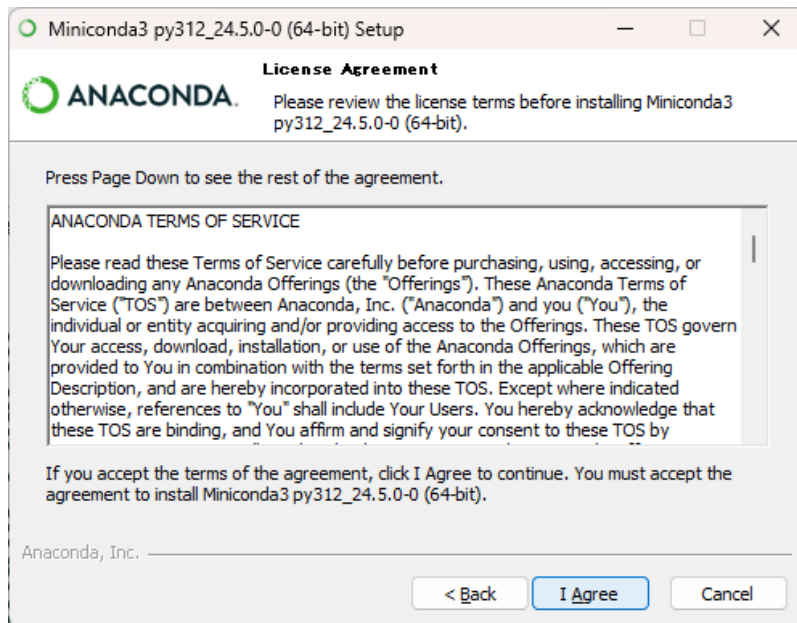
Platform	Name	SHA256 hash
Windows	Miniconda3 Windows 64-bit	b1ce11a339c8246010e89085f6fa6f1940a55fed550b57a8039c7d4b6200
macOS	Miniconda3 macOS Intel x86 64-bit bash	b1c87c8334ea878d30a9976c3f60b1004e6d55bdec5220089fec40be81156363
	Miniconda3 macOS Intel x86 64-bit pkg	87152b1143b7d41c5553c1bb998957fa41895192c446755851e3844e33df1aae
	Miniconda3 macOS Apple M1 64-bit bash	12e678b8150aea69a132568b6176a019c7a1ba753ddf5caedf086d3c5460fe92
	Miniconda3 macOS Apple M1 64-bit pkg	630a0a077e3915841819984ce5c09ca7cc34a696b0502da56204cd923088ecc6
Linux	Miniconda3 Linux 64-bit	4b3b3b1b99215e85fd73fb2cd7ebf318ac942a457072de62d88505656eb83e

Windows版のインストーラをダウンロード

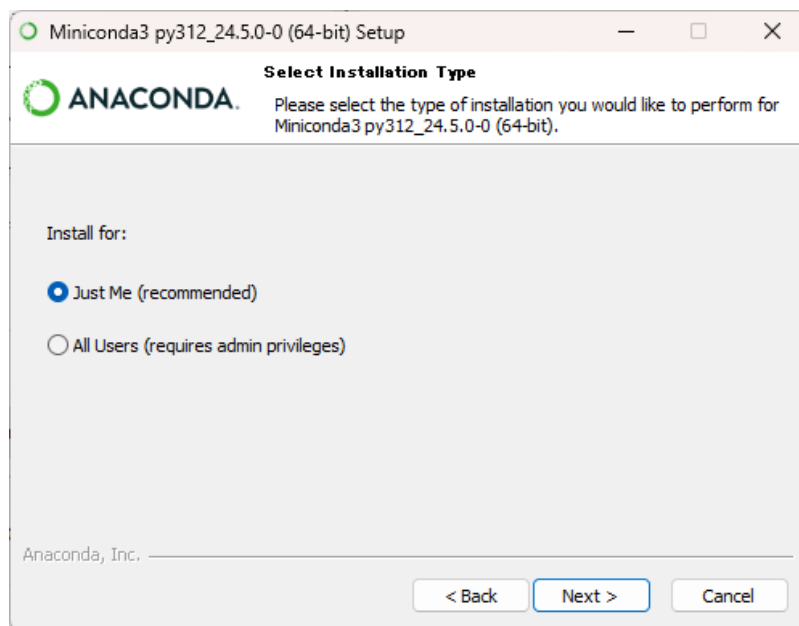
2. インストーラが起動しますので、画面の指示に従って進めます。



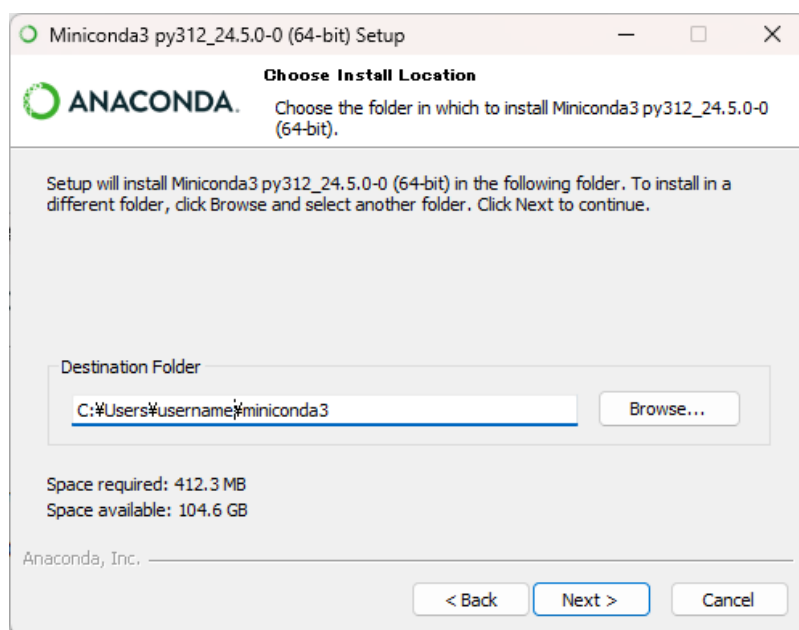
Next ボタンをクリックします。



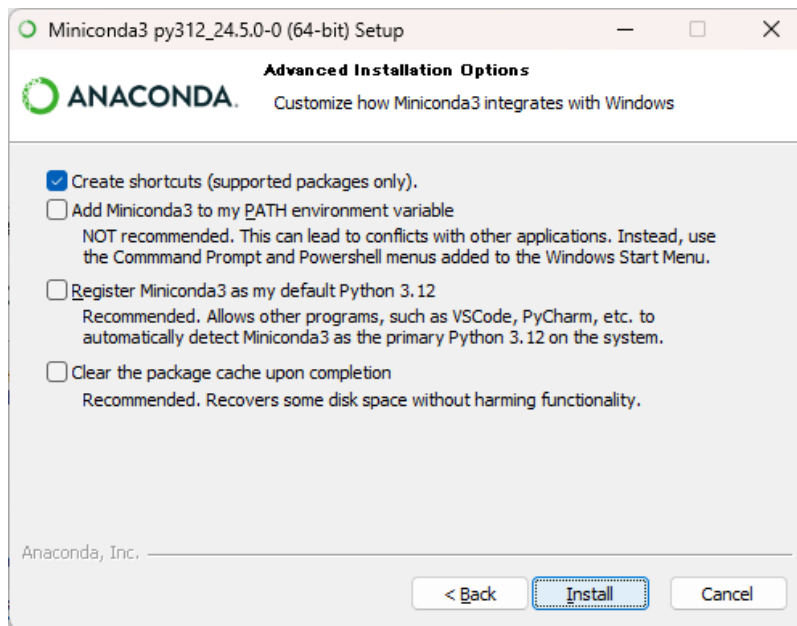
I Agree ボタンをクリックします。



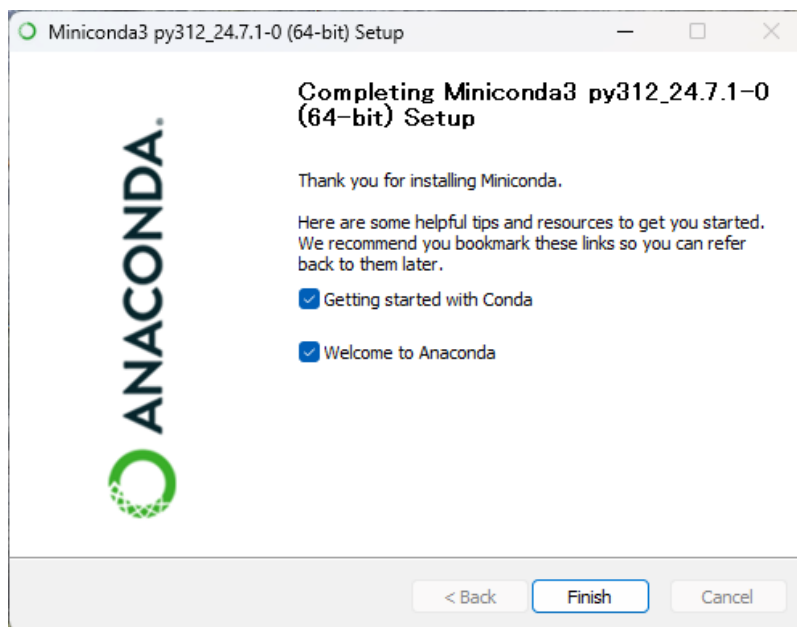
Next ボタンをクリックします。



インストール先を確認し、Next ボタンをクリックします。



Install ボタンをクリックするとインストールが始まります。



Finish ボタンをクリックすると、インストールが完了です。

## 1.2 Miniconda の設定

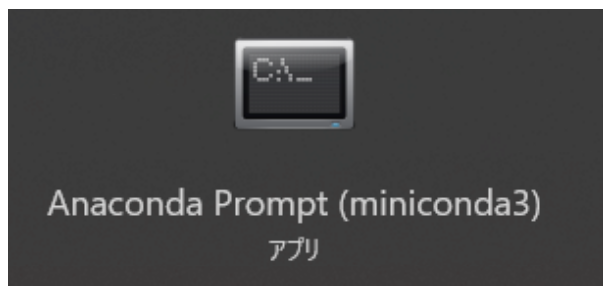
Miniconda では `conda install` コマンドにより様々なリポジトリから Python ライブラリをインストールすることができますが、従業員数が 200 名以上の企業に所属されている場合、Anacodna のリポジトリへのアクセスは有償となります。

本チュートリアルでは、無償のリポジトリである `conda-forge` からインストールを行いますので、そのための設定を行います。合わせてプロキシの設定も行います。

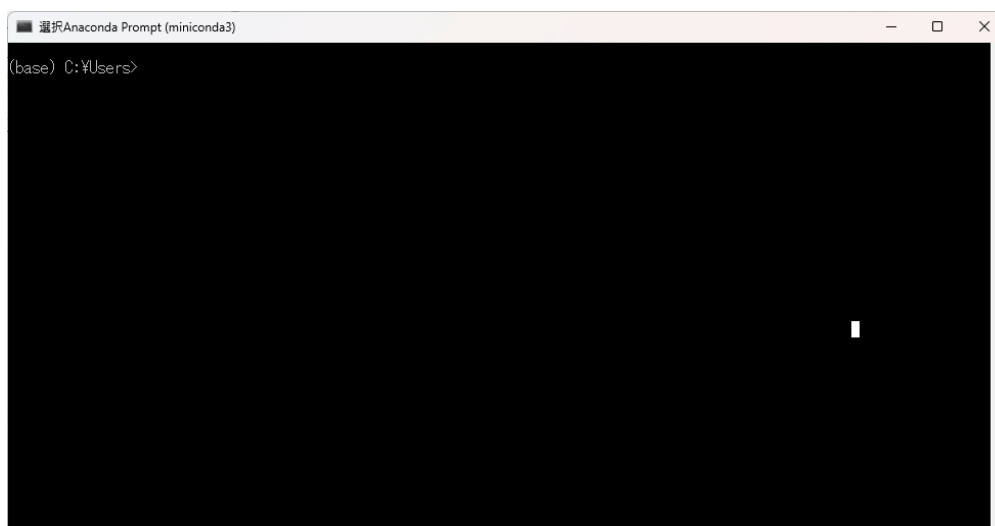
## 1.2.1 リポジトリ (チャンネル) の設定

### 1. Anaconda Prompt の起動

Windows の検索窓より **Anaconda Prompt** と入力すると以下のアイコンのアプリケーションが検索されますのでクリックします。



以下のようなダイアログが表示されます。以下、このプロンプトを通して **conda** のコマンドを入力していきます。



### 2. チャンネルの確認と変更

以下のコマンドにより、現在設定されているチャンネルを確認します。

```
conda config --show channels
```

以下のように **conda-forge** のみ表示されていれば問題ありません。

```
channels:  
- conda-forge
```

**channels: defaults** が表示された場合、以下手順で **default** チャンネルを削除してください。

```
conda config --remove channels defaults
```

また、**conda-forge** が表示されない場合、以下手順で **conda-forge** チャンネルを追加してください。

```
conda config --add channels conda-forge
```

再度 `conda config --show channels` を実行し、最終的に以下のように **conda-forge** のみ表示されることを確認してください。

```
channels:  
- conda-forge
```

## 1.2.2 プロキシの設定 (オプション)

社内ネットワークなどでインターネット接続をする為にプロキシ設定が必要な場合、以下の手順で設定してください。

1. `C:/Users/[ユーザ ID]/.condarc` をテキストエディタで開きます。([ユーザ ID] を自分のユーザ名に置き換えてください)  
※ `.condarc` が表示されない場合、Explorer の「表示」タブ⇒「表示/非表示」の中の「隠しファイル」にチェックを入れてください。
2. 以下の通り、`proxy_servers:` 以下の設定を追加し、保存してください。  
※ [] 内はご自身の環境に置き換えてください。

```
channels:  
- conda forge  
proxy_servers:  
  http: http://[認証 ID]:[パスワード]@[Proxy サーバアドレス]:[ポート番号]  
  https: http://[認証 ID]:[パスワード]@[Proxy サーバアドレス]:[ポート番号]
```

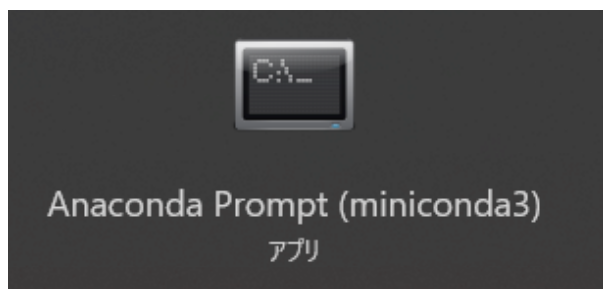
※認証 ID、パスワードに@等を含む場合、`%40` へのエンコーディングが必要です。

## 1.3 仮想環境の作成

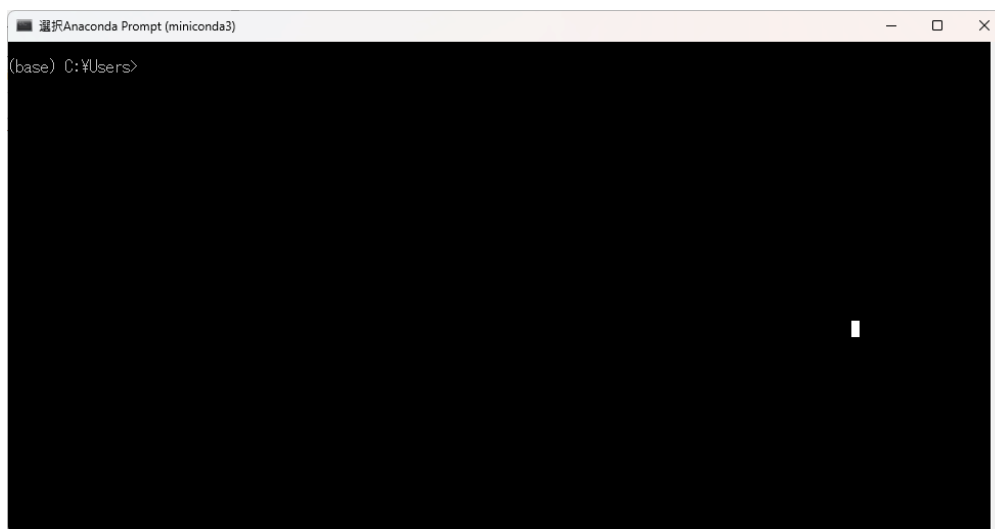
Miniconda では `conda` により仮想環境を管理します。  
以下、`conda` を用いて仮想環境を作成する手順を説明します。

### 1. Anaconda Prompt の起動

Windows の検索窓より **Anaconda Prompt** と入力すると以下のアイコンのアプリケーションが検索されますのでクリックします。



以下のようなダイアログが表示されます。以下、このプロンプトを通して `conda` のコマンドを入力していきます。



2. 事前配布資料の zip ファイルを展開したフォルダに移動します。

```
cd <zip 展開フォルダ>
```

3. プロンプトより以下を入力して仮想環境を作成します。

```
conda env create -f environment.yml
```

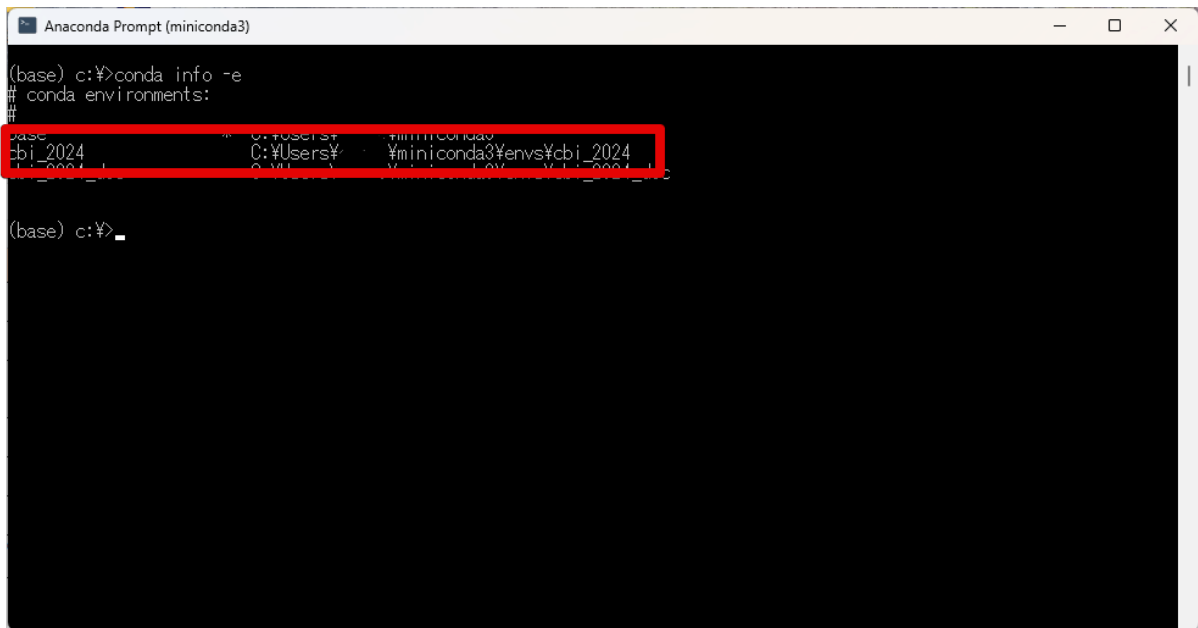
※実行にはしばらく (数分から数十分) かかります。

※万一エラーが発生する場合は以下をお試しください。

```
conda env create -f environment_min.yml
```

4. 以下コマンドを入力し、仮想環境が作成されていることを確認します。

```
conda info -e
```



```
(base) c:\>conda info -e
# conda environments:
#
base                  *  C:\Users\Y\miniconda3\envs\base
cbi_2024              *  C:\Users\Y\miniconda3\envs\cbi_2024
(base) c:\>
```

正しく作成されていれば、一覧に `cbi_2024` が表示されます。

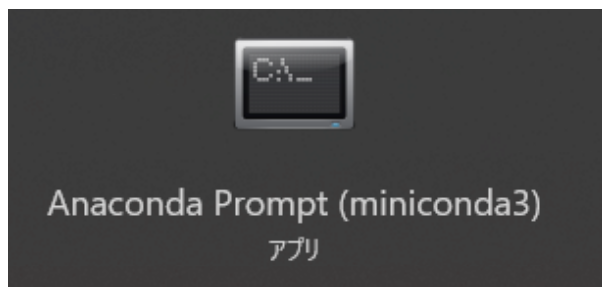
※ なお、一覧に表示される `base` は、最初から入っているデフォルトの仮想環境です。

## 1.4 JupyterLab の起動の確認

以下、構築した環境上で JupyterLab が動作するかを確認する手順を説明します。

### 1. Anaconda Prompt の起動

Windows の検索窓より **Anaconda Prompt** と入力すると以下のアイコンのアプリケーションが検索されますのでクリックします。



2. ターミナルが起動しますので、プロンプトにコマンドを入力し、事前配布資料の zip ファイルを展開したフォルダに移動します。

```
cd <zip 展開フォルダ>
```

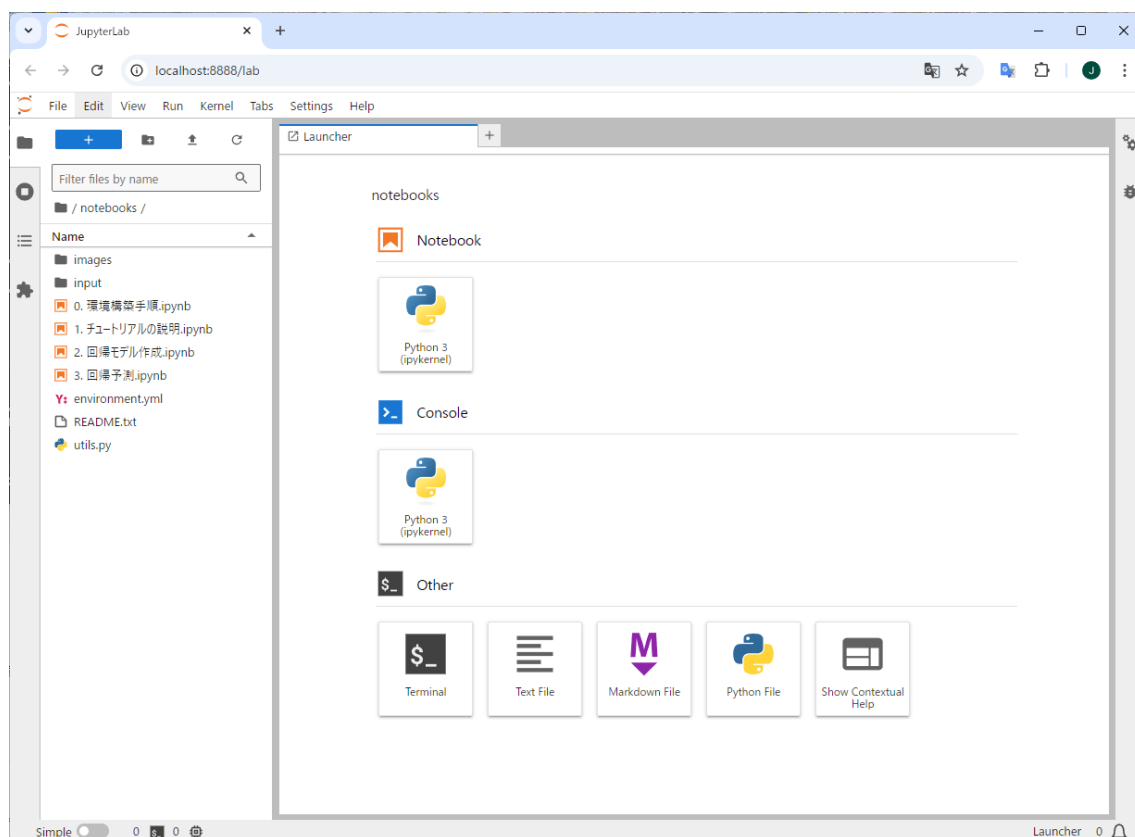
3. 仮想環境をアクティベートします

```
conda activate cbi_2024
```

4. 以下コマンドを実行します。

```
jupyter lab
```

5. ブラウザが起動し、以下画面が表示されれば、問題なく JupyterLab がインストールされています。  
※ブラウザが自動的に開かない場合は、ターミナルに表示された URL をコピーしてブラウザに貼り付けて確認してください。



6. JupyterLab を起動したターミナルで以下のキーを押して JupyterLab を停止します。

```
Ctrl + C
```

## 1.5 補足

### 1.5.1 仮想環境の管理によく使う conda のコマンド

#### 仮想環境の一覧の確認

以下コマンドにより、作成された仮想環境の一覧を確認することができます。

```
conda info -e
```

### 仮想環境のライブラリ確認

以下コマンドにより、仮想環境にインストールされている Python ライブラリの一覧を参照することができます。

```
conda list
```

### 仮想環境を有効にする (切り替え)

以下コマンドにより、仮想環境をアクティベート (有効化) することができます。

```
conda activate
```

### 仮想環境から抜ける

以下コマンドにより、現在の仮想環境を抜けることができます。

```
conda deactivate
```

これによりアクティベート前の仮想環境 (通常はデフォルトの仮想環境である `base`) に戻ります。

### 仮想環境の削除

以下コマンドにより、作成した仮想環境を丸ごと削除することができます。

```
conda remove -n [仮想環境名] --all
```

`--all` をつけることで関連するファイルも全て削除されます。

以下のような確認が表示される場合、`y` を入力してください。

```
everything found within the environment (...), including any conda environment_
↳ configurations and any non-conda files, will be deleted. Do you wish to continue?
(y/[n])?
```

## 1.6 Miniconda のアンインストール

ここではチュートリアル後に、Miniconda をアンインストールする手順について説明します。

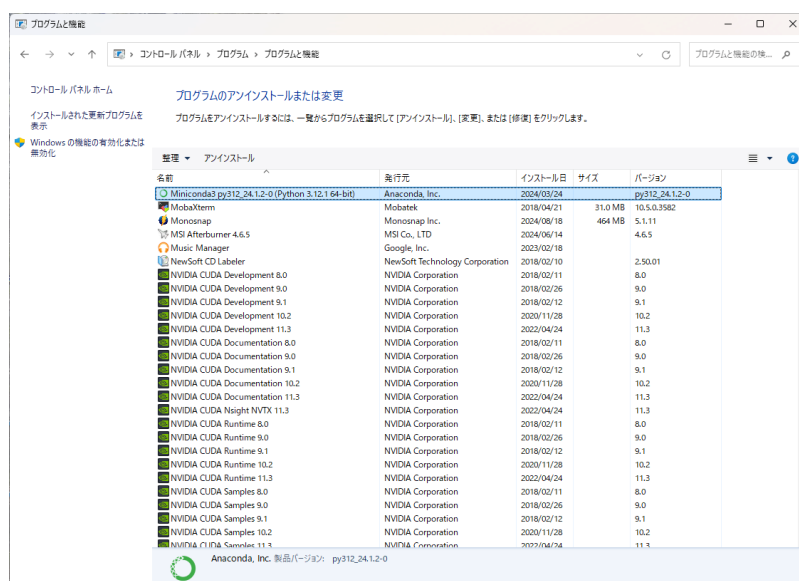
### 1. コントロールパネルを開く

スタートメニューから「コントロールパネル」を検索して開きます。

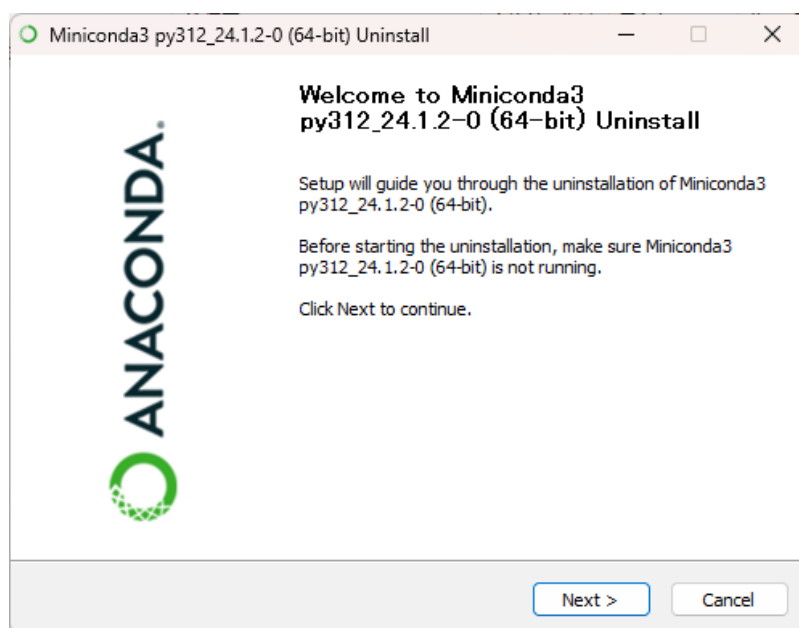
### 2. 「プログラムのアンインストール」を選択

「プログラムのアンインストール」をクリックします。

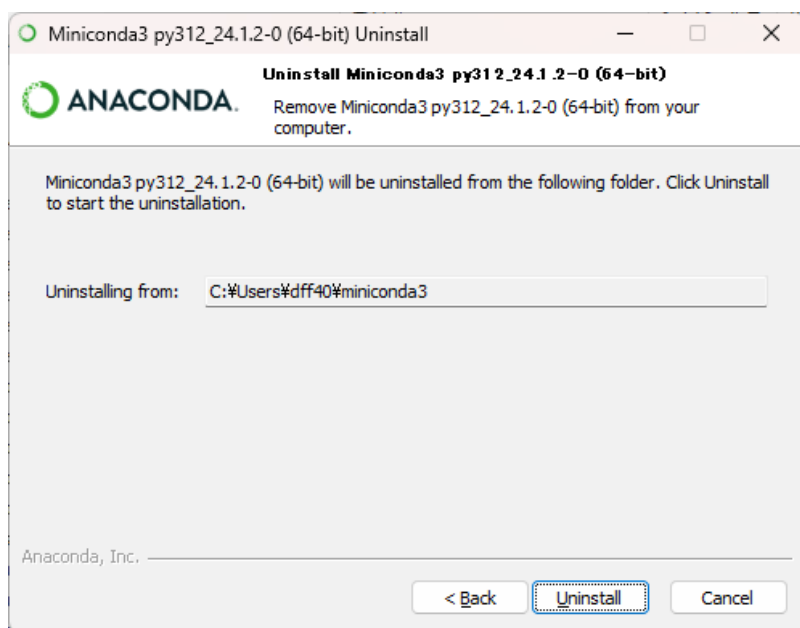
### 3. アンインストール



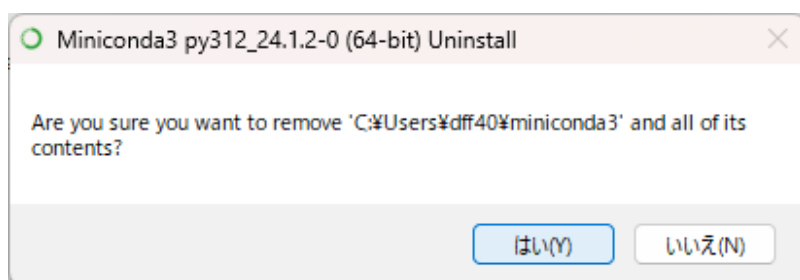
インストールされているプログラムのリストから「Miniconda」を見つけダブルクリックします。



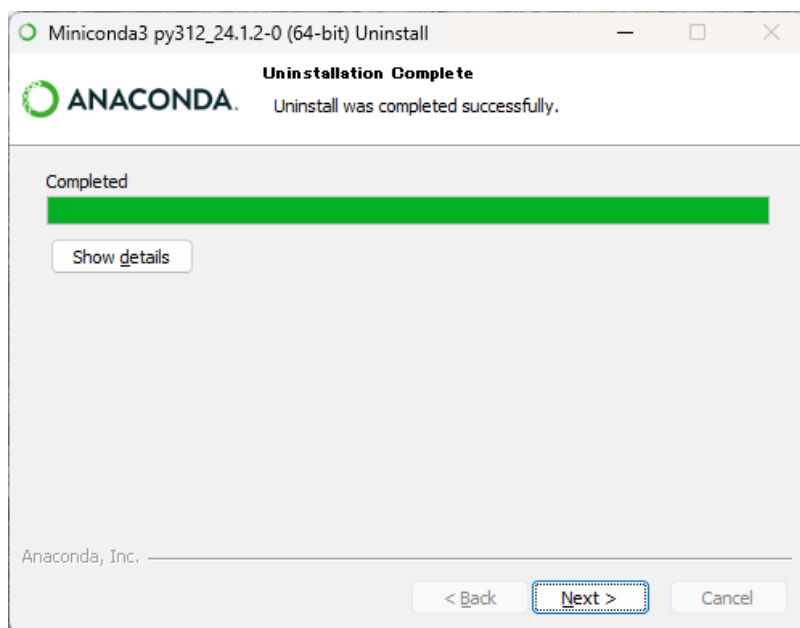
アンインストーラが立ち上がりますので、Next をクリックします。



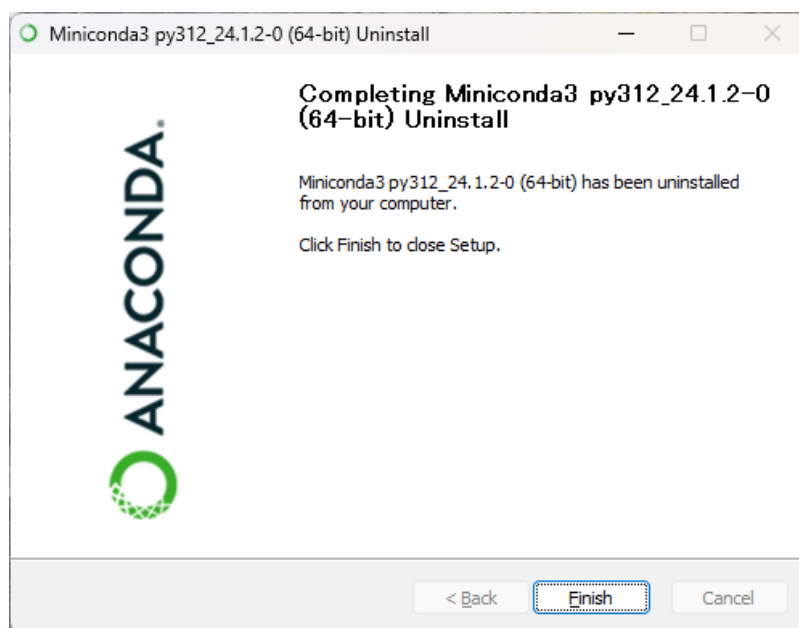
Uninstall をクリックします。



はいをクリックします。



Next をクリックします。



Finish をクリックするとアンインストール完了です。