

Modellerのインストール手順 Mac 版

2015年2月5日(木)

Modellerは、UCSFのAndrej Saliのグループが開発しているホモロジーモデリングのプログラムです。アカデミックの方なら、ユーザー登録を行えば、無料で使用することができます。Windows, Mac, Linuxでのプログラムをダウンロード・インストールすることが可能です。コマンドラインで使用するため、初心者にはやや使いにくいのですが、UCSF Chimeraという分子ビューアを使うと、GUIを通じてModellerを実行することができます。

インストールに先立って、ユーザー登録を行い、ライセンスキーを取得する必要があります。

※無料で配布されるライセンスは、非商用目的での使用に限定されます。企業の方で講習会に参加される方は、本講習会での使用に限定していただくようお願いいたします。本格的に商用目的で使用する場合は、Accelrys社から市販されているModellerプログラムを購入していただくようお願いいたします。

1. ユーザー登録(Registration)

<http://salilab.org/modeller/>にアクセスし、左端の[Registration]をクリックします。

[To main Sali lab pages](#)

Modeller

Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints

```
A I L V G S M P R R D G M E R K D L L K A N V K I F K C Q G A
V E V C P V D C F Y E G P N F L V I H P D E C I D C A L C E P
G A C K P E C P V N I Q G S - - Y A I D A D S C I D C G S
C - - I A C G A C K P E C P V N I Q G S - - Y A I D A D S
```

[About MODELLER](#)

[MODELLER News](#)

[Download & Installation](#)

[Release Notes](#)

[Data file downloads](#)

[Registration](#)

[Accelrys licensing](#)

[Discussion Forum](#)

[Subscribe](#)

[Browse archives](#)

[Search archives](#)

メニューを表示

About MODELLER

MODELLER is used for homology or comparative modeling of protein three-dimensional structures (1,2). The user provides an alignment of a sequence to be modeled with known related structures and MODELLER automatically calculates a model containing all non-hydrogen atoms. MODELLER implements comparative protein structure modeling by satisfaction of spatial restraints (3,4), and can perform many additional tasks, including de novo modeling of loops in protein structures, optimization of various models of protein structure with respect to a flexibly defined objective function, multiple alignment of protein sequences and/or structures, clustering, searching of sequence databases, comparison of protein structures, etc.

2. ユーザーの情報を入力する

The screenshot shows the registration page for Modeller. The page title is "Modeller" and the subtitle is "Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints". The registration form includes the following fields and options:

- Name: Takahira Kudo
- Title: Mr.
- Institution: Institute of Protein Research, Osaka University
- Address: 3-2, Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, Japan
- Email: t-kudou@protein.osaka-u.ac.jp
- Confirm email: t-kudou@protein.osaka-u.ac.jp
- Notify me by email of new MODELLER releases:
- On which platforms do you want to use MODELLER? (Check all that apply.)
 - I want to use [ModWeb](#) or [ModLoop](#)
 - Microsoft Windows
 - Apple Mac OS X
 - Linux (32 bit PC)
 - Linux (x86_64 machine, e.g. Opteron)
 - Linux (Itanium 2)
 - SGI IRIX
 - IBM AIX
 - Sun Solaris (Sparc)
 - Tru64/OSF (Alpha)
 - FreeBSD
 - Other(s) (please specify)

The license agreement section includes the following text:

5. LICENSEE agrees that it will use the PROGRAM, and any modifications, improvements, or derivatives to PROGRAM that LICENSEE may create (collectively, "IMPROVEMENTS") solely for internal, non-commercial purposes and shall not distribute or transfer the PROGRAM OR IMPROVEMENTS to any person without prior written permission from LICENSOR. The term "non-commercial", as used in this Agreement, means academic or other scholarly research which (a) is not undertaken for profit, or (b) is not intended to produce works, services, or data for commercial use, or (c) is neither conducted, nor funded, by a person or an entity engaged in the commercial use, application or exploitation of works similar to the PROGRAM.

Please note that your email address is used by us only for Modeller. It will only be used to send your license key, and (unless you opted out above) to notify you of any new Modeller releases.

AGREED AND ACCEPTED

ライセンスは非商用目的に限定されることに注意してください。

名前、所属、アドレス、電子メールアドレスを入力し、[AGREED AND ACCEPTED]をクリックします。

3. 電子メールで送付されるライセンスキーを確認

Hi,

Thank you very much for signing the license agreement for the MODELLER program.

The MODELLER license key is



This license key will work for any release of MODELLER 8 or 9 (e.g. 9.14, 8v2) and should be given to the MODELLER installer when requested.

Please keep this email for reference, in case you want to install MODELLER on a different platform or computer in future (the key is the same for all platforms). If you lose the email, however, you can always fill in the license agreement again.

Regards,

Ben Webb, Modeller Caretaker

--

Departments of Biopharmaceutical Sciences and Pharmaceutical Chemistry, and
California Institute for Quantitative Biomedical Research
University of California, San Francisco

しばらくすると
以下のような内容の
メールが、入力した
アドレス先に送られて
きます。

が、ライセンスキーです。

これが、Modellerの
インストールに
必要となります。

4.ダウンロードとインストールのページへ

<http://salilab.org/modeller>に戻り、左端の[Download & Installation]をクリックします。

[To main Sali lab pages](#)

Modeller

Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints

```
A I L V G S M P R R D G M E R K D L L K A N V K I F K C Q G A
V E V C P V D C F Y E G P N F L V I H P D E C I D C A L C E P
G A C K P E C P V N I Q G S - - Y A I D A D S C I D C G S
C - - I A C G A C K P E C P V N I I Q G S - - Y A I D A D S
```

[About MODELLER](#)

[MODELLER News](#)

[Download & Installation](#)

[Release Notes](#)

[Data file downloads](#)

[Registration](#)

[Accelrys licensing](#)

[Discussion Forum](#)

[Subscribe](#)

[Browse archives](#)

[Search archives](#)

メニューを表示

About MODELLER

MODELLER is used for homology or comparative modeling of protein three-dimensional structures (1,2). The user provides an alignment of a sequence to be modeled with known related structures and MODELLER automatically calculates a model containing all non-hydrogen atoms. MODELLER implements comparative protein structure modeling by satisfaction of spatial restraints (3,4), and can perform many additional tasks, including de novo modeling of loops in protein structures, optimization of various models of protein structure with respect to a flexibly defined objective function, multiple alignment of protein sequences and/or structures, clustering, searching of sequence databases, comparison of protein structures, etc.

5.プログラムをダウンロードする

Download & Installation

MODELLER is available free of charge to academic non-profit institutions; you will, however, need to [register for a license](#) in order to use the software. It is also [available through Accelrys](#) for government research labs and commercial entities.

Modeller 9.14, released July 29th, 2014

To install MODELLER on this machine, we recommend the **Windows** package.

Windows (32-bit)	[GPG signature] Installation guide
Windows (64-bit)	[GPG signature] Installation guide
Mac (32-bit or 64-bit Intel)	[GPG signature] Installation guide
Linux (32-bit RPM)	Installation guide
Linux (64-bit x86_64 RPM)	Installation guide
Linux (32-bit Debian/Ubuntu package)	[GPG signature] Installation guide
Linux (64-bit x86_64 Debian/Ubuntu package)	[GPG signature] Installation guide
Generic Unix tarball	[GPG signature] Installation guide

使用しているパソコンのOSの種類、および32-bit版・64-bit版の区別に従って、プログラムを選択し、ダウンロードします。ここでは、MacのOS X 10.10を使用している場合を想定し、[Mac (32-bit or 64-bit Intel)]を選択します。ただし、以下の手続きは、他のバージョンのOS Xであってもほぼ同じです。

6. インストールの開始

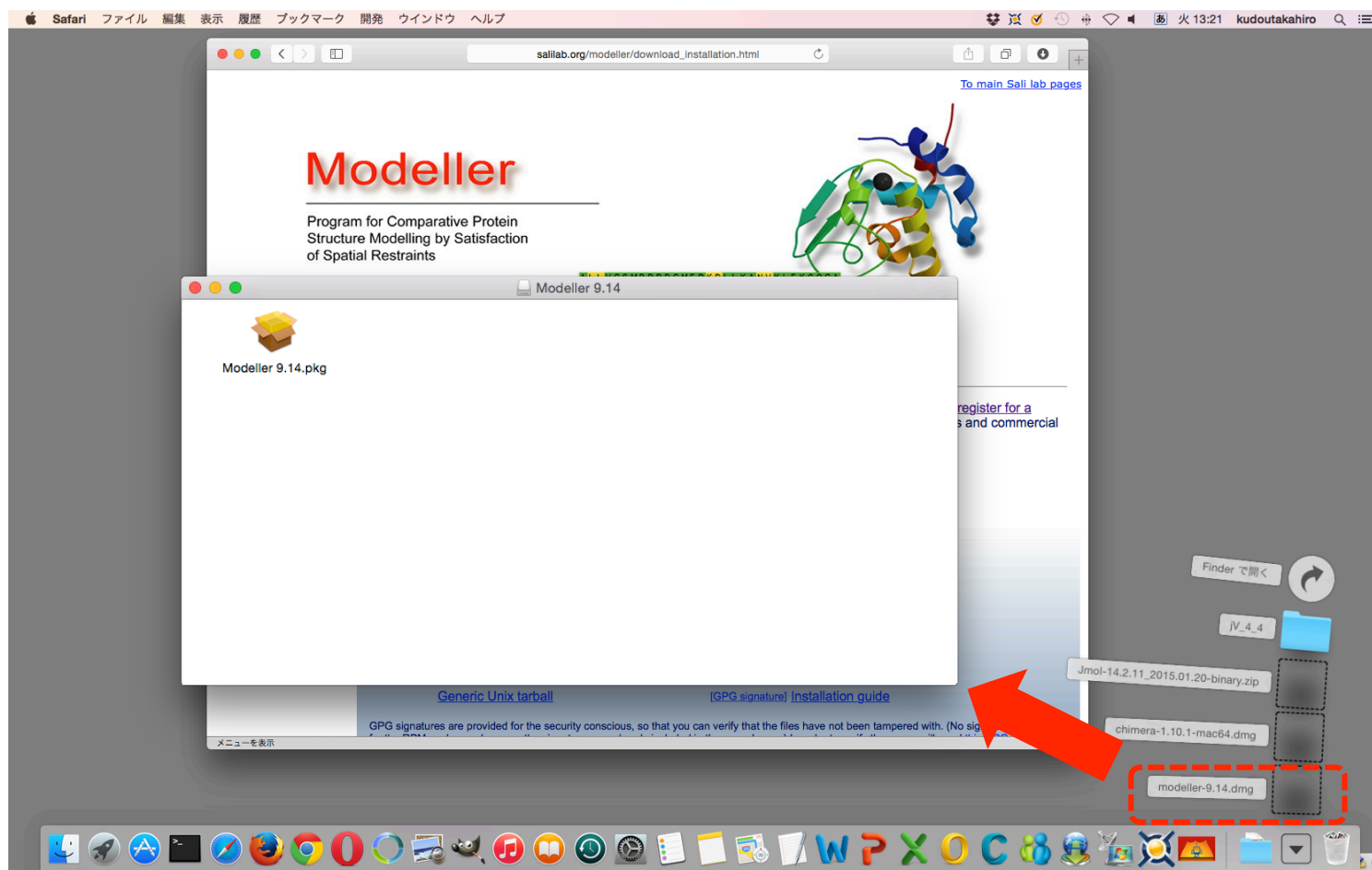


Safariの例→p8



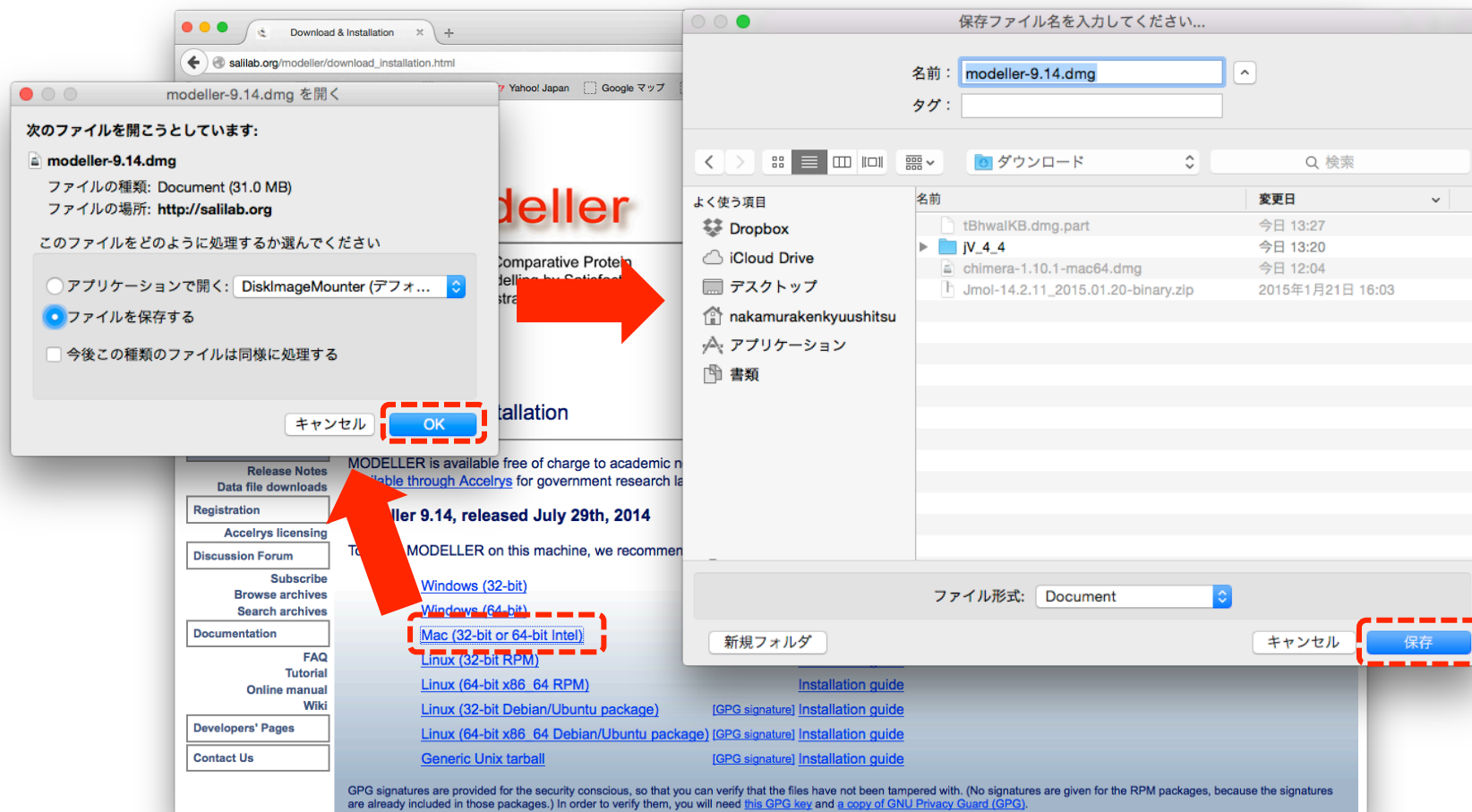
Firefoxの例→p9

6. インストールの開始 (Safari)



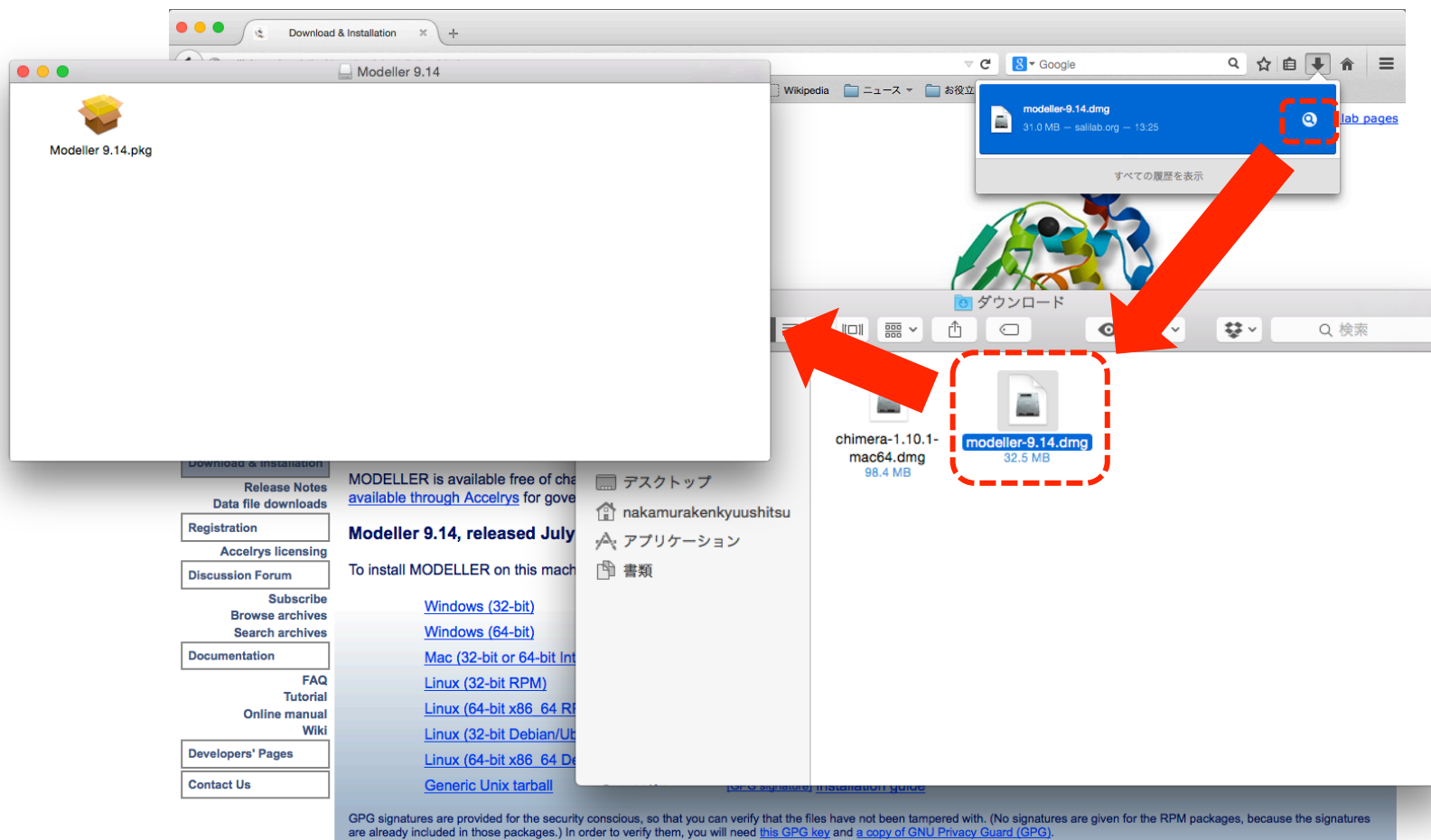
ダウンロードリストにある「modeller-9.14.dmg」(バージョン等によりファイル名は異なる)をクリックするとModellerインストーラがマウントされます。→p11へ

6. インストールの開始 (Firefox)



指示に従いファイルを保存します。保存先は任意の場所で結構です。

6. インストールの開始 (Firefox)



ダウンロードリストにある「modeller-9.14.dmg」(バージョン等によりファイル名は異なる)をFinderで表示してダブルクリックするとModellerインストーラがマウントされます。

6. インストールの開始



「modeller-9.14.pkg」(バージョン等によりファイル名は異なる)をダブルクリックするとModellerインストーラが起動します。

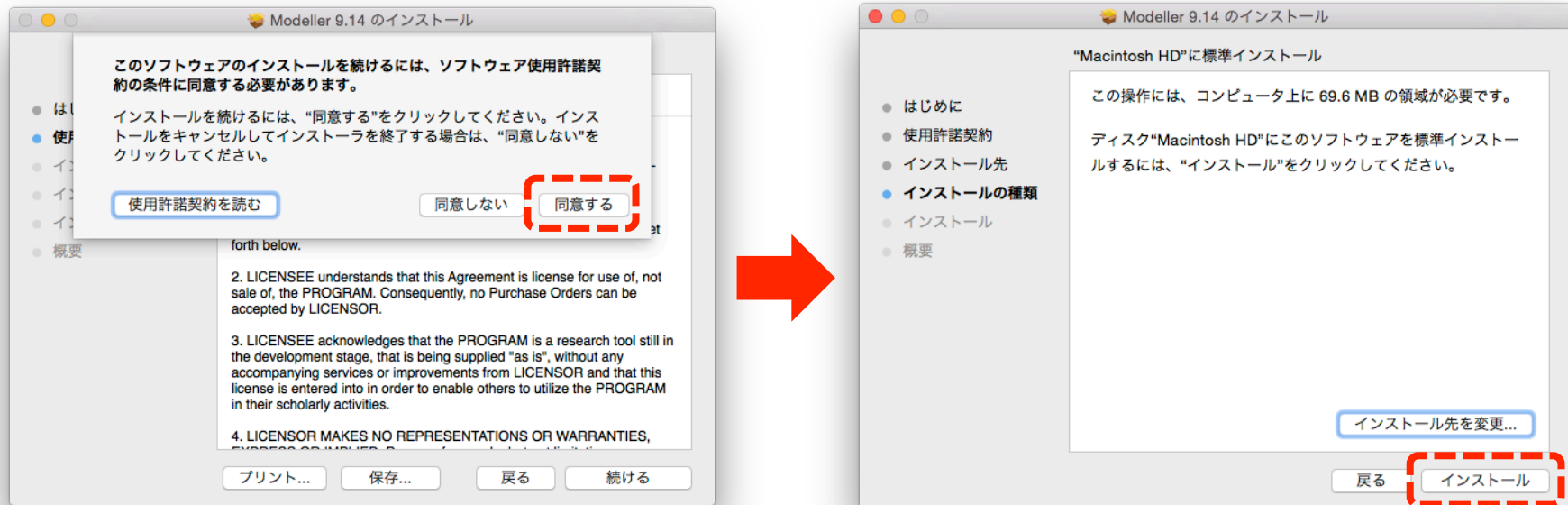
設定によっては上記ダイアログが表示されて起動できないことがあります。その時は右クリックでポップアップメニューを表示させ、「開く」をクリックして下さい。

7. ウィザードに従ってインストール



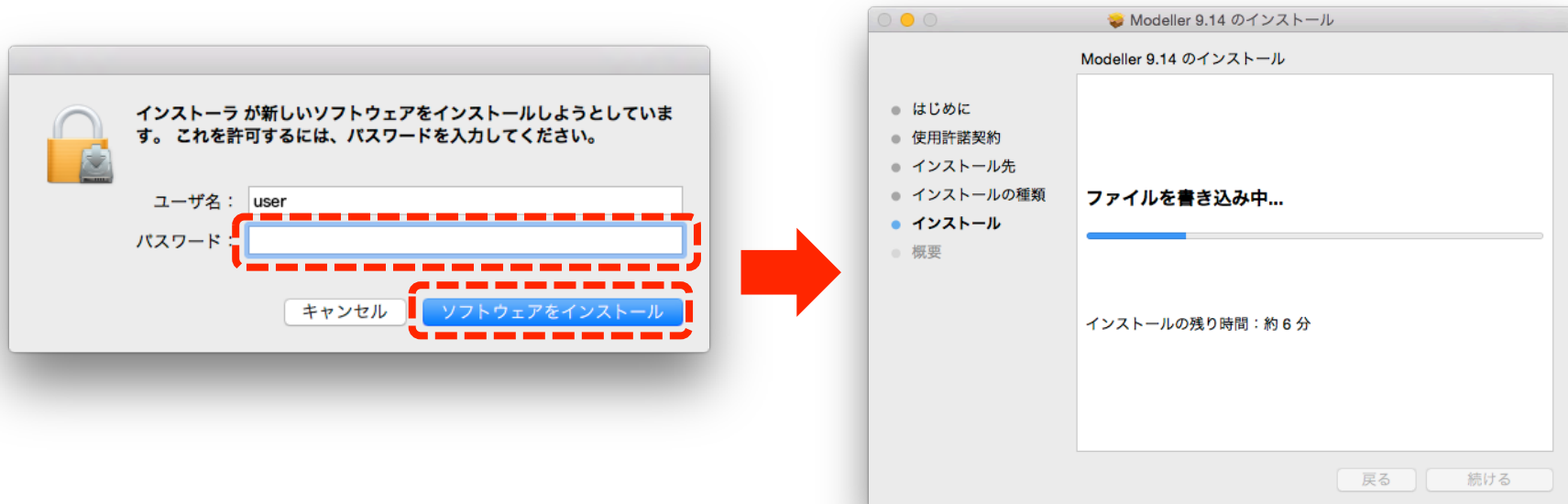
インストーラのウィザードが起動されるので、適切なボタンを選択していきます。

7. ウィザードに従ってインストール



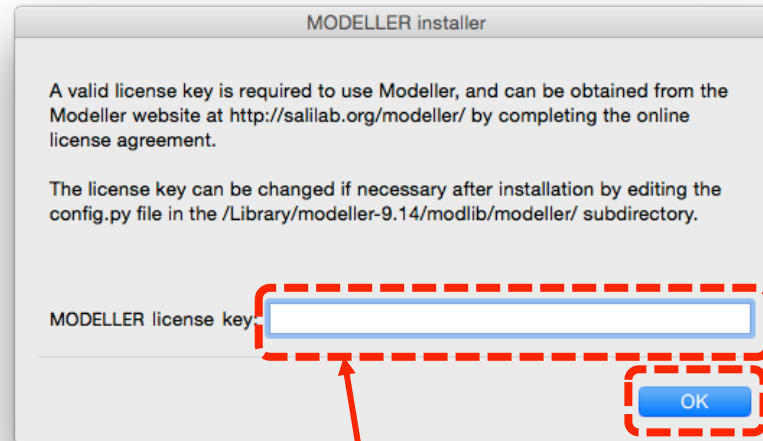
インストーラのウィザードが起動されるので、適当なボタンを選択していきます。

7. ウィザードに従ってインストール



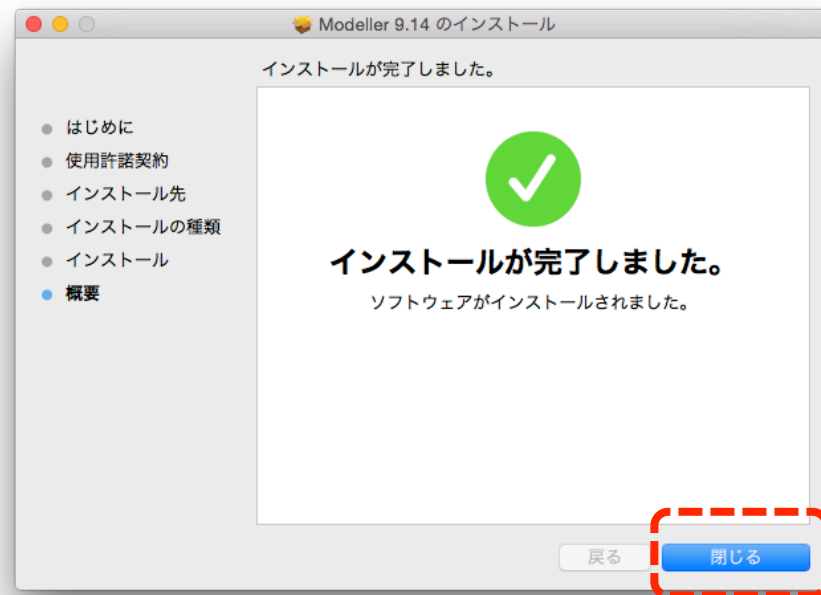
インストーラのウィザードが起動されるので、適切なボタンを選択していきます。

8. ライセンスキーの入力



ここで、電子メールで送付された
ライセンスキーの文字列を
入力します。

9. インストールの完了



これでインストールは完了です。

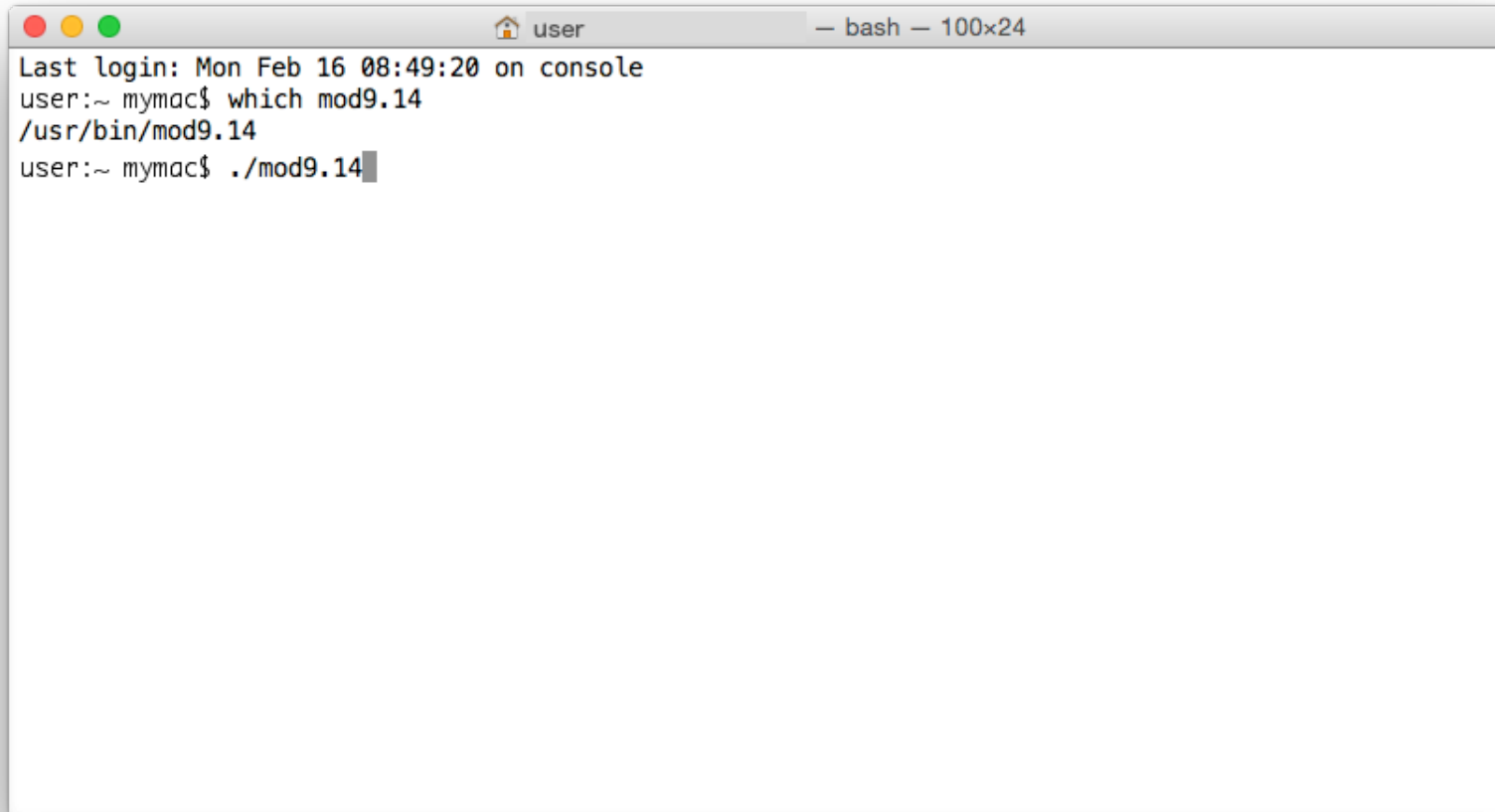
Modellerのコマンドラインでの使い方

UCSF Chimeraを用いると、GUIを用いて、インストールしたModellerを使用することができます。ここでは、UCSF Chimeraを用いず、直接コマンドを入力して、Modellerを実行する方法を簡単に説明します。



/Applications/Utilitiles/
(/アプリケーション/ユーティリティ/
にあるTerminal.appをダブルクリックして起動

Modellerのコマンドラインでの使い方

A terminal window titled 'user' with a home icon and 'user' text, and a subtitle '- bash - 100x24'. The terminal shows the following text:

```
Last login: Mon Feb 16 08:49:20 on console
user:~ mymac$ which mod9.14
/usr/bin/mod9.14
user:~ mymac$ ./mod9.14
```

コマンドラインの画面が表示されます。ここで、ModellerのPythonのスクリプトファイル、アラインメントファイル、鋳型構造のPDBファイルの三つを用意し、
./mod9.14 [スクリプトファイル]
とコマンドを入力すると、モデリングを開始することができます。スクリプトファイルはHOMCOSサーバを用いて、作成することもできます。