Modellerのインストール手順 Windows 版

2015年2月5日(木)

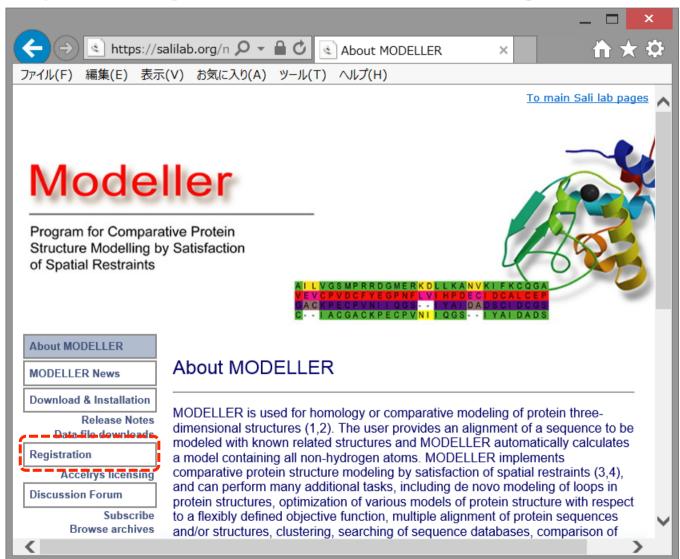
Modellerは、UCSFのAndrej Saliのグループが開発している<u>ホモロジーモデリン</u>グのプログラムです。<u>アカデミックの方なら、ユーザー登録を行えば、無料</u>で使用することができます。Windows, Mac, Linuxでのプログラムをダウンロード・インストールすることが可能です。コマンドラインで使用するため、初心者にはやや使いにくいのですが、UCSF Chimeraという分子ビューアを使うと、GUIを通じてModellerを実行することができます。

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します。本格的に<u>商用目的で使用する場合は、Accelys社から市販されているModellerプログラムを購入</u>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。



2. ユーザーの情報を入力する

(https://s	alilab.org/n ♀ ♀ ♀ ♂ ﴿ Registration ×			·			
	ァイル(F) 編集(E) 表示	(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)	This license shall be for a term of 5 years except that upon any breach of this Agreement by LICENSEE, LICENSOR					
ı		<u>To main Sali lab pages</u>	shall have the right to terminate this license immediately upon notice to LICENSEE.					
L		_ • /	Name	Takeshi Kawabat	8			
	Mode	llor	Title (e.g. Dr., Mr., Mrs.)					
	Program for Comparative Protein		Institution		n Research, Osaka Univer	with a		
			(no abbreviations, please))	-	<u> </u>		
	Structure Modelling b of Spatial Restraints	y Satisfaction		Yamadaoka 3-2	, Suita, Osaka, JAP	AN		
		AIL VGSMPRRDGMERKDLLKANVKI FKCGGA VEV CPVDCFYEGPNFLVI HPDECI DCAL CEP	Address					
I.		Q ACGACKPECPVNI QGS I YAI DADS				<u> </u>		
	About MODELLER	Degistration	Email	kawabata@prote	in.osaka-u.ac.jp			
	MODELLER News	Registration	Confirm email					
Г	Download & Installation Release Notes	To obtain the MODELLER license key (which you need to install and run MODELLER) please fill out the following License Agreement.		□ Notify me by email of new MODELLER releases				
Ш	Data file downloads Registration	End-User Software License Agreement for MODELLER	On which platforms do you want to use MODELLER? (Check all that apply.)					
П	Accelrys licensing	Andrej Sali ("LICENSOR") grants to ("LICENSEE") a fully-paid, non-exclusive,	✓I want to use ModWeb	nt to use ModWeb or ModLoop				
Г	Discussion Forum Subscribe	and non-transferable license to use the "MODELLER" computer software program and associated documentation furnished hereunder (hereinafter called	✓ Microsoft Windows	Apple Mac OS	Linux (32 bit PC)	Linux (x86_64 machine, e.g.	Linux (Itanium	
I.	Browse archives Search archives	the "PROGRAM"), upon the terms and conditions hereinafter set out and until termination of this license as set forth below.		X	Sun Solaris	Opteron)	2)	
Н	Documentation FAQ	LICENSEE understands that this Agreement is license for use of, not sale of, the PROGRAM. Consequently, no Purchase Orders can be accepted by	□SGI IRIX	□ IBM AIX	(Sparc)	☐ Tru64/OSF (Alpha)	□FreeBSD	
	Tutorial Online manual	LICENSOR.	Other(s) (please					
4			specify)					
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								
		person without prior written permission from LICENSOR. The term "non-commercial", scholarly research which (a) is not undertaken for profit, or (b) is not intended to produ				l be sent to the address you provide	. If you give an	
commercial use, or (c) is neither conducted, nor funded, by a person or an entity engaged in the commercial use, application or exploitation of section and the commercial use, application or exploitation of section and the commercial use, application or exploitation of section and the commercial use, application or exploitation or exploitation of section and the commercial use, application or exploitation or ex								
mic email address rather than a home email address. The server tries to use your each address to determine your academic status. (It is not just a simple check for a '.edu' extension, but it cannot be address to determine your academic status.							but it cannot	
	•	は非商用目的に限定されることに	recognize every institution.) If you do not provide an academic email address, your request must be processed manually, which will result in significant delays, and you may be denied a license. Please note that your email address is used by us only for Modeller. It will only be used to send your license key, and					
	注意してく	ばださい。						
			(unless you opted out above) to notify you of any new Modeller releases.					
			AGREED AND ACCEPTED					

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

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。

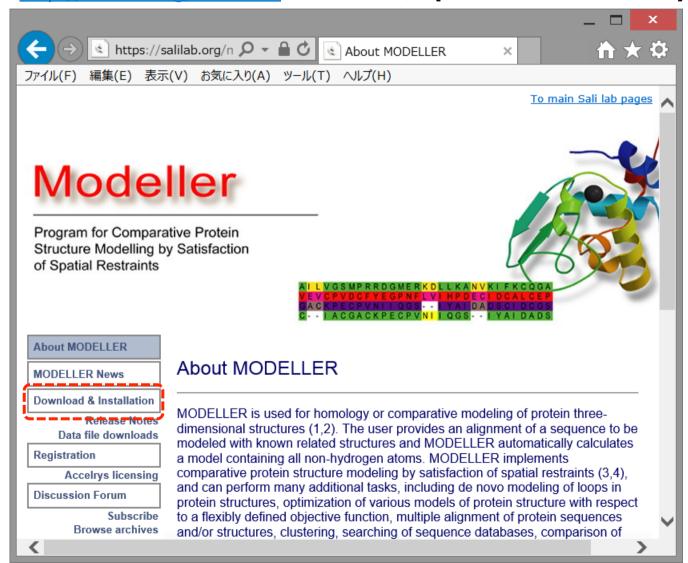
が、ライセンスキーです。

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。



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 <u>register for a license</u> in order to use the software. It is also <u>available through Accelrys</u> 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 quide

Mac (32-bit or 64-bit Intel) [GPG signature] Installation guide

<u>Linux (32-bit RPM)</u> <u>Installation quide</u>

Linux (64-bit x86 64 RPM) Installation guide

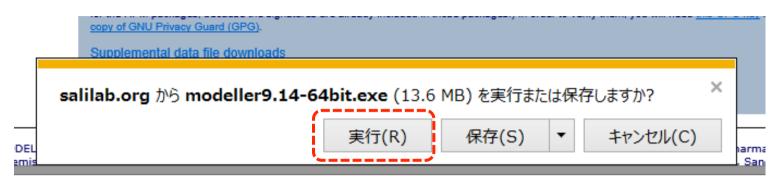
Linux (32-bit Debian/Ubuntu package) [GPG signature] Installation guide

Linux (64-bit x86 64 Debian/Ubuntu package) [GPG signature] Installation quide

Generic Unix tarball [GPG signature] Installation quide

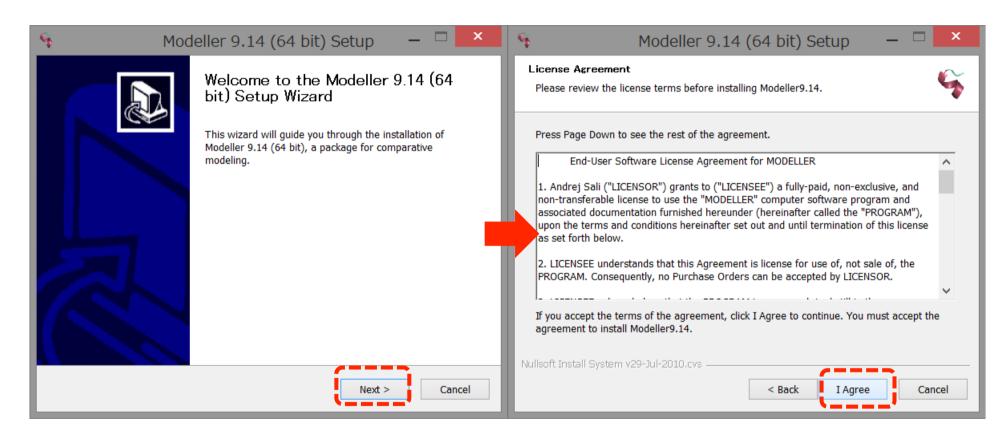
使用しているパソコンのOSの種類、および32-bit版・64-bit版の区別に従って、プログラムを選択し、ダウンロードします。ここでは、64ビットのWindows8を使用している場合を想定し、[Windows(64-bit)]を選択します。ただし、以下の手続きは、Windows7であっても32-bit版であってもほぼ同じです。

6.インストールの開始



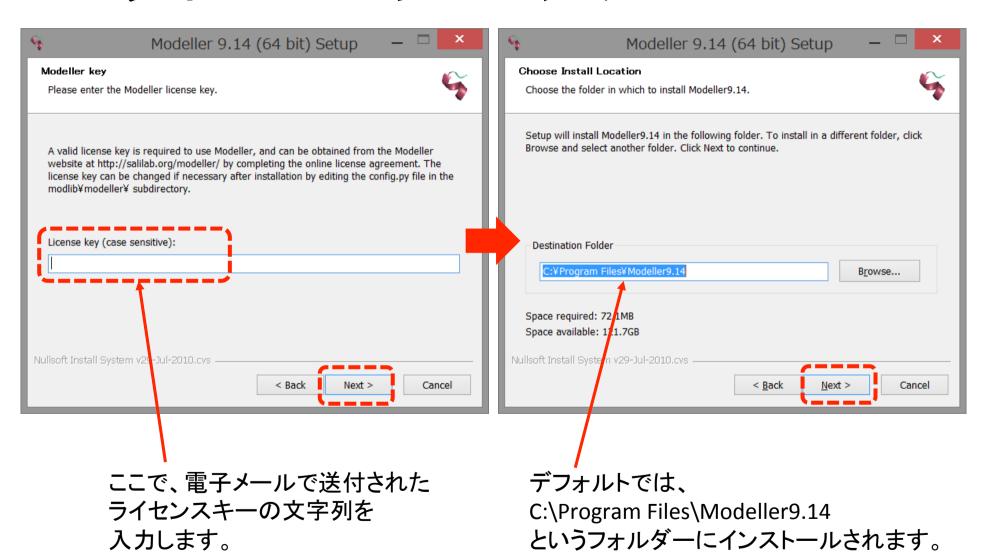
「実行または保存しますか?」というポップアップが表示されるので、[実行(R)]を クリックします。

7.ウィザードに従ってインストール



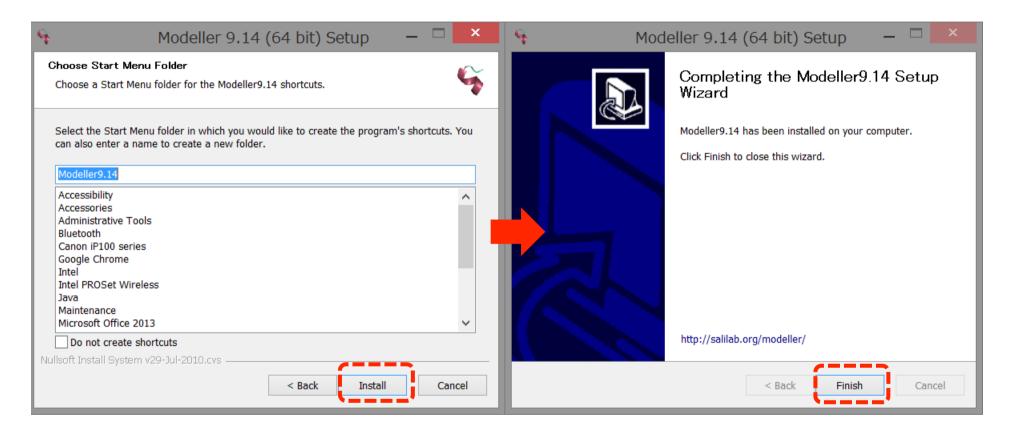
インストーラのウィザードが起動されるので、適当なボタンを選択していきます。

8.ライセンスキーの入力



不具合があるようなら、書き替えてください。

9.インストールの完了



スタートメニューに、ショートカット の名称を入力します。 デフォルトはModeller9.14です。 それで特に問題がなければ、 [Install]をクリックします。

これでインストールは完了です。

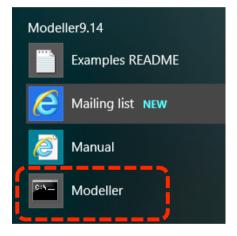
Modellerのコマンドラインでの使い方

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。

Windows 8の場合

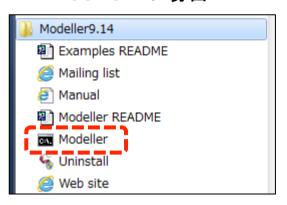


スタート画面の矢印をクリックすると、 インストールされたプログラムの一覧 が表示されます。



アルファベットのMの ところに、Modellerと いうコマンドラインの アイコンがあるので これをクリックします。

Windows 7の場合



スタートメニューから
[▶すべてのプログラム]
を選び、[Modeller 9.14]
を選択し、
コマンドプロンプトの
アイコンを選択します。

Modellerのコマンドラインでの使い方



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。