

Modellerのインストール手順 Windows 版

2015年2月5日(木)

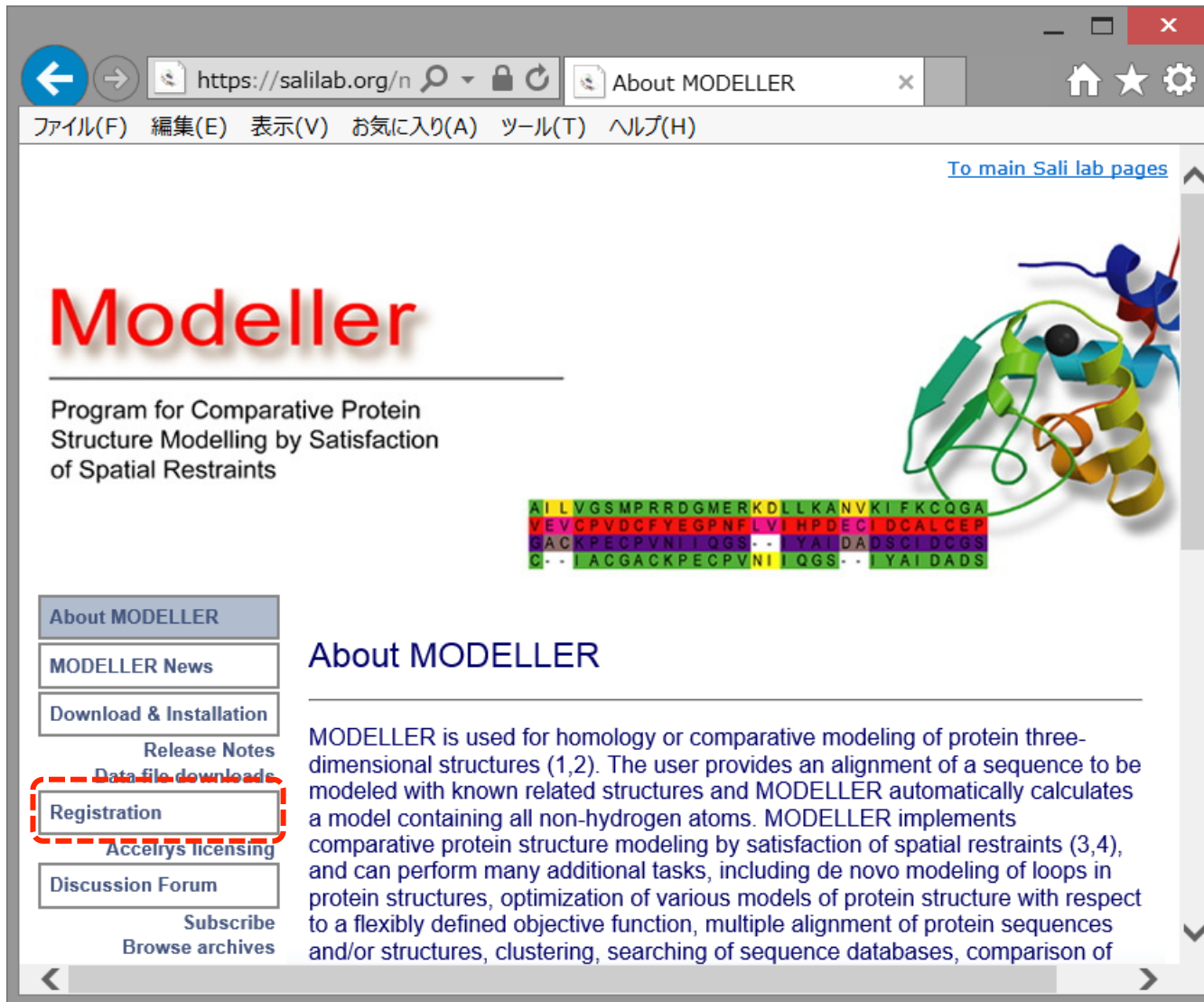
Modellerは、UCSFのAndrej Saliのグループが開発しているホモロジーモデリングのプログラムです。アカデミックの方なら、ユーザー登録を行えば、無料で使用することができます。Windows, Mac, Linuxでのプログラムをダウンロード・インストールすることが可能です。コマンドラインで使用するため、初心者にはやや使いにくいのですが、UCSF Chimeraという分子ビューアを使うと、GUIを通じてModellerを実行することができます。

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。



The screenshot shows a web browser window with the URL <https://salilab.org/modeller>. The page title is "About MODELLER". The main heading is "Modeller" in red, followed by the subtitle "Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints". To the right is a 3D ribbon diagram of a protein structure. Below it is a sequence alignment:

```
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 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
```

On the left side, there is a vertical menu with the following items: "About MODELLER", "MODELLER News", "Download & Installation", "Release Notes", "Data file downloads", "Registration" (highlighted with a red dashed box), "Accelrys licensing", and "Discussion Forum". Below the menu are links for "Subscribe" and "Browse archives". The main content area is titled "About MODELLER" and contains a paragraph describing the software's capabilities.

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

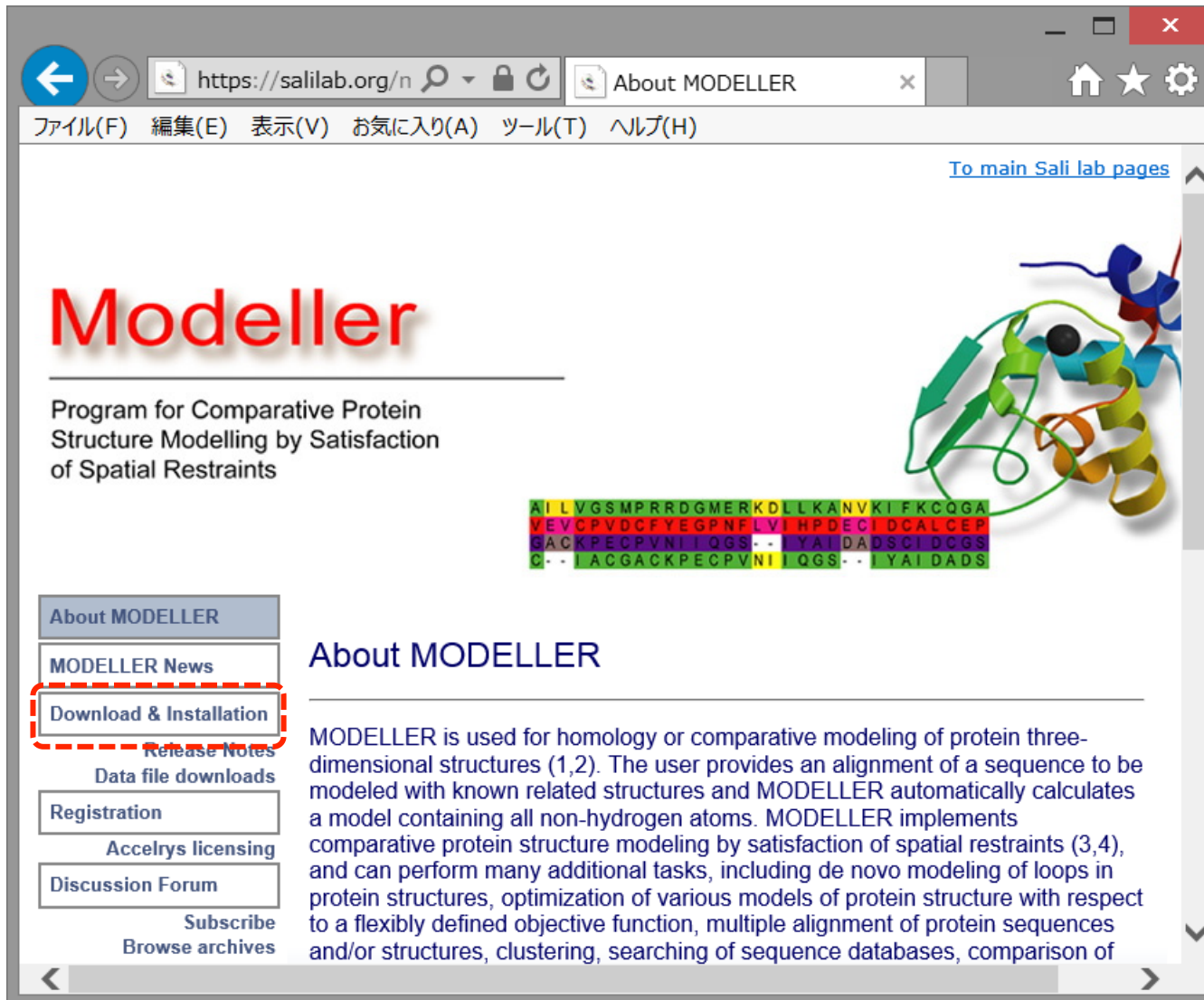
しばらくすると
以下のような内容の
メールが、入力した
アドレス先に送られて
きます。

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。



The screenshot shows a web browser window displaying the Modeller website. The browser's address bar shows the URL <https://salilab.org/n>. The page title is "About MODELLER". The main content area features the word "Modeller" in large red letters, followed by the text "Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints". To the right of this text is a 3D ribbon diagram of a protein structure. Below the diagram is a sequence alignment table:

A	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
S	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	-	-	A	C	G	A	C	K	P	E	C	P	V	N	I	Q	G	S	-	-	Y	A	I	D	A	D	S			

Below the alignment is a navigation menu with the following items: "About MODELLER", "MODELLER News", "Download & Installation" (highlighted with a red dashed box), "Release Notes", "Data file downloads", "Registration", "Accelrys licensing", and "Discussion Forum". At the bottom of the menu are "Subscribe" and "Browse archives". The main content area also has a section titled "About MODELLER" with a paragraph of text describing the program's capabilities.

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 \(64-bit x86_64 Debian/Ubuntu package\)](#)

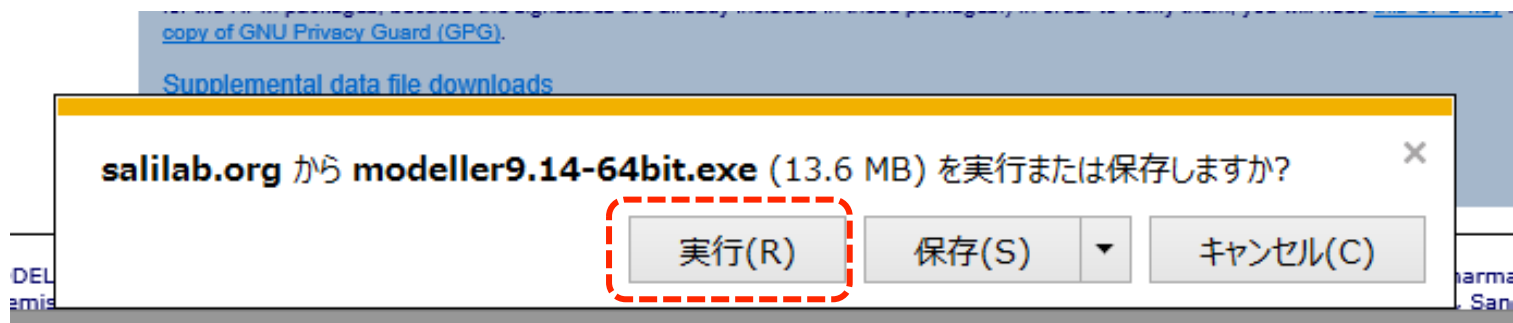
[\[GPG signature\]](#) [Installation guide](#)

[Generic Unix tarball](#)

[\[GPG signature\]](#) [Installation guide](#)

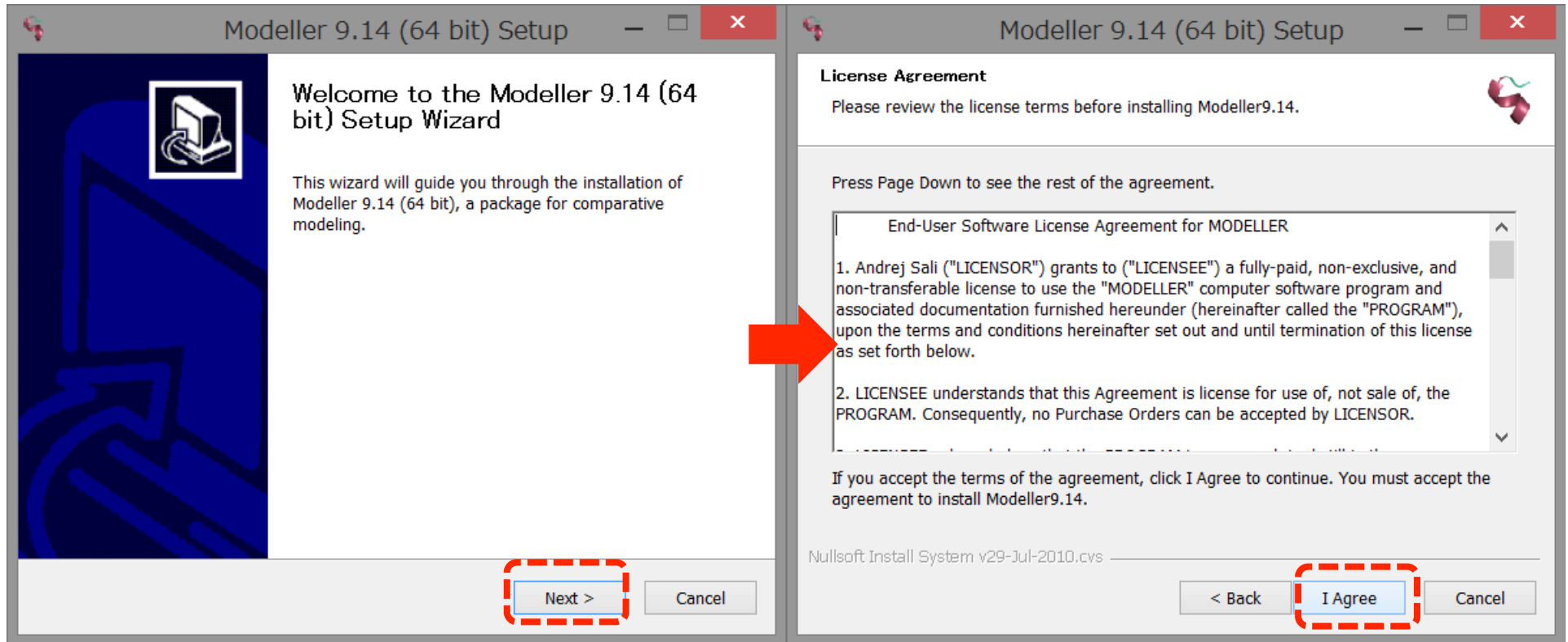
使用しているパソコンのOSの種類、および32-bit版・64-bit版の区別に従って、プログラムを選択し、ダウンロードします。ここでは、64ビットのWindows8を使用している場合を想定し、[Windows(64-bit)]を選択します。ただし、以下の手続きは、Windows7であっても32-bit版であってもほぼ同じです。

6. インストールの開始



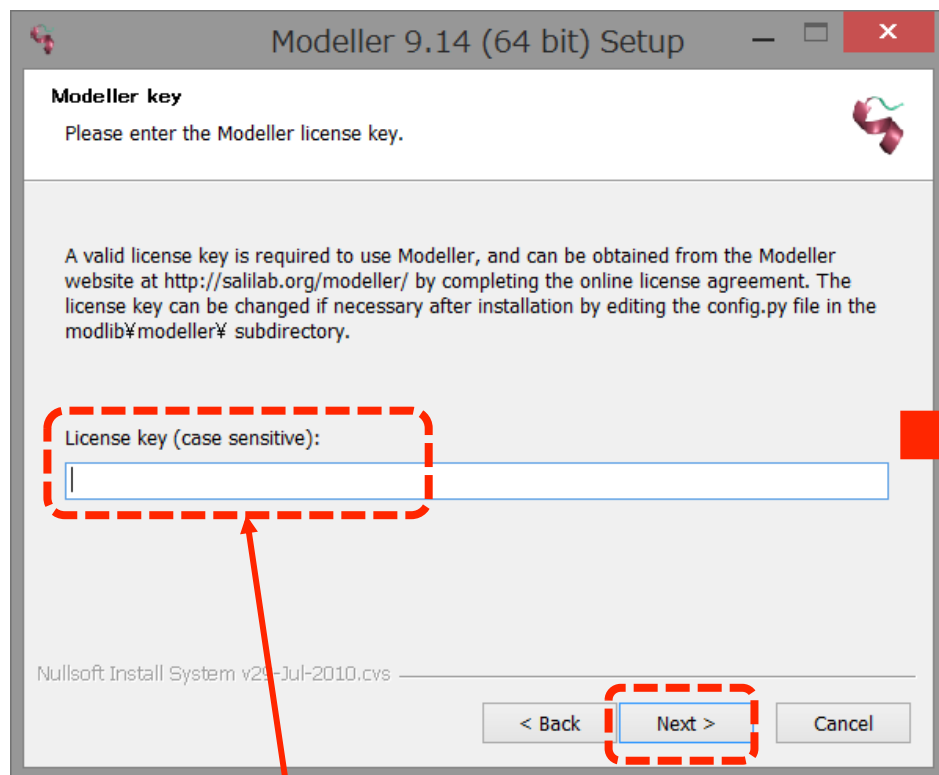
「実行または保存しますか?」というポップアップが表示されるので、[実行(R)]をクリックします。

7. ウィザードに従ってインストール

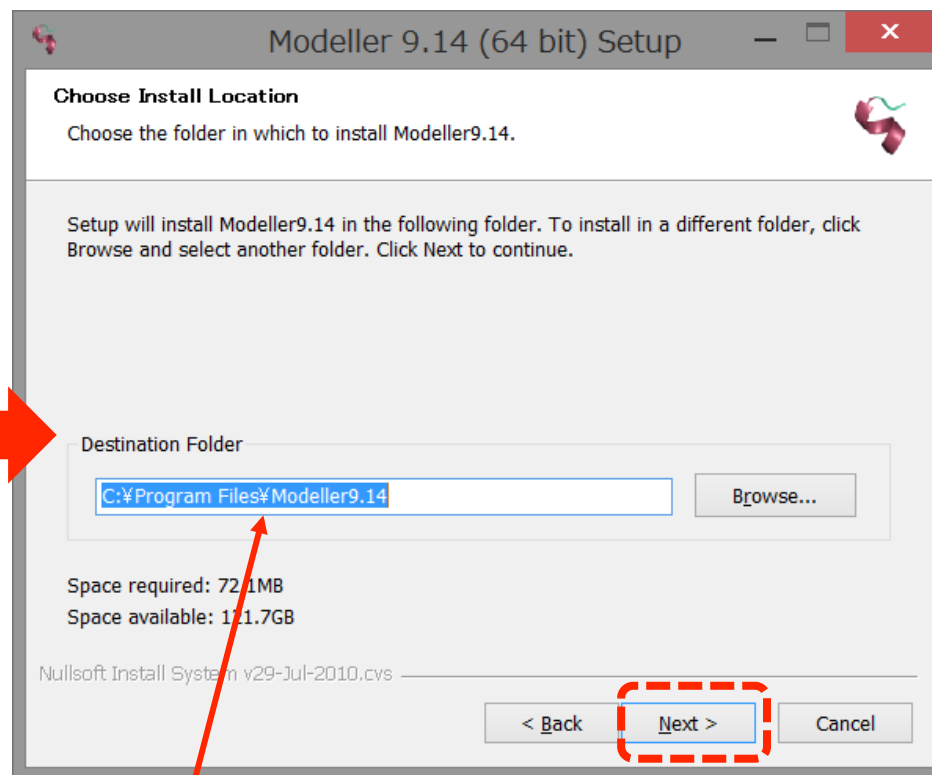


インストーラのウィザードが起動されるので、適切なボタンを選択していきます。

8. ライセンスキーの入力

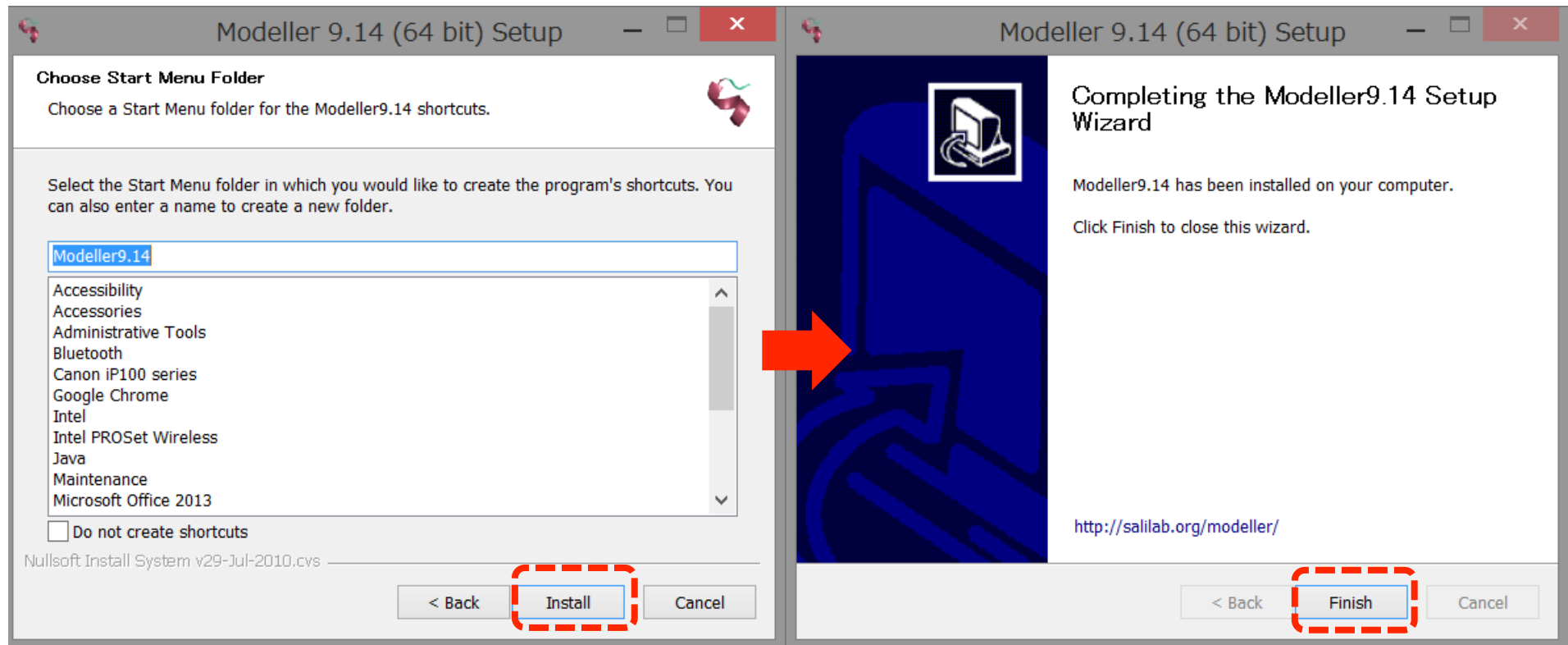


ここで、電子メールで送付されたライセンスキーの文字列を入力します。



デフォルトでは、
C:\Program Files\Modeller9.14
というフォルダーにインストールされます。
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



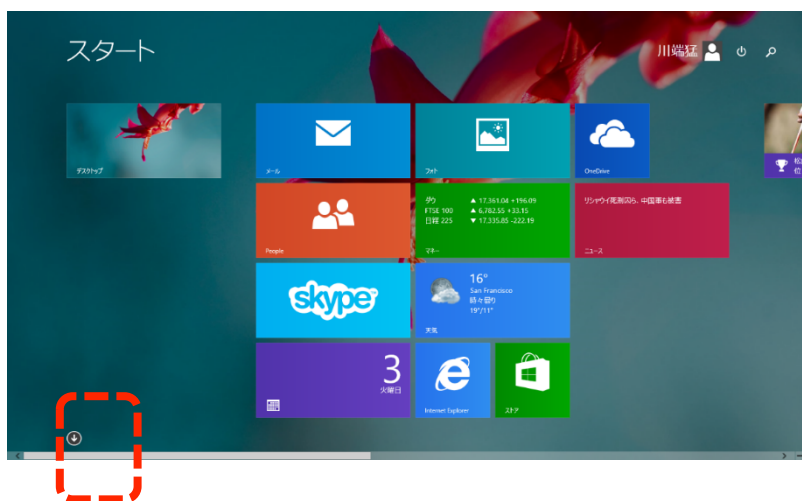
スタートメニューに、ショートカット
の名称を入力します。
デフォルトはModeller9.14です。
それで特に問題がなければ、
[Install]をクリックします。

これでインストールは完了です。

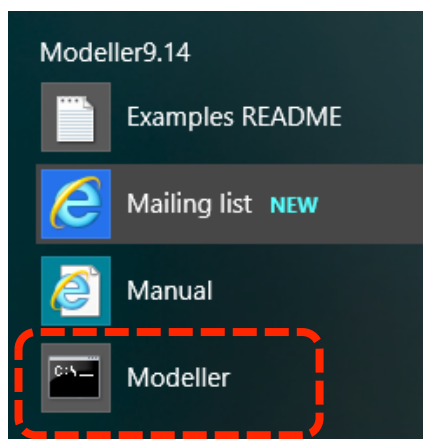
Modellerのコマンドラインでの使い方

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

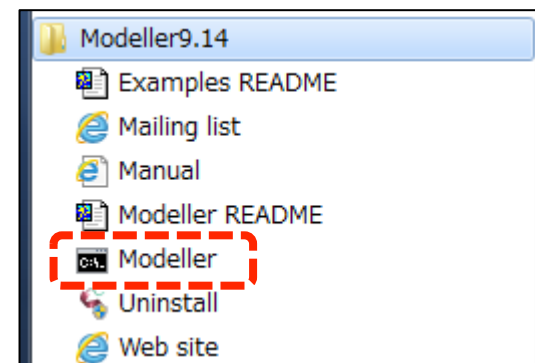


スタート画面の矢印をクリックすると、インストールされたプログラムの一覧が表示されます。



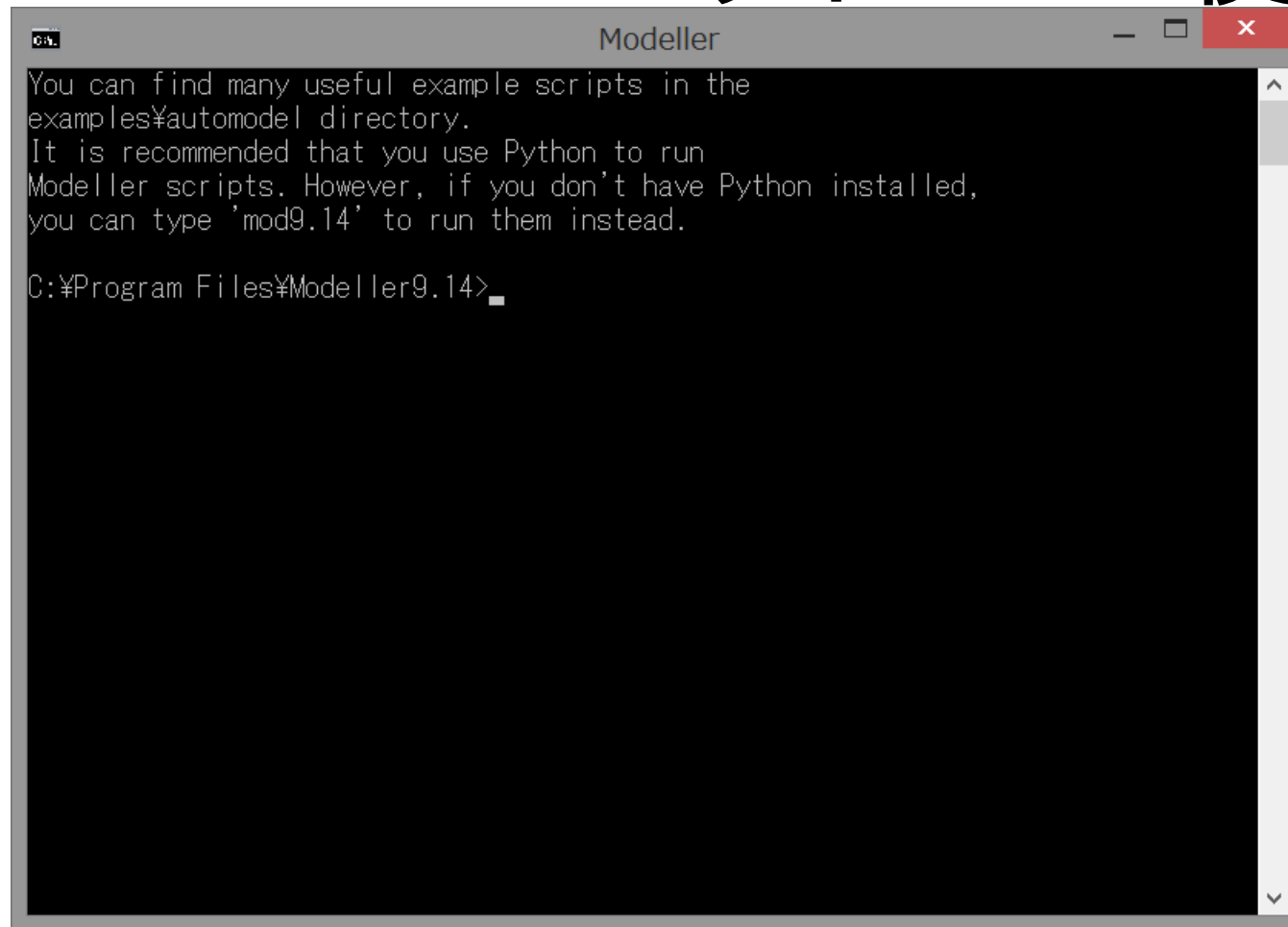
アルファベットのMのところ、Modellerというコマンドラインのアイコンがあるのでこれをクリックします。

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



```
Modeller
You can find many useful example scripts in the
examples¥automodel directory.
It is recommended that you use Python to run
Modeller scripts. However, if you don't have Python installed,
you can type 'mod9.14' to run them instead.

C:¥Program Files¥Modeller9.14>
```

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。