

Modellerのインストール手順 Mac 版

2016年1月14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。

Modeller
Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints

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. MODELLER is [available for download](#) for most Unix/Linux systems, Windows, and Mac.

Several graphical interfaces to MODELLER are [commercially available](#). There are also many other [resources and people using Modeller](#) in graphical or web interfaces or other frameworks.

1. B. Webb, A. Sali. Comparative Protein Structure Modeling Using Modeller. Current Protocols in Bioinformatics, John Wiley & Sons, Inc., 5.6.1-5.6.32, 2014.
2. M.A. Marti-Renom, A. Stuart, A. Fiser, R. Sánchez, F. Melo, A. Sali. Comparative protein structure modeling of genes and genomes. Annu. Rev. Biophys.

2. ユーザーの情報を入力する

The screenshot shows the registration page for Modeller. The 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)
- Guidelines for email addresses:
 1. Provide a **valid** email address. The Modeller license key will be sent to the address you provide. If you give an invalid email address, you will not receive the key. 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.

A red box highlights the license agreement 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.

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。

[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

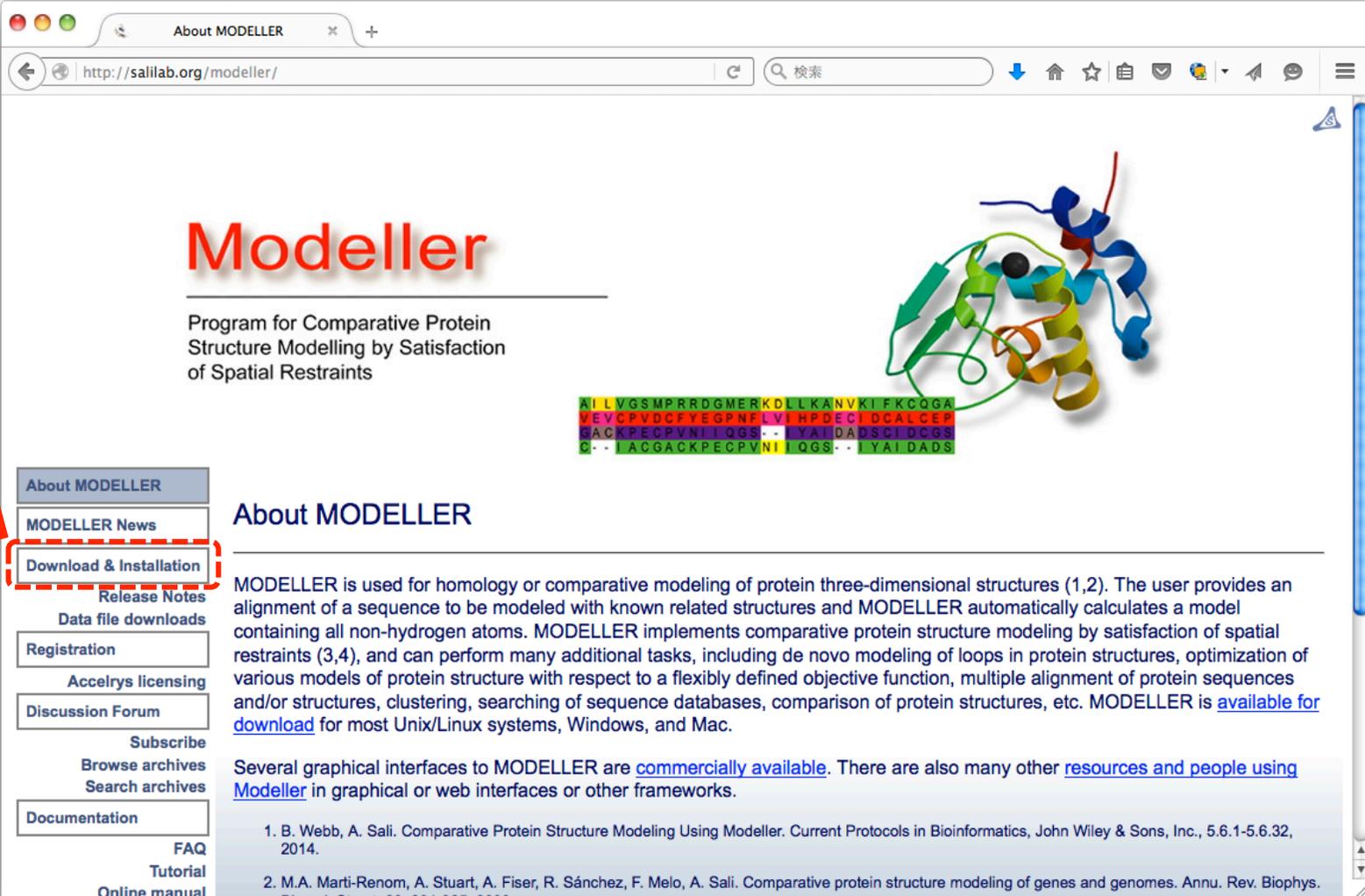
しばらくすると
以下のような内容の
メールが、入力した
アドレス先に送られて
きます。

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。



The screenshot shows the Modeller website interface. The main heading is "Modeller" in red, with 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 the diagram is a sequence alignment:

```
AI LVGSMRRDGMERKDLLKANVKIFKCOGA
VEVCPVDCFYEGPNFLVIHPDECDALCEP
GACKPECPVNI IQGS--YAI DADSCI DCGS
C--ACGACKPECPVNI IQGS--YAI DADS
```

In the left sidebar, the "Download & Installation" link is highlighted with a red dashed box and a red arrow pointing to it. Other links in the sidebar include "About MODELLER", "MODELLER News", "Release Notes", "Data file downloads", "Registration", "Accelrys licensing", "Discussion Forum", "Subscribe", "Browse archives", "Search archives", "Documentation", "FAQ", "Tutorial", and "Online manual".

The main content area is titled "About MODELLER" and contains the following text: "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. MODELLER is [available for download](#) for most Unix/Linux systems, Windows, and Mac.

Several graphical interfaces to MODELLER are [commercially available](#). There are also many other [resources and people using Modeller](#) in graphical or web interfaces or other frameworks.

1. B. Webb, A. Sali. Comparative Protein Structure Modeling Using Modeller. Current Protocols in Bioinformatics, John Wiley & Sons, Inc., 5.6.1-5.6.32, 2014.
2. M.A. Marti-Renom, A. Stuart, A. Fiser, R. Sánchez, F. Melo, A. Sali. Comparative protein structure modeling of genes and genomes. Annu. Rev. Biophys.

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 9.16, released Jan. 12th, 2016

To install MODELLER on this machine, we recommend the **Mac (32-bit or 64-bit Intel)** package.



The screenshot shows a list of download options for MODELLER 9.16. A red arrow points to the 'Mac (32-bit or 64-bit Intel)' option, which is highlighted with a red dashed box. Below this option, it says 'A Homebrew package is also available'. Other options include Anaconda Python, Windows (32-bit and 64-bit), Linux (32-bit RPM, 64-bit x86 64 RPM, 32-bit Debian/Ubuntu package, 64-bit x86 64 Debian/Ubuntu package), and Generic Unix tarball. Each option has links for GPG signature and installation guide.

Operating System	Links
Anaconda Python ("conda")	
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
A Homebrew package is also available	
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

GPG signatures are provided for the security conscious, so that you can verify that the files have not been tampered with. (No signatures are given for the RPM packages, because the signatures are already included in those packages.) In order to verify them, you will need [this GPG key](#) and [a copy of GNU Privacy Guard \(GPG\)](#).

[Supplemental data file downloads](#)

[Old \(and unsupported\) Modeller releases](#)

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

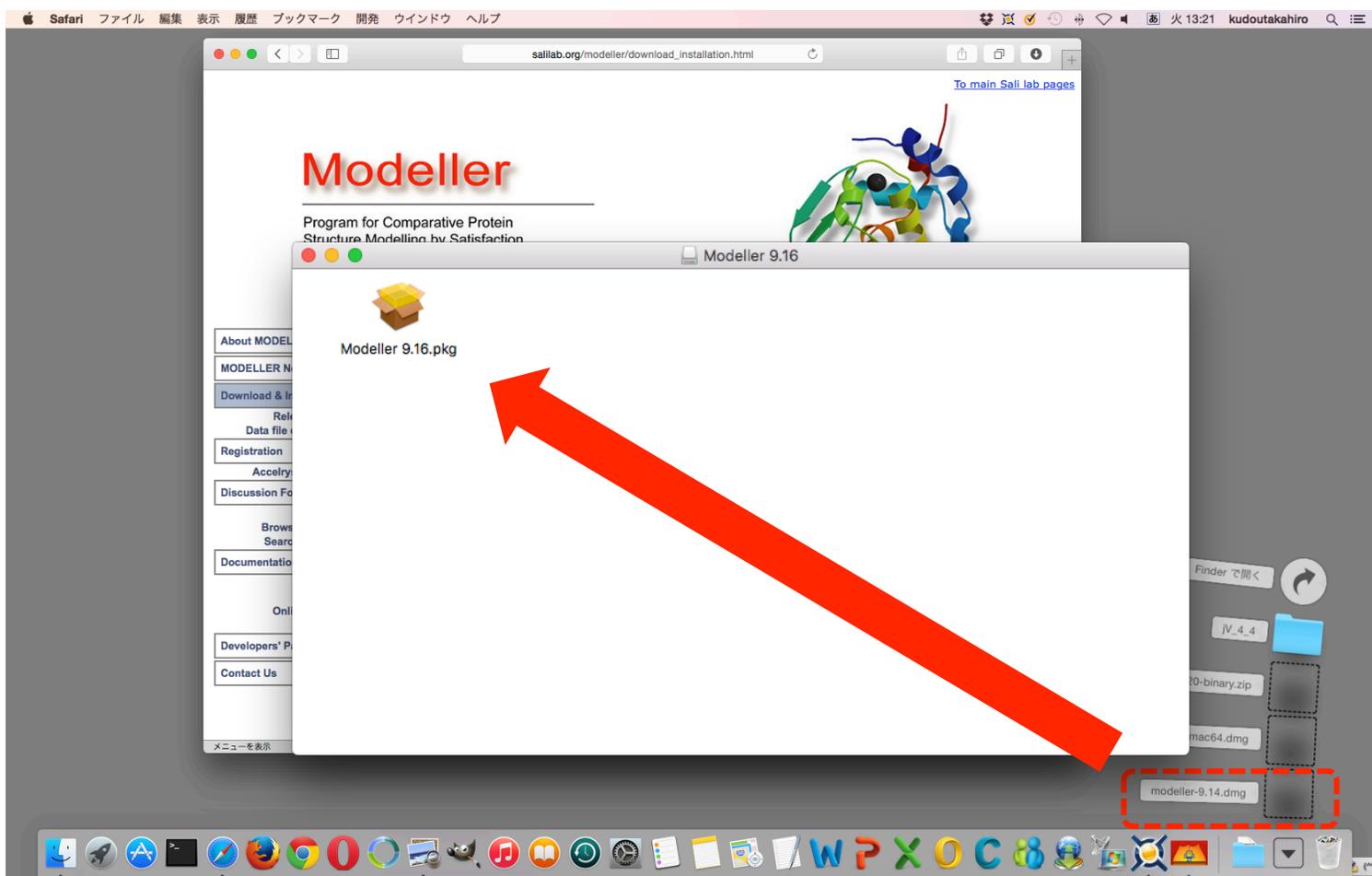


Safariの例→p8



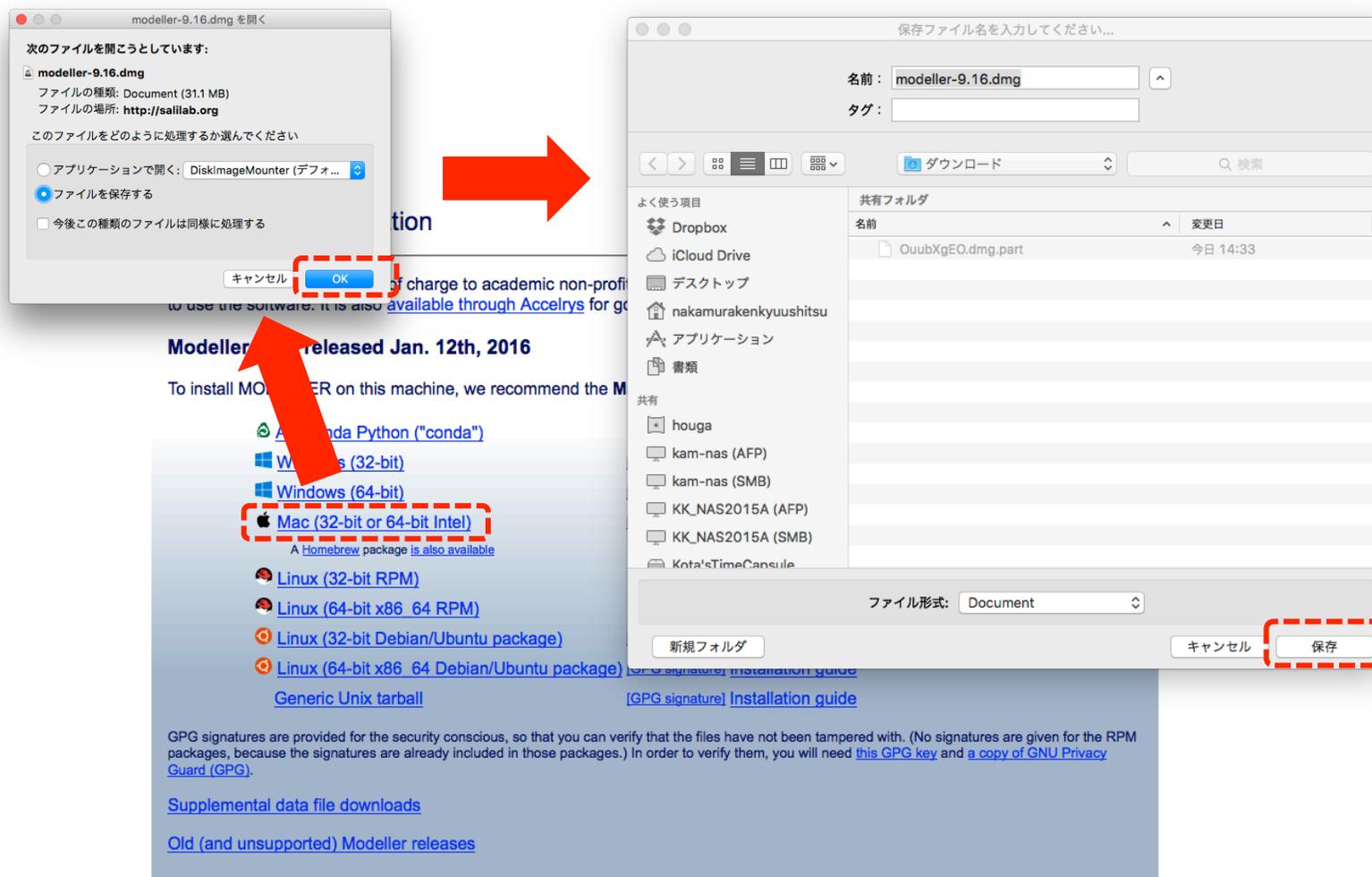
Firefoxの例→p9

6. インストールの開始 (Safari)



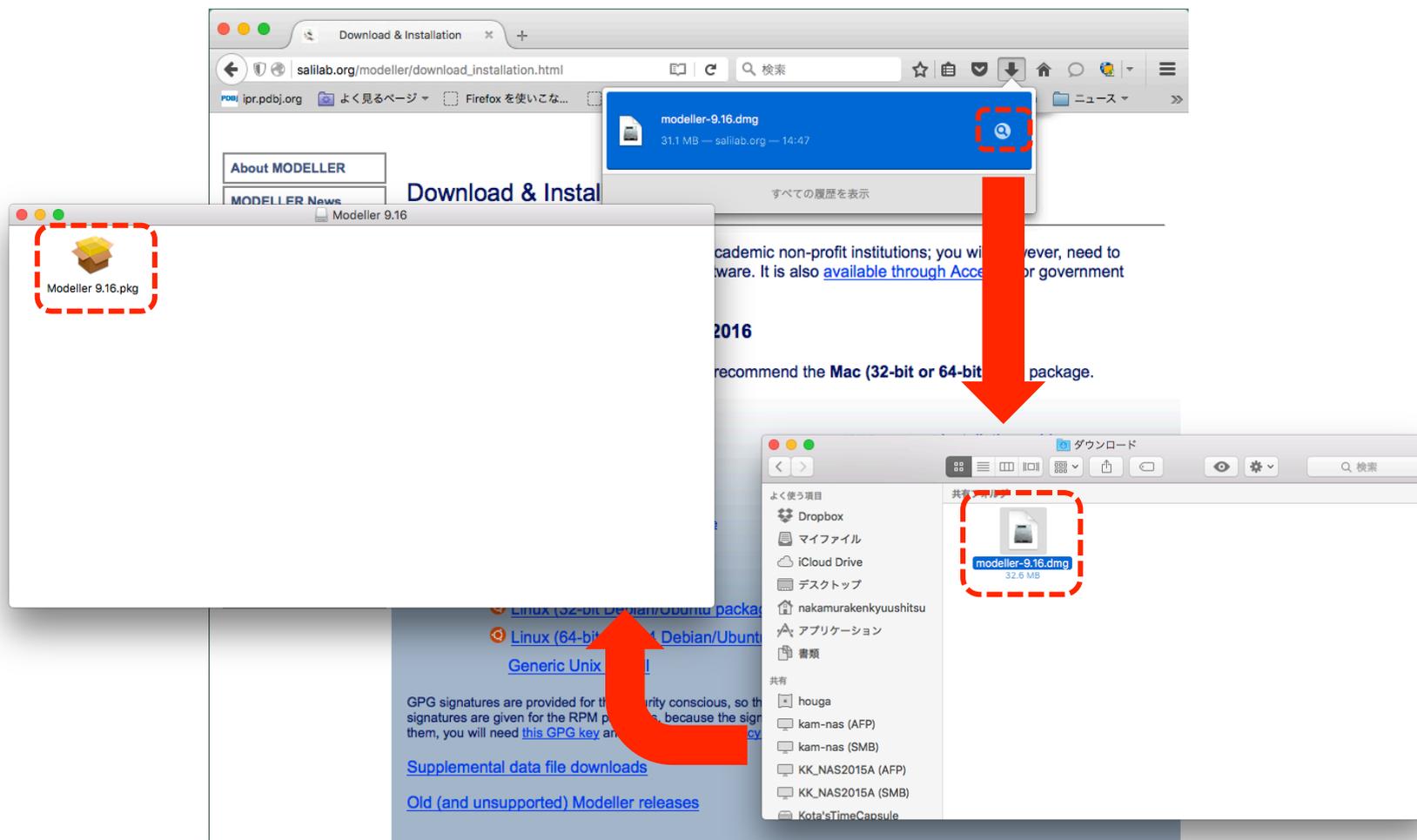
ダウンロードリストにある「modeller-9.16.dmg」(バージョン等によりファイル名は異なる)をクリックするとModellerインストーラがマウントされます。→p11へ

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。

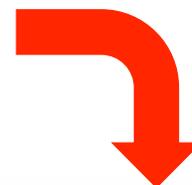
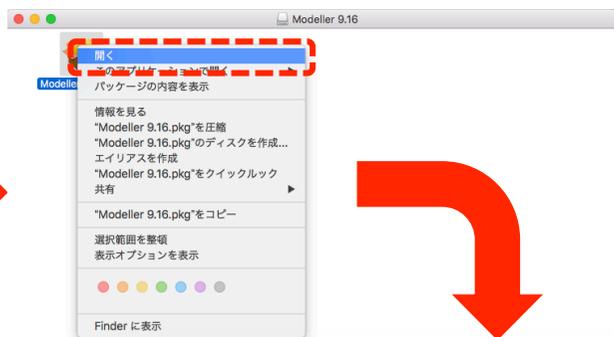
6. インストールの開始 (Firefox)



ダウンロードリストにある「modeller-9.16.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-9.16.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



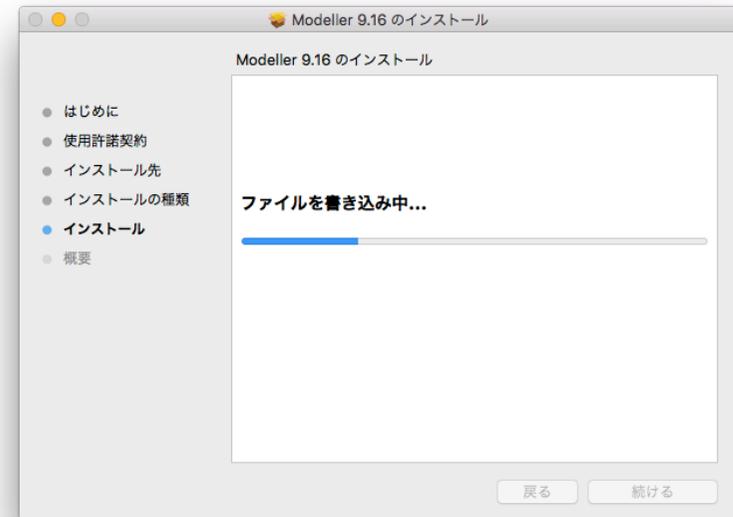
インストーラの指示に従いインストールを進めます。

7. ウィザードに従ってインストール



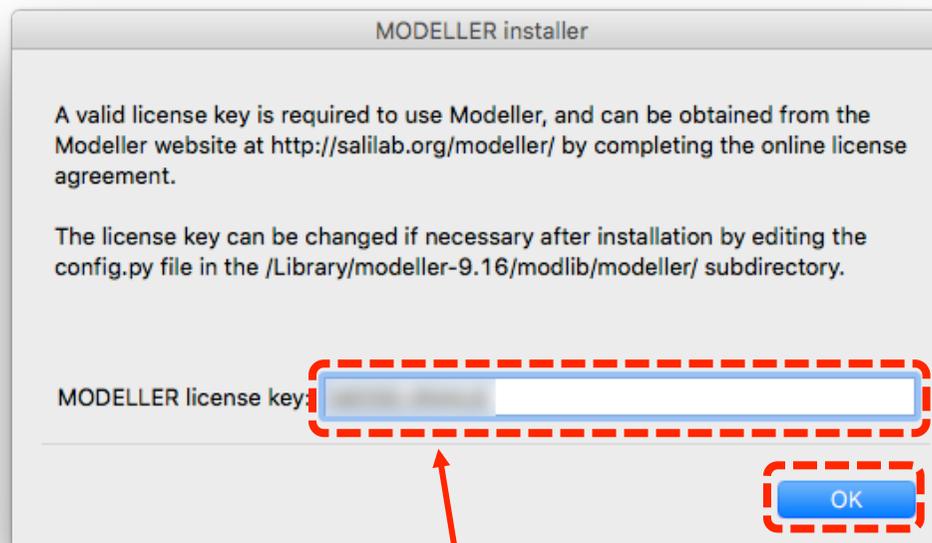
インストーラの指示に従いインストールを進めます。

7. ウィザードに従ってインストール



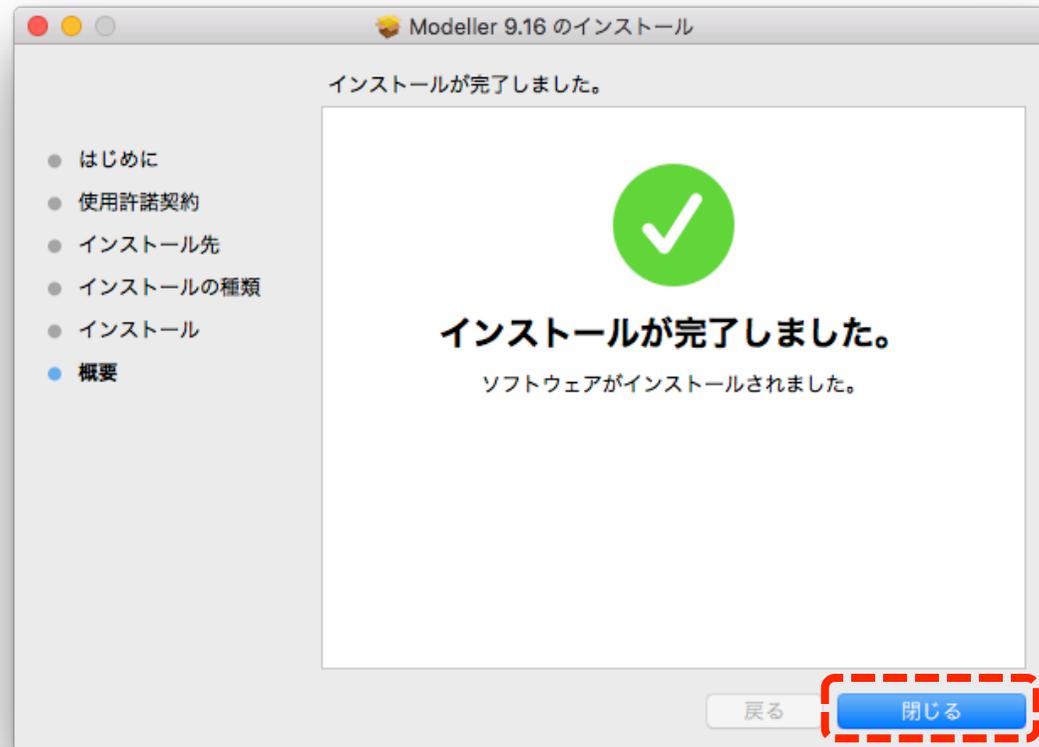
インストールには管理者権限が必要です。管理者権限のあるユーザ名・パスワードを入力して下さい。

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。

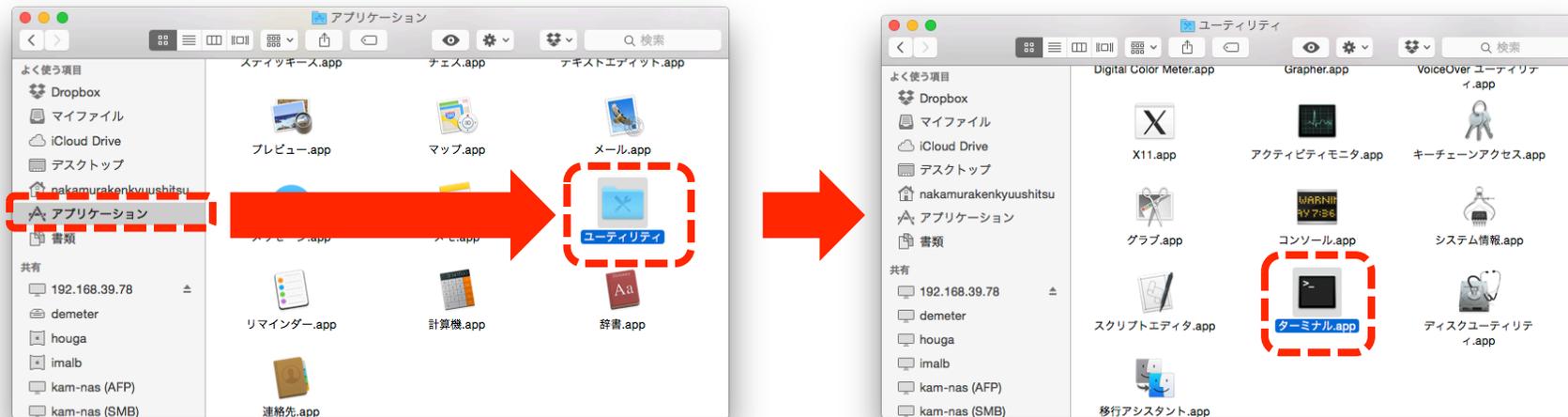
9. インストールの完了



これでインストールは完了です。

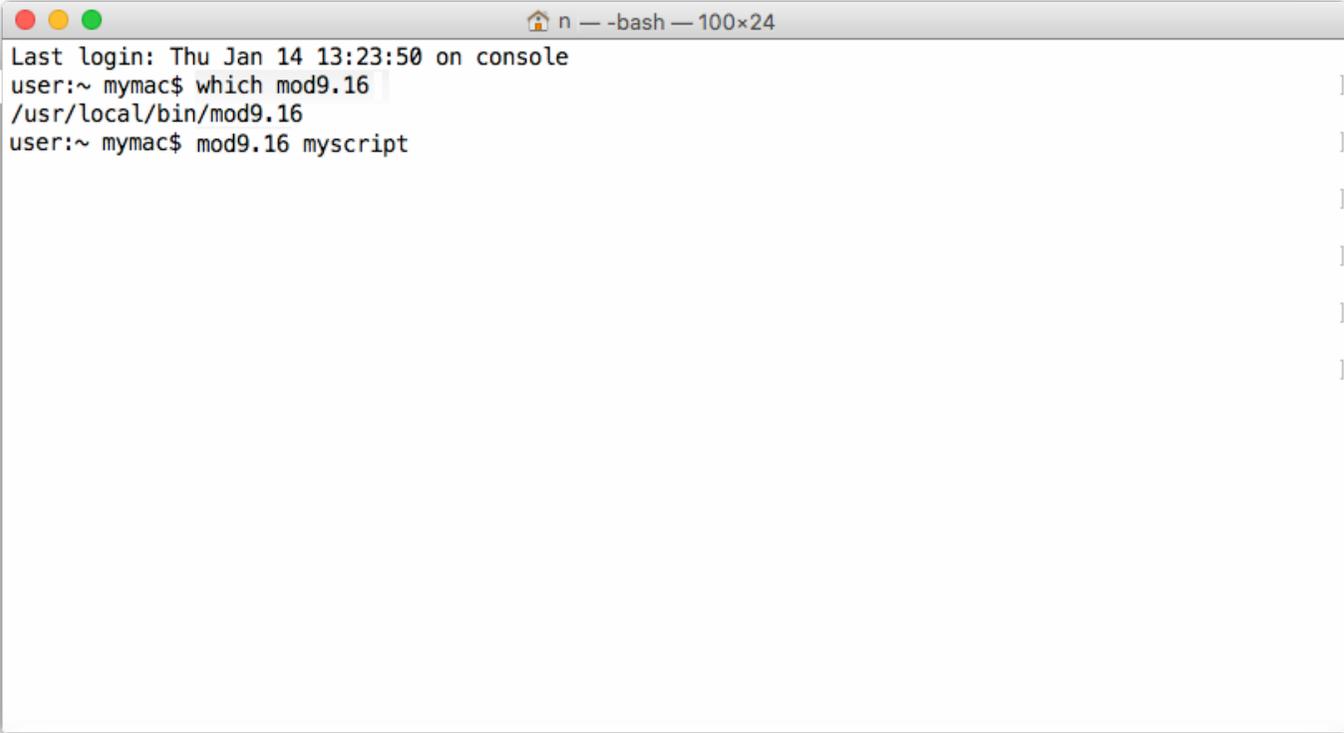
Modellerのコマンドラインでの使い方

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



```
user@n ~ -bash - 100x24
Last login: Thu Jan 14 13:23:50 on console
user:~ mymac$ which mod9.16
/usr/local/bin/mod9.16
user:~ mymac$ mod9.16 myscript
```

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、
mod9.16 [スクリプトファイル名]
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。