Modellerのインストール手順 Windows 版

２０１６年１月１５日（金）

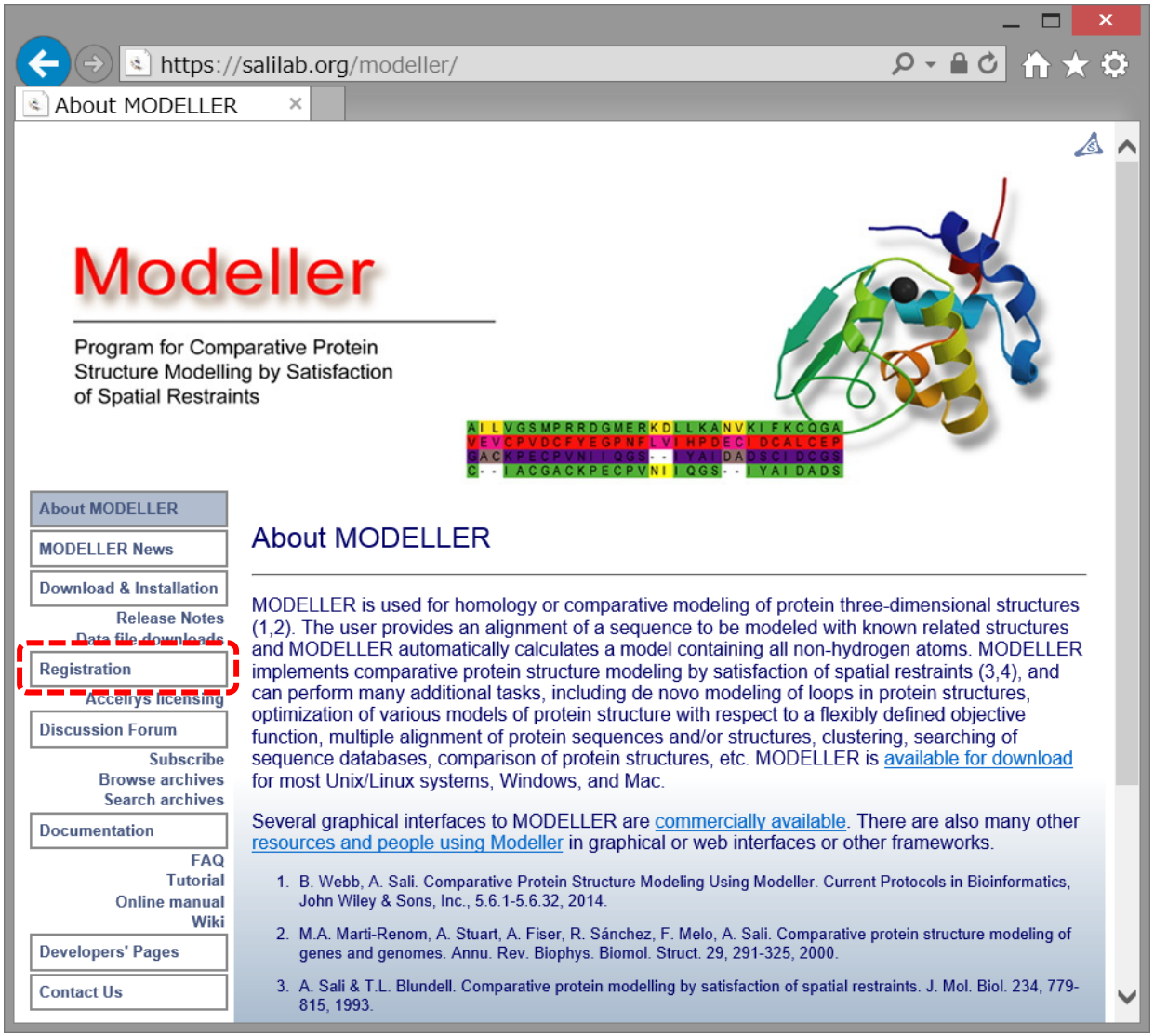
Modellerは、UCSFのAndrej Saliのグループが開発しているホモロジーモデリングのプログラムです。アカデミックの方なら、ユーザー登録を行えば、無料で使用することができます。Windows, Mac, Linuxでのプログラムをダウンロード・インストールすることが可能です。コマンドラインで使用するため、初心者にはやや使いにくいのですが、UCSF Chimeraという分子ビューアを使うと、GUIを通じてModellerを実行することができます。

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します。本格的に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://salilab.org/modeller/registration.html

Registration

About MODELLER
MODELLER News
Download & Installation
Release Notes
Data file downloads
Registration
Accelrys licensing
Discussion Forum
Subscribe
Browse archives
Search archives
Documentation
FAQ
Tutorial
Online manual
Wiki
Developers' Pages
Contact Us

Registration

To obtain the MODELLER license key (which you need to install and run MODELLER) please fill out the following License Agreement.

End-User Software License Agreement for MODELLER

1. Andrej Sali ("LICENSOR") grants to ("LICENSEE") a fully-paid, non-exclusive, and non-transferable license to use the "MODELLER" computer software program and associated documentation furnished hereunder (hereinafter called the "PROGRAM"), upon the terms and conditions hereinafter set out and until termination of this license as set forth below.
2. LICENSEE understands that this Agreement is license for use of, not sale of, the PROGRAM. Consequently, no Purchase Orders can be accepted by LICENSOR.
3. LICENSEE acknowledges that the PROGRAM is a research tool still in the development stage, that is being supplied "as is", without any accompanying services or improvements from LICENSOR and that this license is entered into in order to enable others to utilize the PROGRAM in their scholarly activities.
4. LICENSOR MAKES NO REPRESENTATIONS OR WARRANTIES, EXPRESS OR IMPLIED. By way of example, but not limitation, LICENSOR MAKES NO REPRESENTATIONS OR WARRANTIES OF MERCHANTABILITY OR FITNESS FOR ANY PARTICULAR PURPOSE OR THAT THE USE OF THE PROGRAM WILL NOT INFRINGE ANY PATENTS, COPYRIGHTS, TRADEMARKS OR OTHER RIGHTS. LICENSOR shall have no liability nor be liable for an direct, indirect or consequential damages with respect to any claim by LICENSEE or any third party on account of or arising from this Agreement or use of the PROGRAM.
5. LICENSEE agrees that it will use the PROGRAM, and any modifications, improvements, or

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。

https://salilab.org/modeller/registration.html

Registration

Name: Takeshi Kawabata
Title: (e.g. Dr., Mr., Mrs.) Dr.
Institution: (no abbreviations, please) Institute for Protein Research, Osaka University
Street Address: Yamadaoka 3-2, Suita, Osaka, Japan
Email: kawabata@protein.osaka-u.ac.jp
Confirm email: kawabata@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 incorrect address, you will not receive the key.
2. Provide only **one** address. The license key will not be sent to multiple addresses.
3. Give your official academic email address rather than a home email address. The server tries to use your email address to determine your academic status. (It is **not** just a simple check for a '.edu' extension, but it cannot 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 (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 [redacted].

This license key will work for any release of MODELLER 8 or 9 (e.g. 9.16, 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
http://salilab.org/modeller/contact.html

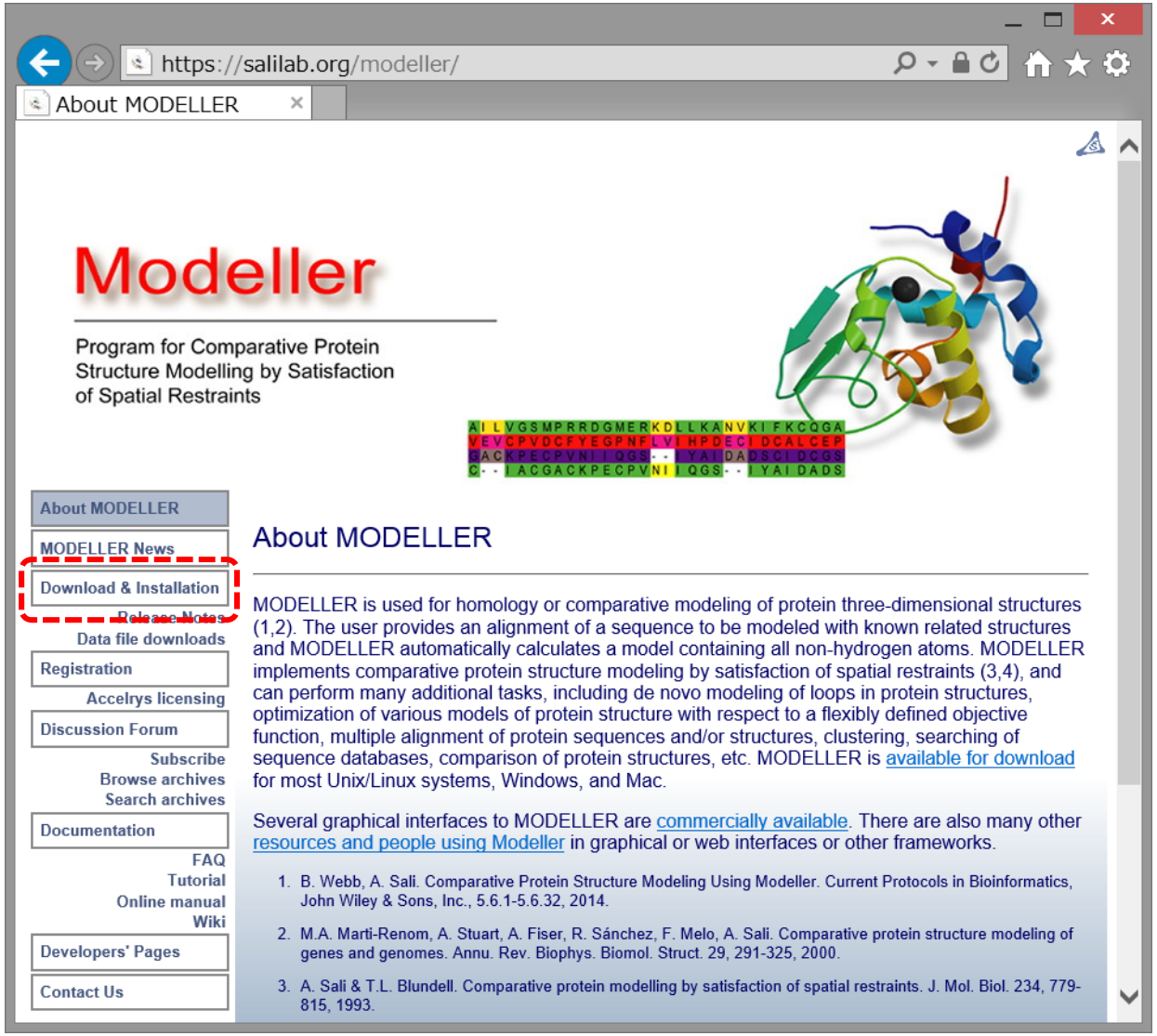
しばらくすると
以下のような内容の
メールが、入力した
アドレス先に送られて
きます。

が、ライセンスキーです。

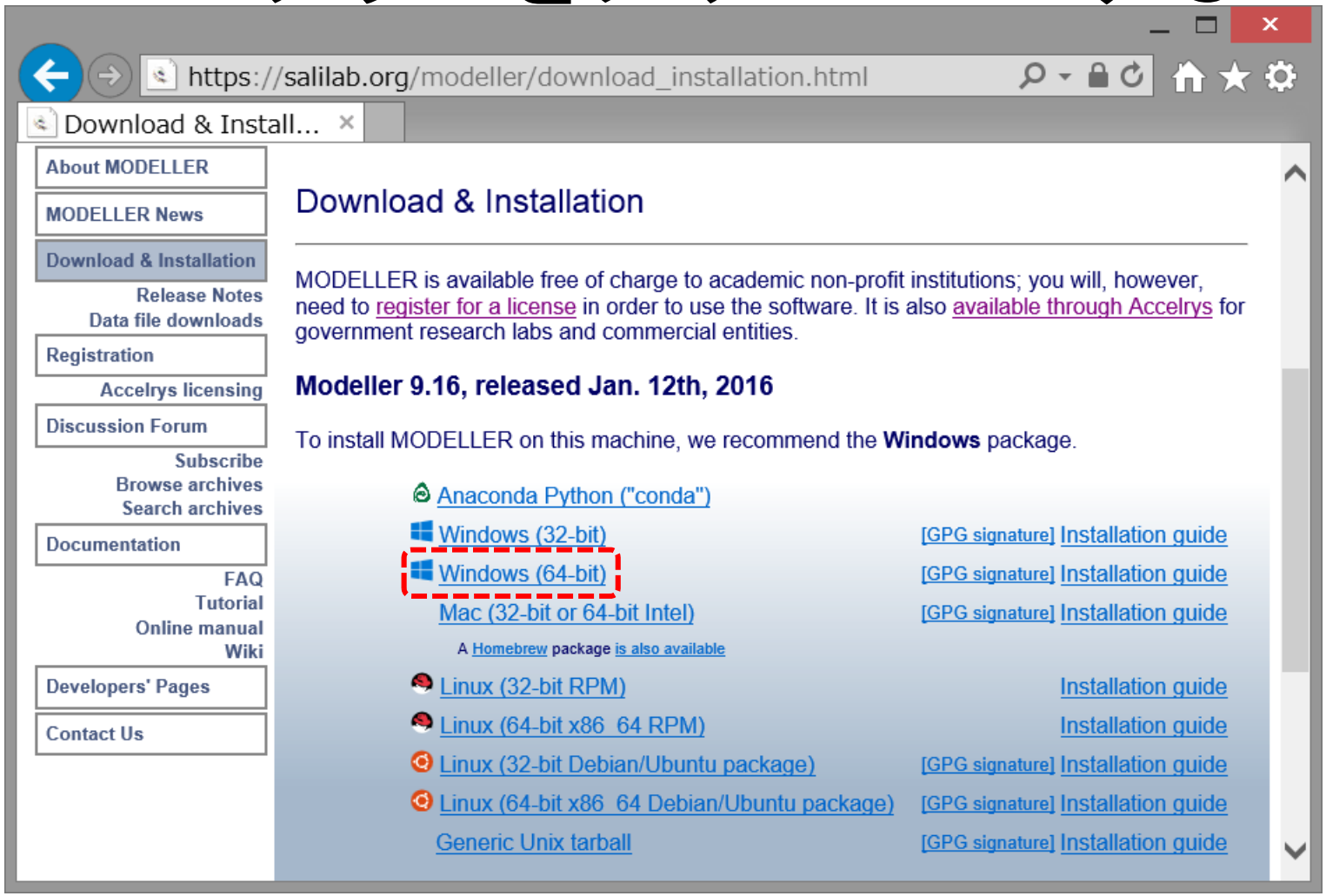
これが、MODELLERの
インストールに
必要となります。

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

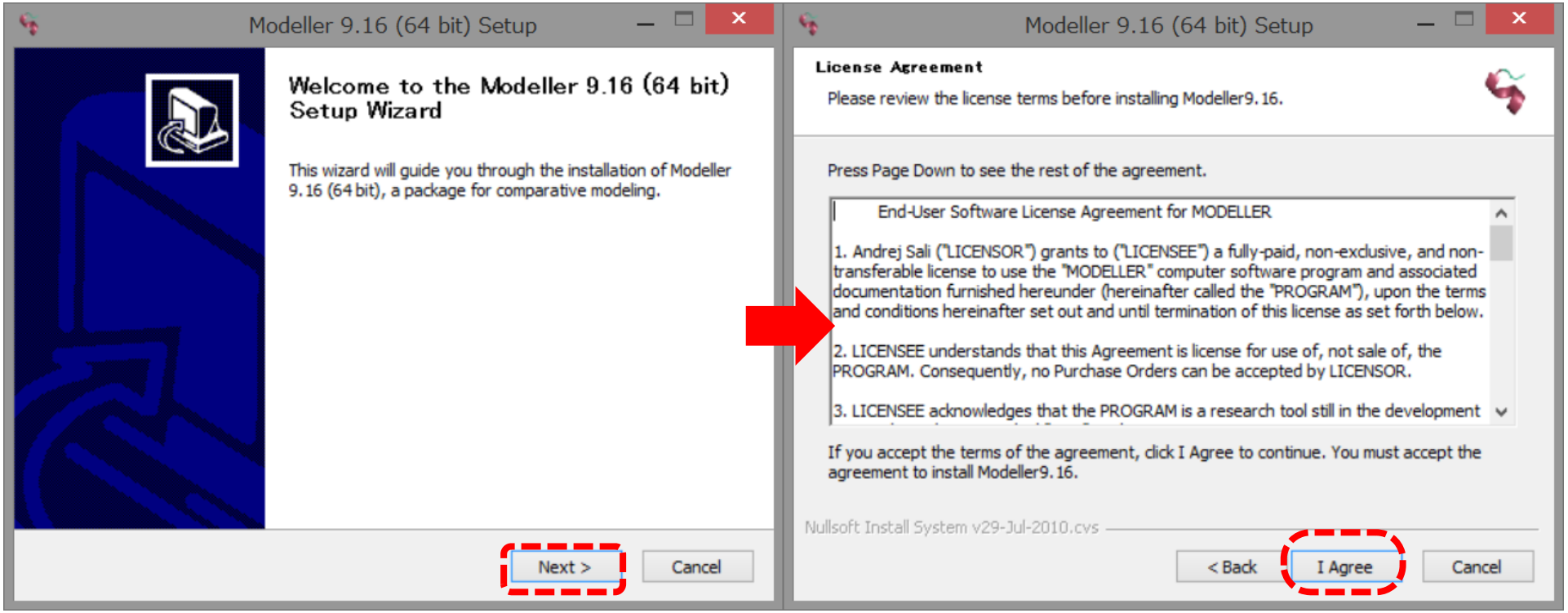


使用しているパソコンのOSの種類、および32-bit版・64-bit版の区別に従って、プログラムを選択し、ダウンロードします。ここでは、64ビットのWindows8を使用している場合を想定し、[Windows(64-bit)]を選択します。ただし、以下の手続きは、Windows7であっても32-bit版であってもほぼ同じです。

6.インストールの開始

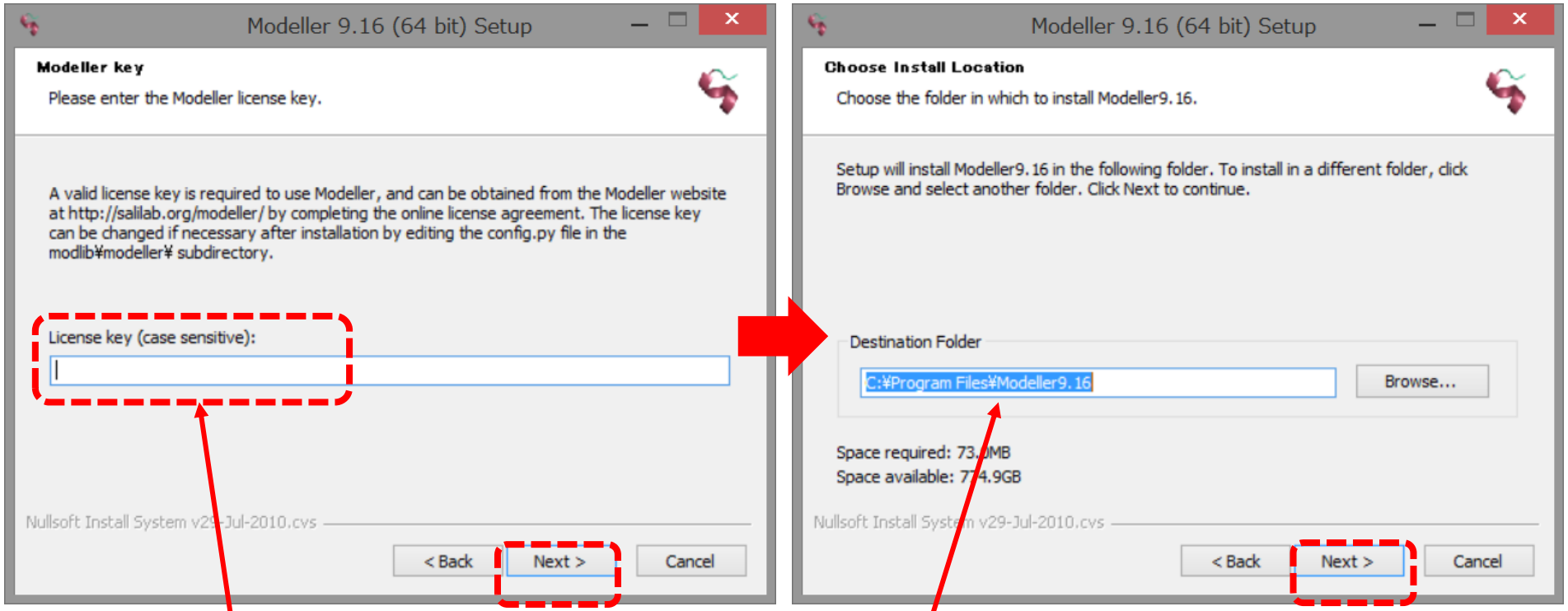
「実行または保存しますか？」というポップアップが表示されるので、[実行(R)]をクリックします。

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、[Next>]をクリックし、
License Agreementに同意できるなら[I Agree]をクリックします。

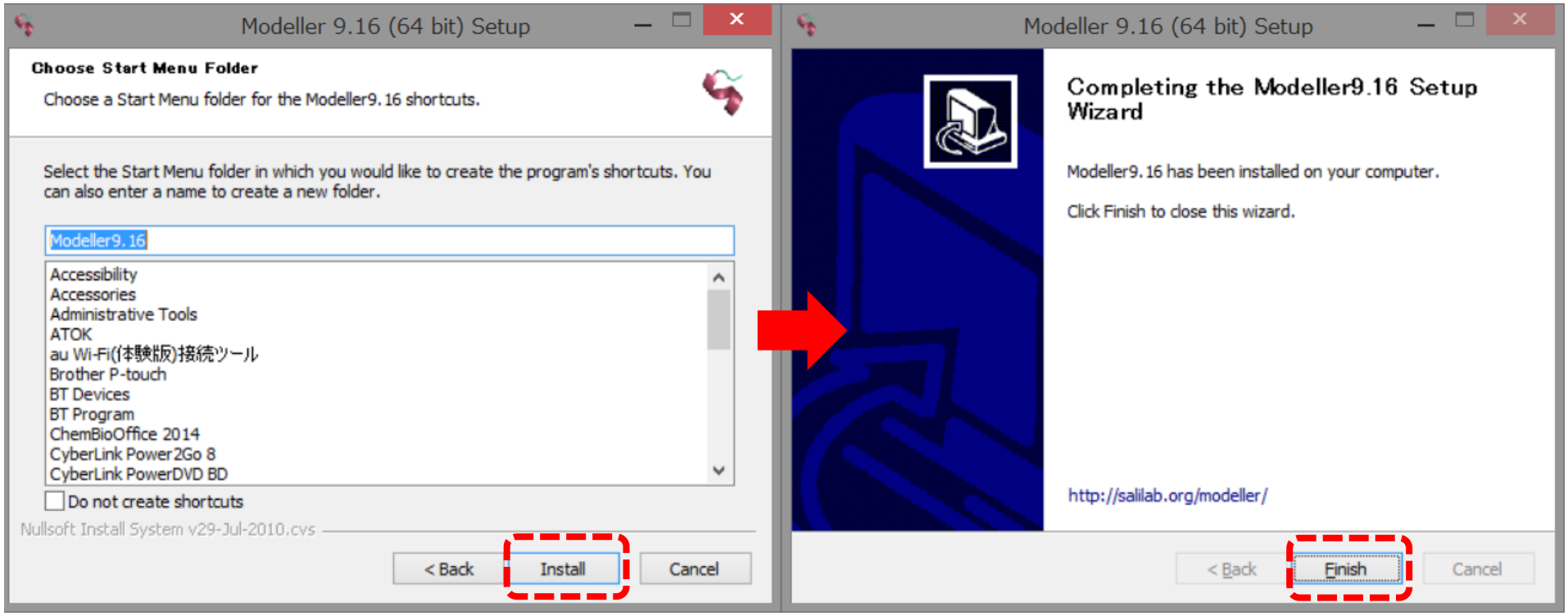
8.ライセンスキーの入力



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¥Modeller9.16
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



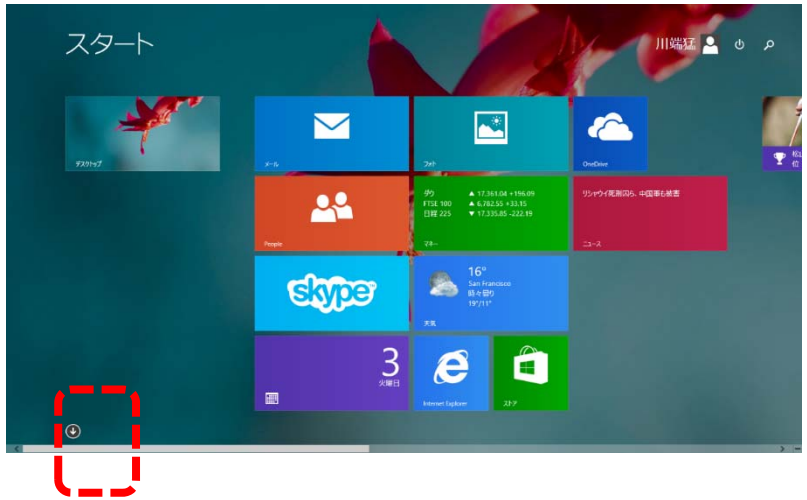
スタートメニューに、ショートカットの名称を入力します。
デフォルトはModeller9.16です。
それで特に問題がなければ、
[Install]をクリックします。

これでインストールは完了です。

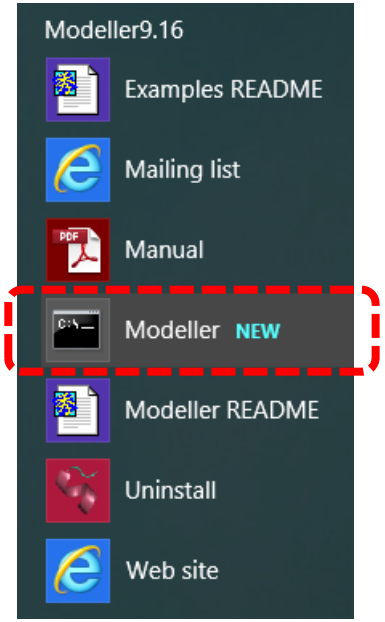
Modellerのコマンドラインでの使い方

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

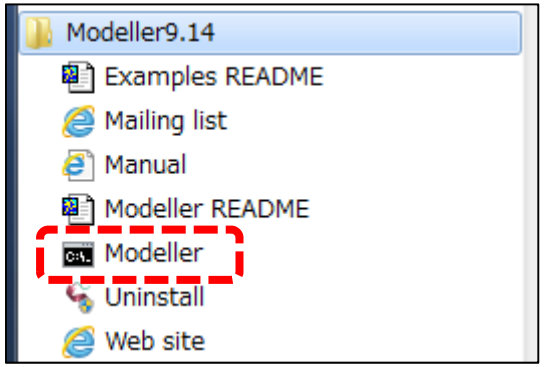


スタート画面の矢印をクリックすると、インストールされたプログラムの一覧が表示されます。



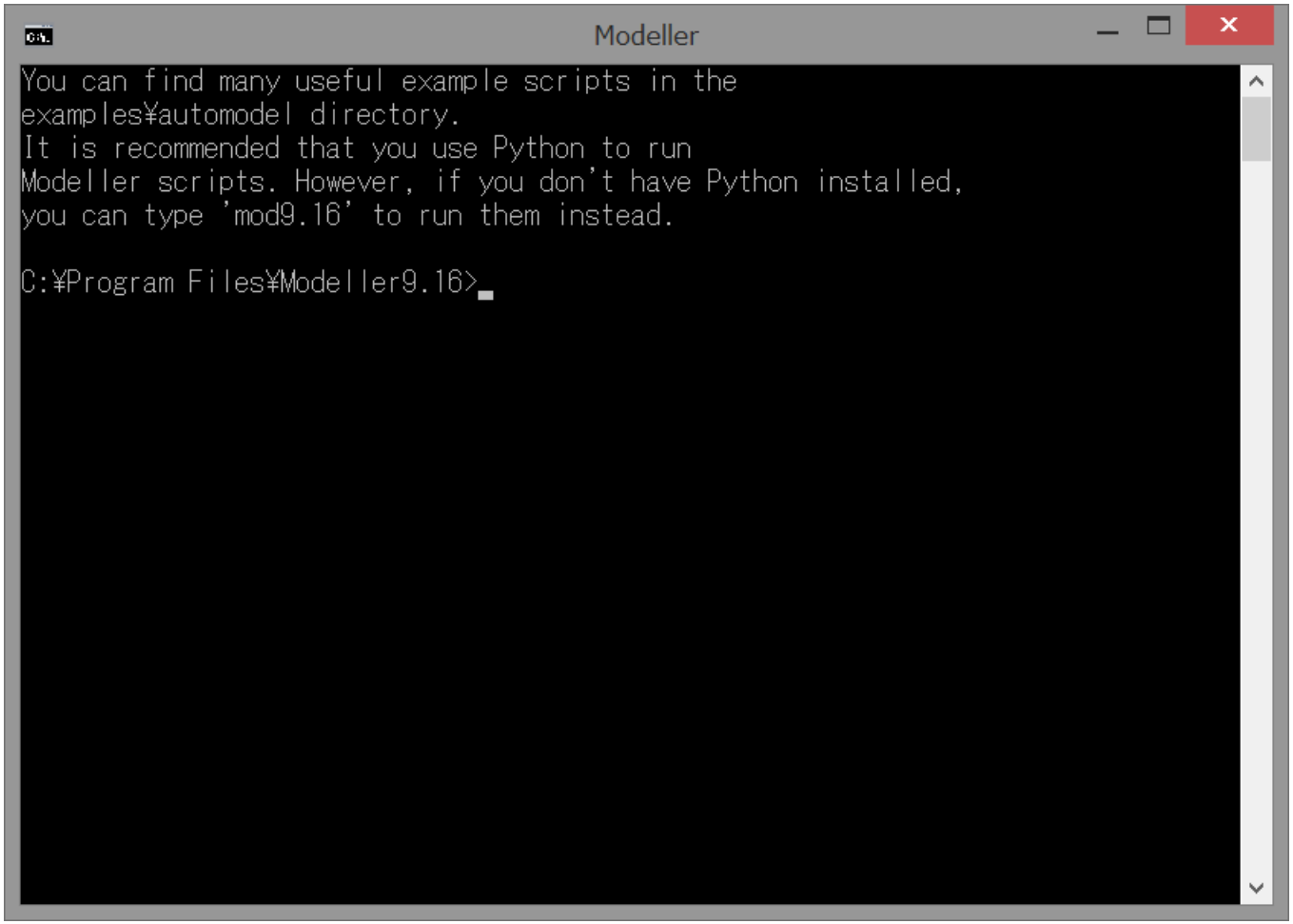
アルファベットのMのところに、Modellerというコマンドラインのアイコンがあるのでこれをクリックします。

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 9.16]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、
mod9.16 [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。