### 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

### 1.ユーザー登録(Registration)

<u>http://salilab.org/modeller</u>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 $\mathcal{P} \star = \mathbf{C}$ 🏠 🛧				_ 🗖 🗙
Registration	N LAUGAUKKEUKYINI UUSI LALUAUSI	← → 🔄 https:/	//salilab.org/modeller	r/registration.html	
About MODELLER		Registration ×			
MODELLER News	Registration				
Download & Installation Release Notes Data file downloads	To obtain the MODELLER license key (which you need to install and run MODELLER) please fill out the following License Agreement.		Na T (eg Dr Mr M	me: Takeshi Kawabata "itle: Dr. Dr.	
Registration	End-User Software License Agreement for MODELLER		Institut	tion: Institute for Protein Research, Oceke University	
Accelrys licensing	1. <u>Andrej Sali</u> ("LICENSOR") grants to ("LICENSEE") a fully-paid, non-exclusive, and non-		(no abbreviations, plea	ase)	
Subscribe Browse archives Search archives	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.		Street Addre	Yamadaoka 3-2, Suita, Osaka, Japan	^
Documentation	<ol><li>LICENSEE understands that this Agreement is license for use of, not sale of, the PROGRAM. Consequently, no Purchase Orders can be accepted by LICENSOR.</li></ol>				~
FAQ Tutorial	3. LICENSEE acknowledges that the PROGRAM is a research tool still in the development		En	nail: kawabata@protein.osaka-u.ac.jp	
Online manual Wiki	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		Confirm en	nail: kawabata@protein.osaka-u.ac.jp	
Developers' Pages	PROGRAM in their scholarly activities.			■ Notify me by email of new MODELLER re	eleases
Contact Us	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 INFRINCE ANY PATENTS		On which platforms do	you want to use MODELLER? (Check all that app	oly.)
1	COPYRIGHTS, TRADEMARKS OR OTHER RIGHTS. LICENSOR shall have no liability nor be lighte for an direct indirect or consequential damages with respect to any claim by		□ I want to use <u>ModW</u>	<u>/eb</u> or <u>ModLoop</u>	
	LICENSEE or any third party on account of or arising from this Agreement or use of the PROGRAM.		Microsoft     Windows     OS	Apple Mac Linux (32 bit Linux (x86_64 m X PC) e.g. Opteron)	nachine, Linux (Itanium 2)
	5. LICENSEE agrees that it will use the PROGRAM, and any modifications, improvements, or		SGI IRIX	BM AIX Sparc)	ha) FreeBSD
5. LICENSEE	agrees that it will use the PROGRAM, and any modifications, in	□ Other(s) (please specify)	()		
cerivatives to PROGRAM that LICENSEE may create (collectively, IMPROVEMENTS) solely for internal, non-commercial numbers and shall not distribute or transfer the			Guidelines for email addresses:		
PROGRAM OR IMPROVEMENTS to any person without prior written permission from			A Denside a velid arrait address.		
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.			<ol> <li>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.</li> <li>Provide only one address. The license key will not be sent to multiple addresses.</li> <li>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.</li> </ol>		
ライセン	レスは非商用目的に限定されることに	Please note that your e	email address is used by us only for Modeller. It wit	ill only be used to send	
注意してください。				ED	

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

Thank you very much for signing the license agreement for the MODELLER program. メールが、入力した アドレス先に送られて

The MODELLER license key is

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 が、ライセンスキーです。 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

きます。

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

<u>http://salilab.org/modeller</u>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 https://salilab.org/modeller/download installation.html Q - A C 🔌 Download & Install... 🗵 About MODELLER Download & Installation MODELLER News **Download & Installation** MODELLER is available free of charge to academic non-profit institutions; you will, however. Release Notes need to register for a license in order to use the software. It is also available through Accelrys for Data file downloads government research labs and commercial entities. Registration Modeller 9.16, released Jan. 12th, 2016 Accelrys licensing Discussion Forum To install MODELLER on this machine, we recommend the Windows package. Subscribe Browse archives Anaconda Python ("conda") Search archives Windows (32-bit) [GPG signature] Installation guide Documentation Windows (64-bit) [GPG signature] Installation guide FAQ Tutorial Mac (32-bit or 64-bit Intel) [GPG signature] Installation guide Online manual A Homebrew package is also available Wiki Linux (32-bit RPM) **Developers' Pages** Installation guide Linux (64-bit x86 64 RPM) Installation guide Contact Us O Linux (32-bit Debian/Ubuntu package) [GPG signature] Installation guide O 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。



「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

🤹 N	1odeller 9.16 (64 bit) Setup 🛛 🗕 🗖 🗙	Modeller 9.16 (64 bit) Setup - 🗆 🗙
	Welcome to the Modeller 9.16 (64 bit) Setup Wizard	License Agreement         Please review the license terms before installing Modeller9.16.
	This wizard will guide you through the installation of Modeller 9.16 (64 bit), a package for comparative modeling.	Press Page Down to see the rest of the 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 If you accept the terms of the agreement, click I Agree to continue. You must accept the agreement to install Modeller9. 16.
	Next > Cancel	Nullsoft Install System v29-Jul-2010.cvs

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



### 9.インストールの完了

Nodeller 9.16 (64 bit) Setup 🛛 🗕 🔍	Modeller 9.16 (64 bit) Setup - 🗆 🗙
Choose Start Menu Folder Choose a Start Menu folder for the Modeller9. 16 shortcuts.	Completing the Modeller9.16 Setup Wizard
Select the Start Menu folder in which you would like to create the program's shortcuts. You can also enter a name to create a new folder.	Modeller9. 16 has been installed on your computer. Click Finish to close this wizard.
Accessibility Accessories Administrative Tools ATOK au Wi-Fi(体験版)接続ツール Brother P-touch BT Devices BT Program ChemBioOffice 2014 CyberLink Power2Go 8 CyberLink Power2Go 8	
Do not create shortcuts	http://salilab.org/modeller/
Nullsoft Install System v29-Jul-2010.cvs	< <u>B</u> ack Einish Cancel

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。



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。

Web site

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 12 HOMCOSサーバを用いて、作成することもできます。