

Modellerのインストール手順 Mac 版

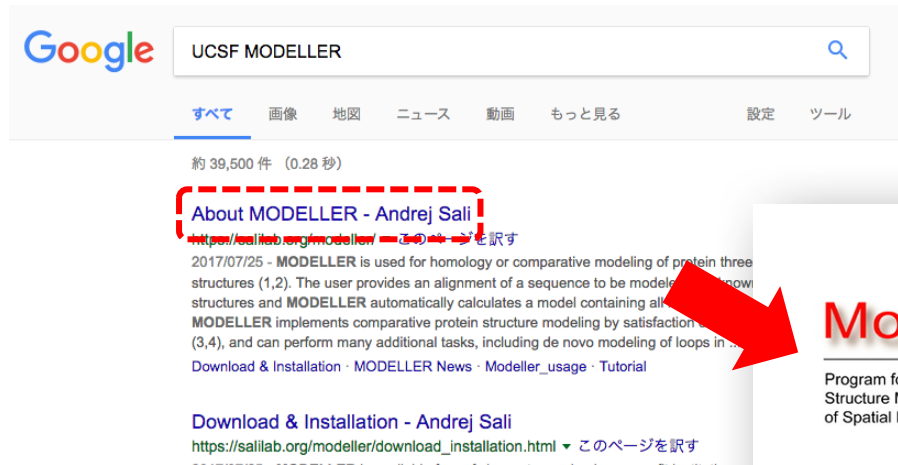
2018年1月5日(金)

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。Windows, Mac, Linuxの各OS用プログラムが提供されており、アカデミックの方なら、ユーザー登録を行えば、無料で 사용할 수 있습니다。このプログラム自体は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併用すると、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。インストールは管理者権限のあるアカウントで行ってください。

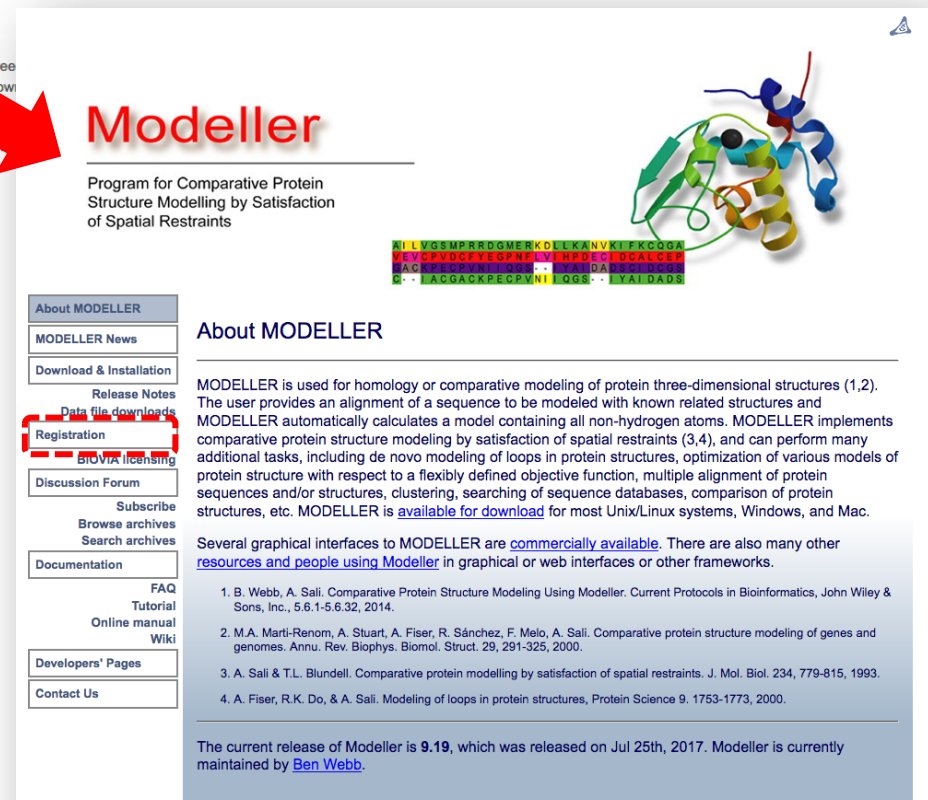
※無料で配布されるライセンスは、非商用目的での使用に限定されます。企業の方で講習会に参加される方は、本講習会での使用に限定していただくようお願いします。本格的に商用目的で使用する場合は、BIOVIA社(元Accelrys社)から市販されているModellerプログラムを購入していただくようお願いいたします。

1. ユーザー登録(Registration)



(2)左端の[Registration]
をクリックする。

(1)「UCSF MODELLER」でGoogle検索
あるいは
<https://salilab.org/modeller>
にアクセスする。



2. ユーザーの情報を入力する



Modeller

Program for Comparative Protein
Structure Modelling by Satisfaction
of Spatial Restraints



NI L V G S M P R R D O M E R K D L L K A N V K I F K C Q S A
K V G C P V D G F Y I S P N A L V I N P D E C I D C A G G E F
K A C K E S S K N I L G S S - - P A A D A S E S S S S S
C - - L A C G A C K P E C P V N I L G G S - - L Y A I D A D S

- About MODELLER
- MODELLER News
- Download & Installation
 - Release Notes
 - Data file downloads
- Registration
- BIOVIA 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

- Andrei 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.
- LICENSEE understands that this Agreement is license for use of, not sale of, the PROGRAM. Consequently, no Purchase Orders can be accepted by LICENSOR.
- 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.
- 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

- 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.

Name:

Title:

(e.g. Dr., Mr., Mrs.)

Institution:

(no abbreviations, please)

3-2, Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, Japan

Street Address:

Email:

Confirm email:

☒ 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:

- 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.
- The license key will not be sent to multiple addresses.
- Use an academic email address rather than a home email address. The server tries to determine your academic status. (It is **not** just a simple check for a '.edu' recognize every institution.) If you do not provide an academic email address, it is processed manually, which will result in significant delays, and you may be

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.

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。

名前、所属、住所、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. 9.19, 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

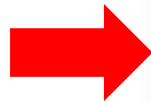
しばらくすると
以下のような内容の
メールが、入力した
アドレス先に送られて
きます。

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

MODELLERのトップページ
<https://salilab.org/modeller>
に戻り、
左メニューの
[Download & Installation]
をクリックします。



Modeller

Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints



Download & Installation

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.

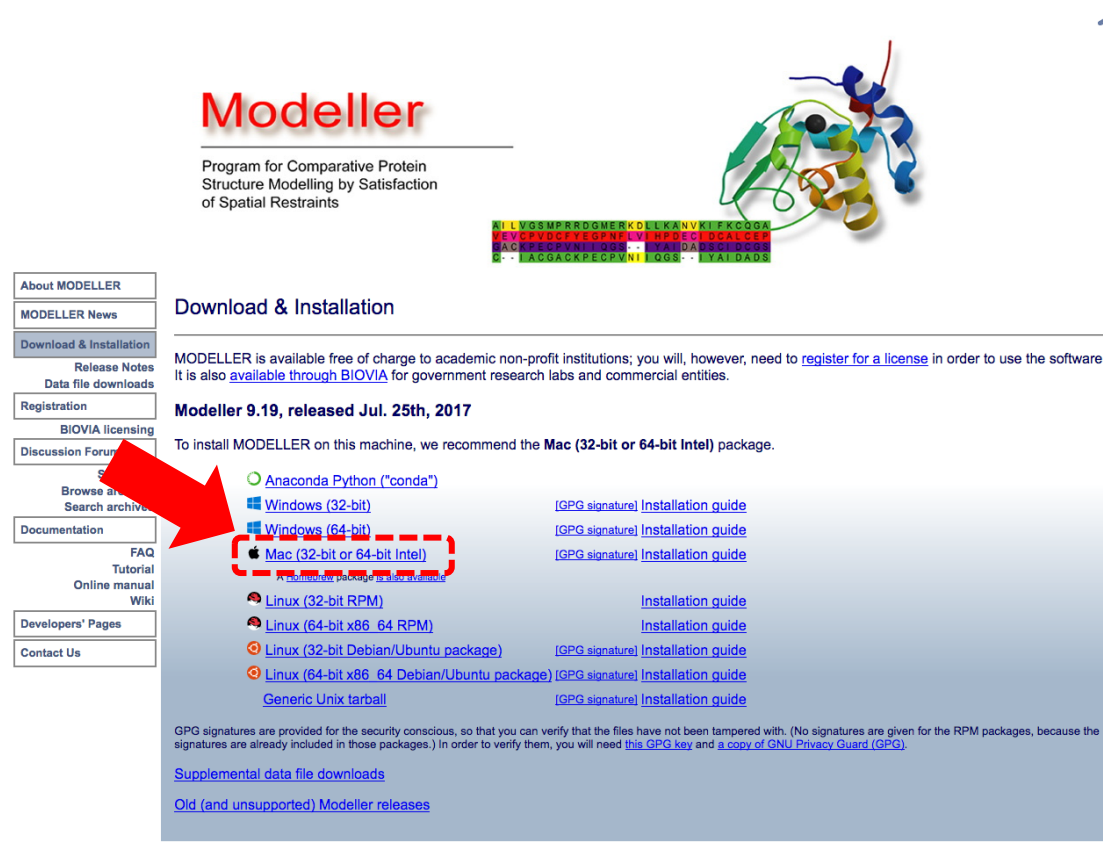
Several graphical interfaces to MODELLER are [commercially available](#). There are also many other [resources and people using Modeller](#) in graphical or web interfaces or other frameworks.

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. Biomol. Struct. 29, 291-325, 2000.
3. A. Sali & T.L. Blundell. Comparative protein modelling by satisfaction of spatial restraints. J. Mol. Biol. 234, 779-815, 1993.
4. A. Fiser, R.K. Do, & A. Sali. Modeling of loops in protein structures, Protein Science 9. 1753-1773, 2000.

The current release of Modeller is **9.19**, which was released on Jul 25th, 2017. Modeller is currently maintained by [Ben Webb](#).

UCSF MODELLER (copyright © 1989-2018 Andrej Sali) is maintained by [Ben Webb](#) at the Departments of Biopharmaceutical Sciences and Pharmaceutical Chemistry, and California Institute for Quantitative Biomedical Research, Mission Bay Byers Hall, University of California San Francisco, San Francisco, CA 94143, USA. Any selling or distribution of the program or its parts, original or modified, is prohibited without a written permission from Andrej Sali. This file last modified: Tue Jul 25 8:19:18 PDT 2017.

5.プログラムをダウンロードする



Modeller

Program for Comparative Protein Structure Modelling by Satisfaction of Spatial Restraints

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 BIOVIA](#) for government research labs and commercial entities.

Modeller 9.19, released Jul. 25th, 2017

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

- [Anaconda Python \("conda"\)](#) [GPG signature] [Installation guide](#)
- [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](#)

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 10.13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



Safariの例→p8

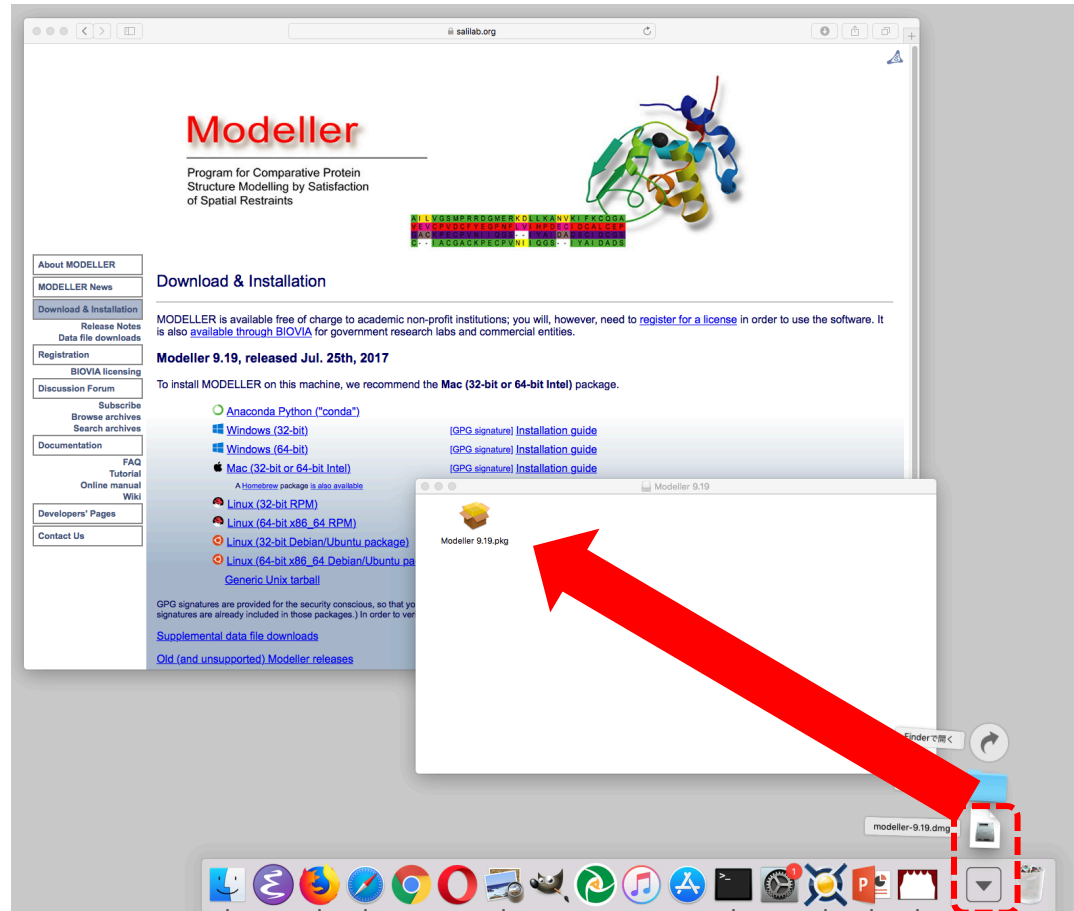


Firefoxの例→p9



Chromeの例→p10

6. インストール (Safari)



ダウンロードリストにある「modeller-9.19.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

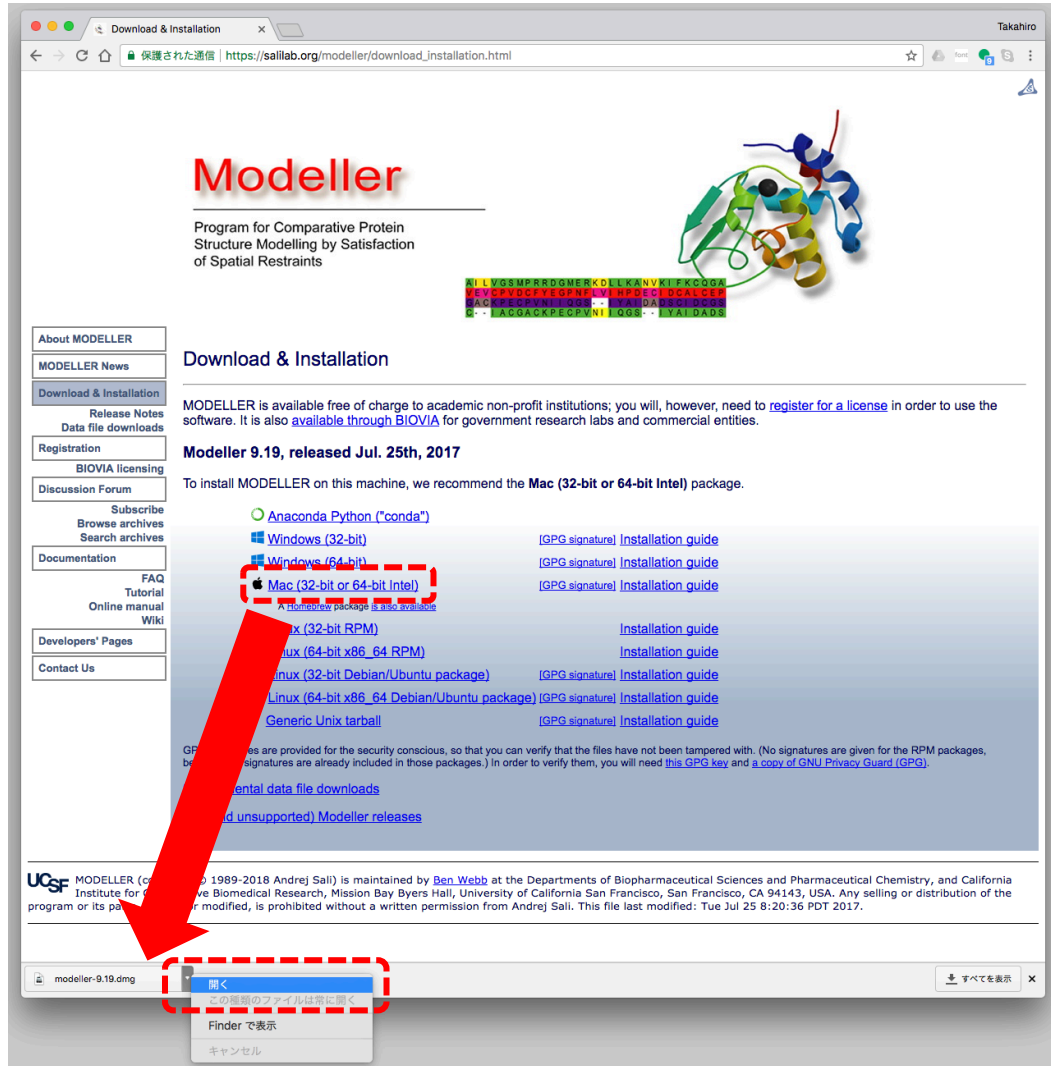
6. インストール (Firefox)



ダウンロードし、DiskImageMounterで開きます。→p11へ

6. インストール (Chrome)

ディスクイメージを
ダウンロードして開きます。
→p11へ



Download & Installation

Modeller 9.19, released Jul. 25th, 2017

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

- Anaconda Python ("conda")
- Windows (32-bit)
- Windows (64-bit)
- Mac (32-bit or 64-bit Intel)**
- Linux (32-bit RPM)
- Linux (64-bit x86_64 RPM)
- Linux (32-bit Debian/Ubuntu package)
- Linux (64-bit x86_64 Debian/Ubuntu package)
- Generic Unix tarball

modeller-9.19.dmg

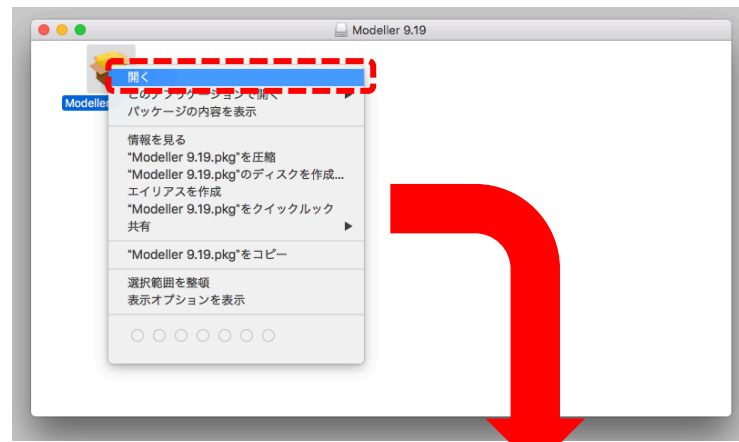
開く

Finder で表示

キャンセル

6. インストール

「modeller-9.19.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。

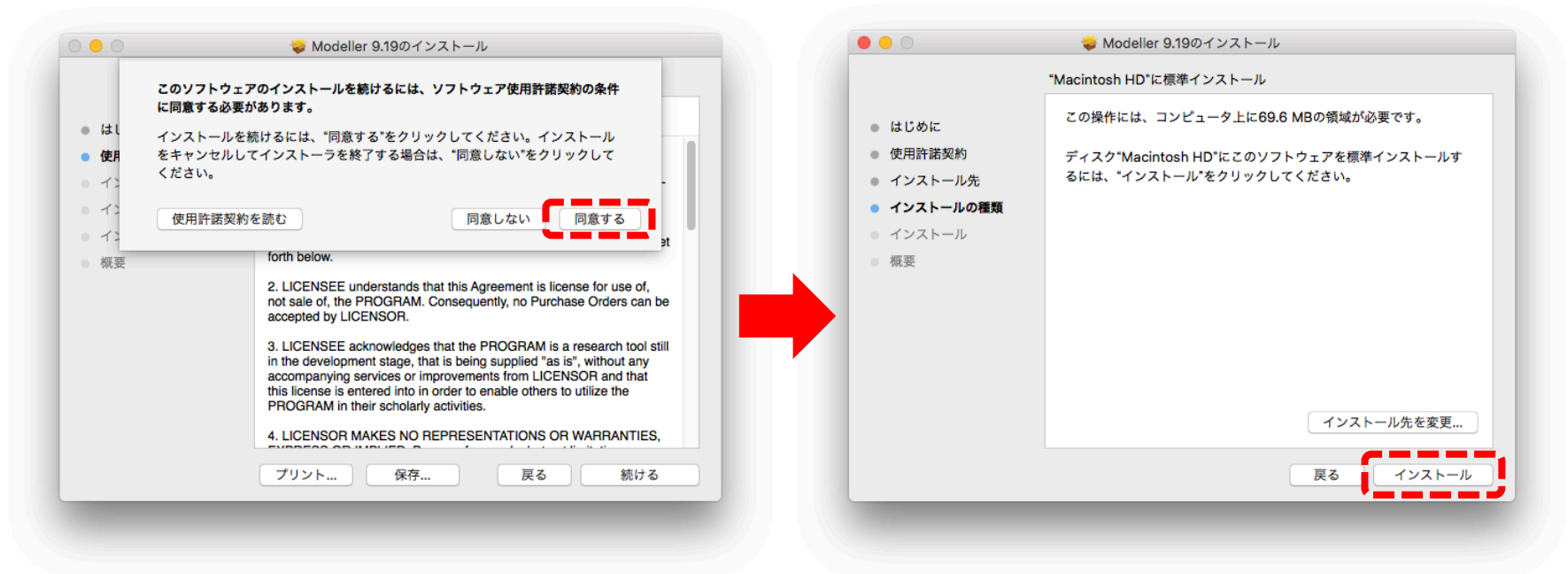


7. ウィザードに従ってインストール



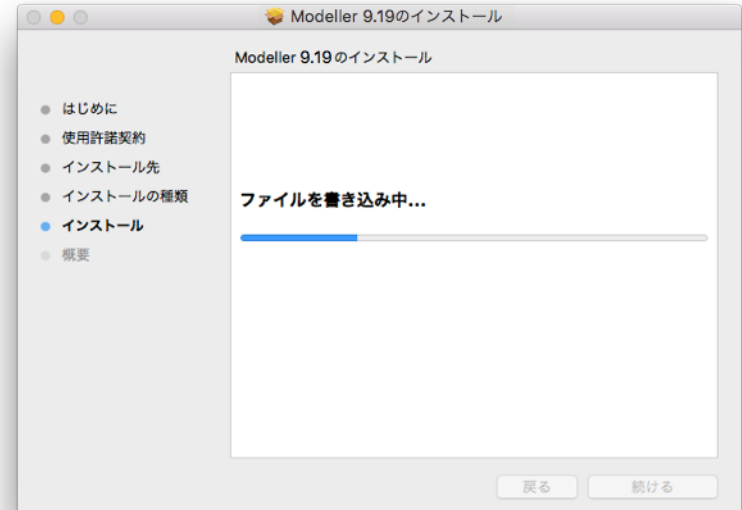
インストーラの指示に従いインストールを進めます。

7. ウィザードに従ってインストール



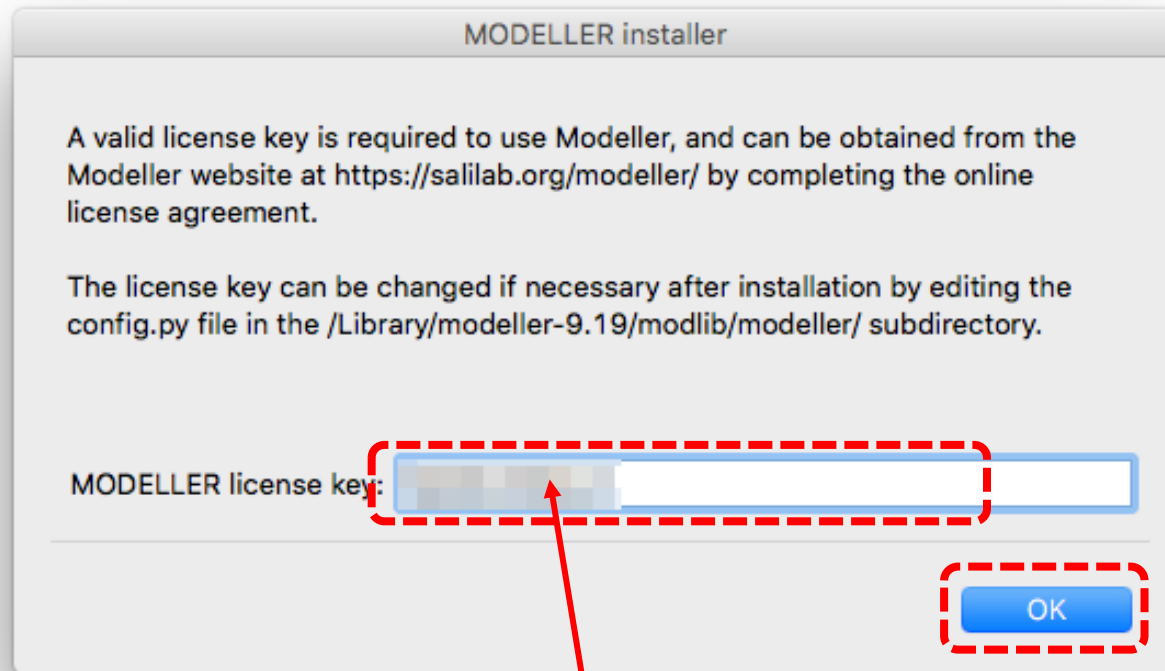
インストーラの指示に従いインストールを進めます。

7. ウィザードに従ってインストール



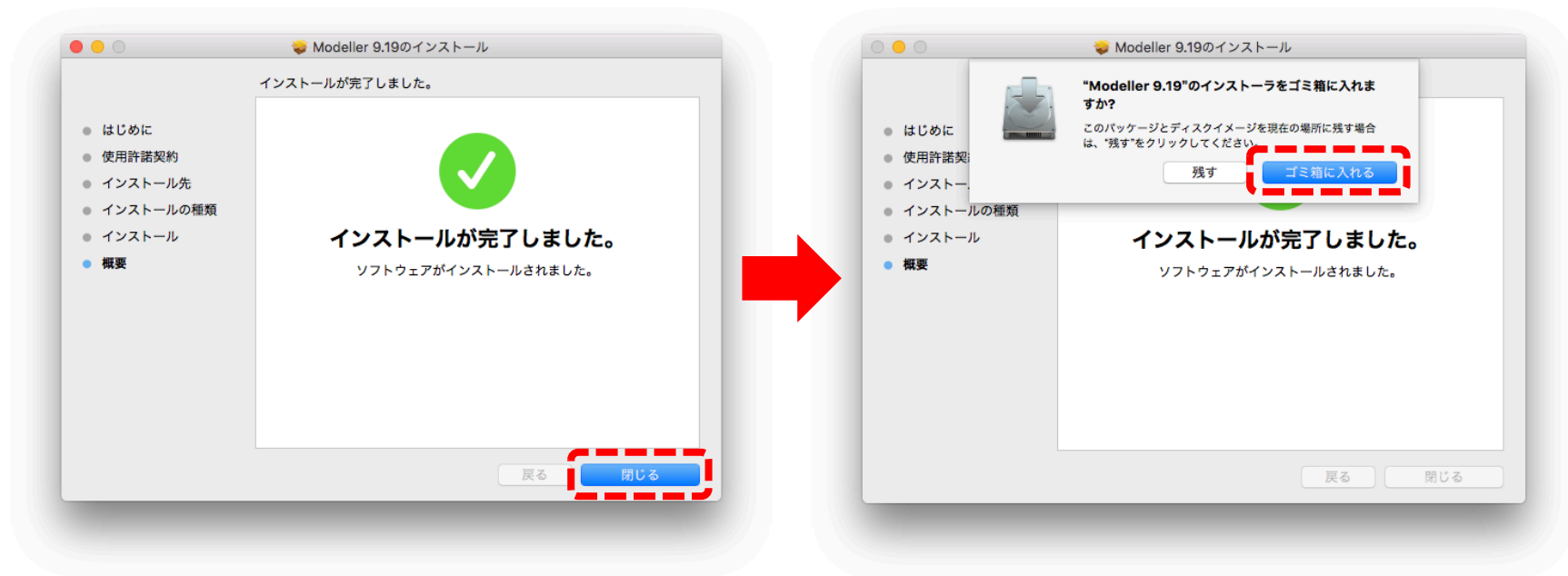
インストールには管理者権限が必要です。管理者権限のあるユーザ名・パスワードを入力して下さい。

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。

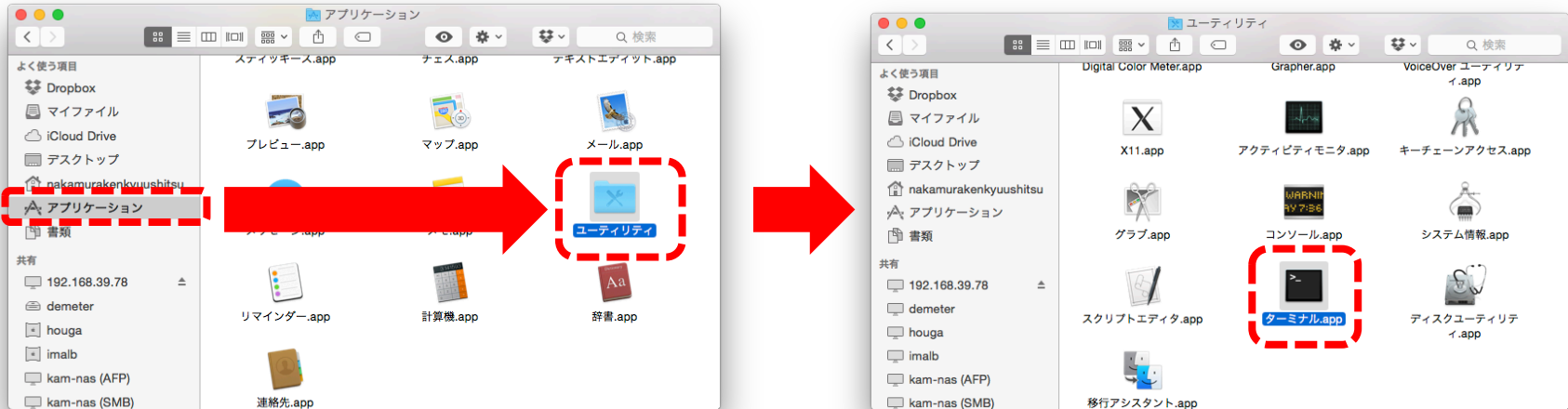
9.インストールの完了



これでインストールは完了です。

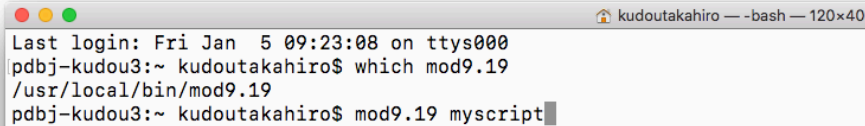
Modellerのコマンドラインでの使い方

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



A terminal window titled 'kudoutakahiro — -bash — 120x40'. The output shows the user 'pdbj-kudou3' running 'which mod9.19' which returns '/usr/local/bin/mod9.19'. Then they run 'mod9.19 myscript'.

```
Last login: Fri Jan 5 09:23:08 on ttys000
pdbj-kudou3:~ kudoutakahiro$ which mod9.19
/usr/local/bin/mod9.19
pdbj-kudou3:~ kudoutakahiro$ mod9.19 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、
mod9.19 [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。

※UCSF ChimeraからModellerを使う場合、コマンドラインを使う必要はありません。