

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター

Active ワークフロー 組み合わせ型

インストールマニュアル

MolProf, AIST

2016/04/25

目次

1	はじめに.....	2
2	Active ワークフロー組合せ型について	3
3	インストール.....	4
3.1	Active ワークフローとプログラムのダウンロード.....	4
3.2	AIST-knime パッケージの展開と KNIME の起動.....	5
3.2.1	Windows の場合	5
3.2.2	Linux の場合	5
3.2.3	MacOS の場合	5
3.3	KNIME 設定	6
4	おわりに.....	8

1 はじめに

本書は、産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センターにて運用する統合 DB 情報基盤サイトで公開している解析サービスの「Active ワークフロー」のうち、組み合わせ型について、インストール方法を記述した文書です。

Active ワークフローのご使用方法については別途、ユーザーマニュアルをご参照いただき、併せて統合 DB 情報基盤サイト Web サイトをご利用ください。

統合 DB 情報基盤サイト : <http://togo.medals.jp/>

2 Active ワークフロー組合せ型について

Active ワークフロー組合せ型は、以下のとおり 4 種類あり、AIST-knime package ファイルには 4 種類すべてが同梱されています。

後述の手順に従いインストールすることで、4 種類すべてが利用可能となります。

2-1 Active ワークフロー組合せ型一覧

No.	Active ワークフロー組合せ型 名称	対応 OS	説明
1	RNA Structure Prediction Active Workflow	Windows 32bit Linux 64bit MacOS	RNA の構造予測を行うワークフロー
2	Protein Structure Prediction Active Workflow	Windows 32bit Linux 64bit MacOS	モデリングやディスオーダー予測を行うワークフロー
3	PhylogeneticTree Active Workflow	Windows 32bit Linux 64bit MacOS	マルチプルアライメント、系統樹作成を行うワークフロー
4	Protein Ligand Docking Workflow	Windows 32bit Linux 64bit MacOS	タンパク質-リガンドドッキングを行うワークフロー

3 インストール

3.1 Active ワークフローとプログラムのダウンロード

統合 DB 情報基盤サイト(<http://togo.medals.jp/>) より、Active ワークフロー組み合わせ型の実行に必要なファイルのダウンロードを行います。

インストールに必要なファイルは、AIST-knime package ファイルです。
インストールする OS に合わせて選択し、ダウンロードを行ってください。

対応 OS と AIST-knime package ファイルとの関係は次表のとおりです。

OS	ダウンロードファイル名	説明
Windows 32bit	AIST-knime-[バージョン]-win.zip	ZIP 圧縮ファイル
Linux 64bit	AIST-knime-[バージョン]-linux.tgz	gzipped tar ball ファイル
MacOS	AIST-knime-[バージョン]-mac.tgz	gzipped tar ball

* MacOS 版は OS X 10.7 以上で動作します。

3.2 AIST-knime パッケージの展開と KNIME の起動

ダウンロードした AIST-knime パッケージを展開し、KNIME を起動します。

3.2.1 Windows の場合

1. AIST-knime パッケージをマウスで選択し、右クリックを押下します。
2. 表示されるメニューより、「すべて展開」を選択します。
展開が行われます。
3. knime ディレクトリの中にある knime.exe をダブルクリックします。



3.2-2 KNIME アイコン

3.2.2 Linux の場合

1. ダウンロードファイルを展開します。

```
$ tar zxvf [ダウンロードファイル名]
```

2. 展開したディレクトリ以下の knime ディレクトリに移動し、KNIME を起動します。

```
$ cd knime  
$ ./knime
```

3.2.3 MacOS の場合

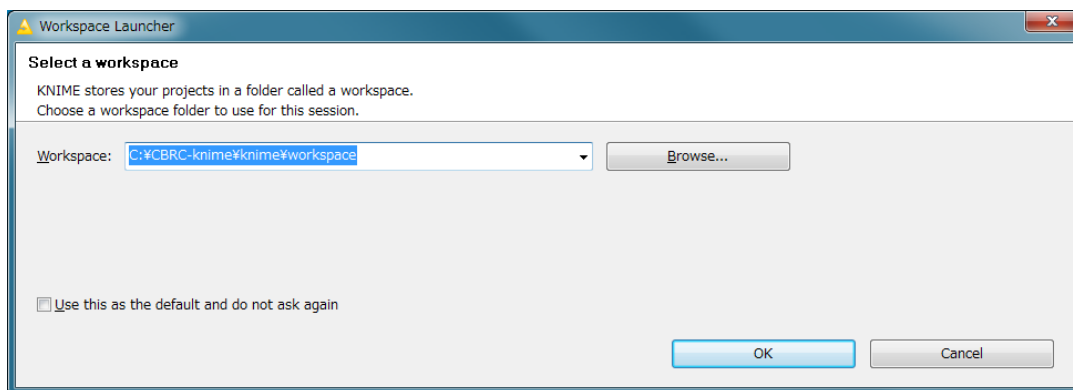
1. AIST-knime パッケージをマウスで選択し、右クリックを押下します。
2. 表示されるメニューより、「すべて展開」を選択します。
展開が行われます。
3. KNIME 3.X.X.app をダブルクリックします。

3.3 KNIME 設定

KNIME の起動時に、Workspace の設定画面である「Workspace Launcher」Window を使用して、Workspace の設定を行います。

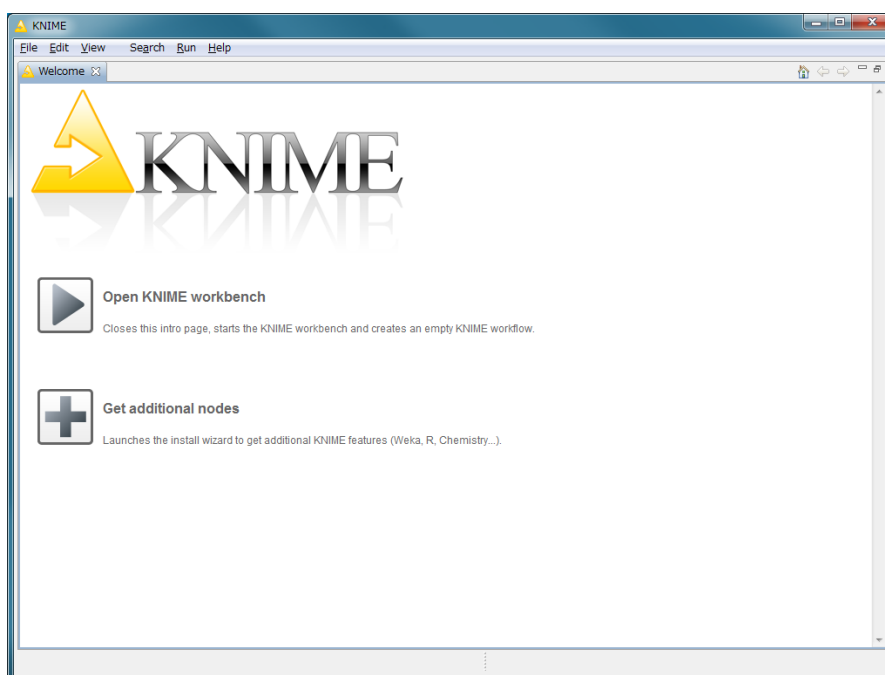
Workspace は、インストールした KNIME フォルダ内にある workspace フォルダへのフルパスを設定します。

1. 「Browse...」ボタンを押下し、インストールした KNIME フォルダ内の workspace フォルダを選択し、「OK」ボタンを押下します。Mac OS 版の場合、KNIME 3.X.X.app/Contents/Eclipse/workspace を指定してください。



3.3-1 KNIME Workspace の設定

2. KNIME 起動後の画面より、「Open KNIME workbench」を選択します。

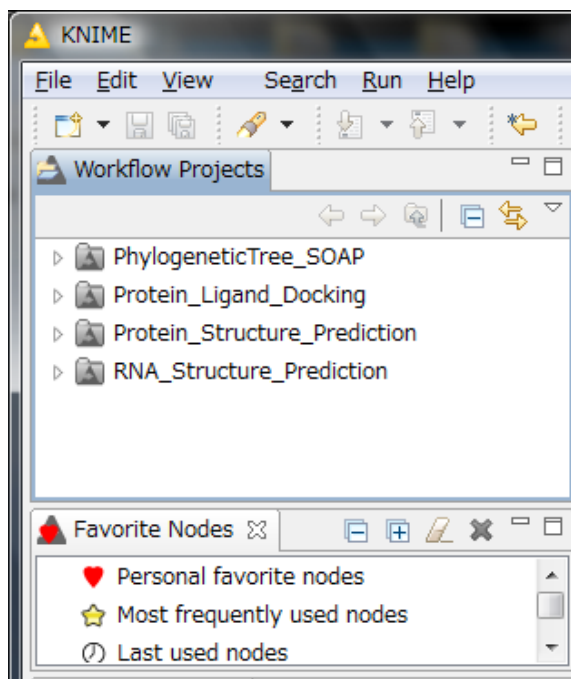


3.3-2 Open KNIME workbench

3. KNIME 左上の Workflow Projects 欄に、4 種類の Active ワークフロー組み合わせ型が表示されます。

これで、インストールは終了です。

各ワークフローの利用方法はユーザーマニュアルをご参照ください。



3.3-3 Workflow Projects

4 おわりに

ご質問やご意見は下記のメールアドレスにお願いいたします。

workflow@molprof.jp

産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター 情報統合班では、利用者のご要望を積極的に取り入れ、より良いシステムにしていく計画です。

産業技術総合研究所
創薬分子プロファイリング研究センター
情報統合班 <http://togo.medals.jp>

〒135-0064 東京都江東区青海 2-4-7

産総研 臨海副都心センター別館 (バイオ・IT 融合研究棟)