



# SYBYL-X

for WindowsXP/7

# インストールガイド



当ドキュメントの著作権はすべて株式会社ワールドフュージョンに帰属します。当ドキュメントの無断コピーおよび無断掲載は許可されていません。

内容についてのお問い合わせ先:

株式会社ワールドフュージョン 技術営業部  
東京都中央区日本橋人形町 2-15-15 新扇堂ビル 7F  
TEL 03-3662-0521 FAX 03-3662-0522  
電子メール chemsupport@w-fusion.co.jp  
URL <http://www.w-fusion.co.jp/>

Version 2.110 2014年2月

## 目次

<b>1</b>	<b>はじめに</b> .....	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>SYBYL-X をインストールする方への注意事項</b> .....	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Windows 版 SYBYL-X 動作環境</b> .....	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>インストールの前に</b> .....	<b>5</b>
<b>5</b>	<b>SYBYL-X 本体のインストール</b> .....	<b>6</b>
5.1	インストール作業の流れと前準備.....	6
5.2	インストーラの起動.....	6
5.3	インストールの開始.....	7
5.4	ライセンス条項の確認.....	7
5.5	ユーザ情報の入力.....	8
5.6	インストール先ディレクトリの指定.....	8
5.7	ライセンスの設定.....	9
5.8	ライセンス請求関連情報の表示.....	10
<b>6</b>	<b>タンパク質データベース(Prodat)のインストール</b> .....	<b>11</b>
6.1	インストーラの起動.....	11
6.2	インストール開始.....	12
6.3	インストール関連情報の表示とインストール.....	12
<b>7</b>	<b>タンパク質データベース(Orchestrar)のインストール</b> .....	<b>14</b>
7.1	インストーラの起動.....	14
7.2	インストールの開始.....	15
7.3	ライセンス条項の確認.....	15
7.4	インストール関連情報の表示とインストール.....	15
<b>8</b>	<b>ライセンスおよび環境設定</b> .....	<b>17</b>
8.1	SYBYL-X のライセンスキーをお持ちでない方.....	17
8.2	既に SYBYL ライセンスキーをお持ちの方.....	17
8.3	ライセンスキーとライセンスサービスのインストール.....	17
8.4	複数ユーザでのアプリケーションの共有設定.....	18
<b>9</b>	<b>インストール後の確認と SYBYL-X の起動</b> .....	<b>19</b>
9.1	インストール結果の確認.....	19
9.2	SYBYL-X の起動方法.....	20

## 1 はじめに

本インストールガイドでは、Windows 版 SYBYL-X のインストール手順を説明します。本インストールガイドは Windows 版専用となっていますので、Linux 版、MacOSX 版 SYBYL を御利用の方は、それらに対応するインストールガイドを御利用ください。

## 2 SYBYL-X をインストールする方への注意事項

- ◆ SYBYL-X をインストールする場合、本インストールガイドの手順に従ってインストールと初期設定を行ってください
- ◆ SYBYL-X は、英語版 Windows での動作を基本に設計されております。このため、日本語のファイル名、ユーザ名、ディレクトリ名などの取り扱いができません（Windows ユーザ名を日本語としている場合、障害が発生する可能性があります）
- ◆ SYBYL-X は、WindowsXP および Windows7 以外での動作検証は行われておりません。これ以外の OS 環境下で御利用いただく場合、標準的な利用手順と異なる設定が必要な場合があります。

## 3 Windows 版 SYBYL-X 動作環境

Windows 版 SYBYL-X は以下の仕様のマシンを推奨しております。

- ◆ コンピュータ本体  
CPU: Pentium4 以降、Core2 Duo 等(2GHz 以上の CPU を推奨)
- ◆ メモリ  
2 GB 以上
- ◆ 画面解像度  
1280x1024 以上
- ◆ ディスク容量  
500GB 程度のハードディスクを搭載していること

### インストール時に必要なディスク空き容量：

ソフトウェア本体	1.6GB
タンパク質データベース(PRODAT)	1.3GB
タンパク質データベース(ORCHESTRAR)	14.0GB

※上記に加えて、インストールパッケージを展開するための空き領域が 10GB 程度あることをご確認ください。

- ◆ 対応 OS

### Windows7 64bit 版を推奨します。

WindowsXP SP3 および Windows7（何れも 32bit 版）でも動作可能です。

- 日本語版 OS でも動作確認を行っておりますが、フォルダ名に日本語を利用した場合、ファイル一覧表示での文字化けやファイル操作時のエラーの原因になります
- 日本語版 OS 環境下で、日本語でユーザ名を設定している場合、起動時・操作時にエラーが表示されることがありますので、英文字でユーザ名を作成して御利用ください
- 今後のバージョンアップでは、対応 OS は 64bit 版に統一される予定となっておりますので、上記推奨 OS 環境での御利用をお勧めします

## 4 インストールの前に

- ◆ SYBYL-X を御利用になる場合、日本語を含まない名前のユーザを御利用になることをお勧めします
- ◆ 日本語版 Windows 環境で御利用いただく場合、日本語のファイル名・ディレクトリ名が処理できません。特に、Windows のデスクトップが「デスクトップ」というフォルダ名になっている場合には、デスクトップ上のファイルを読み込みできないなどの障害が考えられます。
- ◆ WindowsXP では Administrator あるいは PowerUser 権限を持ったユーザにて、Windows7 では、管理者権限を持つユーザにてインストールを行う必要があります
- ◆ 一台のマシンにインストールした SYBYL-X を複数のユーザで共用する場合には、管理者権限を持つユーザにてインストールを行うとともに、インストールした SYBYL-X の共有設定を行ってください

- ◆ **SYBYL-X2.1.1 は SYBYL-X2.0 とは併用できませんので、SYBYL-X2.1.1 インストールの前に、必ずスタートメニュー：すべてのプログラム>>SYBYL-X>>Uninstall SYBYL-X を実行して、旧バージョンをアンインストールしてから作業を行ってください。**

- ◆ 以下の SYBYL-X 初期設定ファイルに旧バージョン用の設定(ディレクトリ名など)が残っている場合、新しくインストールした SYBYL-X が誤動作する可能性があります

sybyl.ini

tailor.save

ディレクトリ .sybyl/ 以下のファイル

ディレクトリ .config/Tripos 以下のファイル

インストール後の動作確認で、意図した操作ができない場合や不具合が見られる場合には、ユーザのホームディレクトリ直下にあるこれらのファイル・ディレクトリの名称を変更した後、アプリケーションを再起動して確認してください

※Windows マシンでは、SYBYL のデフォルト作業ディレクトリは

¥Documents and Settings¥ユーザ名

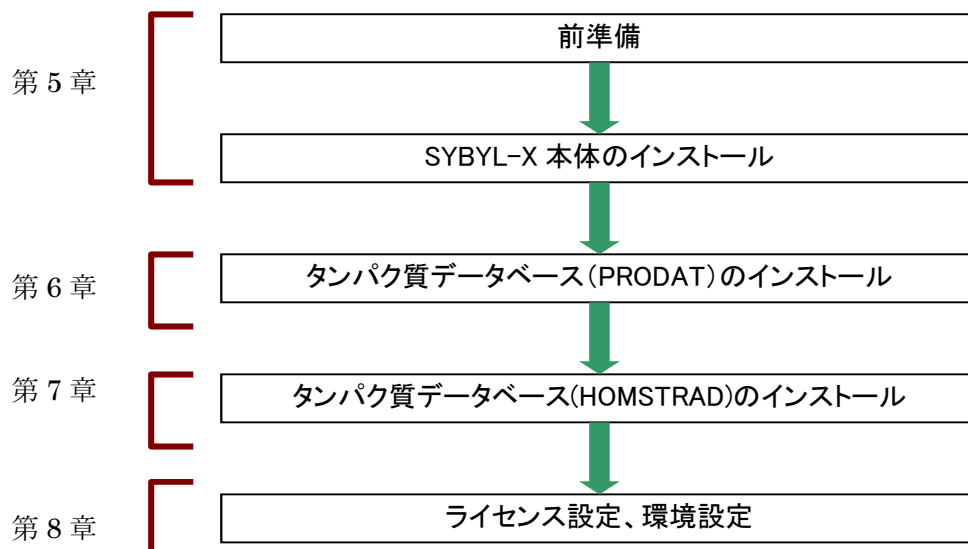
といったディレクトリとなっており、「My Documents」とはなっておりませんので、ご注意下さい

※ネットワークドライブなどを利用している場合、SYBYL のデフォルト作業ディレクトリが意図しない場所となっている場合があります;このようなときには、SYBYL 起動アイコンのプロパティで作業ディレクトリの場所を確認し、そのディレクトリの中に上記 SYBYL 設定ファイルが残されていないかどうかをご確認下さい

## 5 SYBYL-X 本体のインストール

### 5.1 インストール作業の流れと前準備

インストール作業は、以下のような手順で進めます。

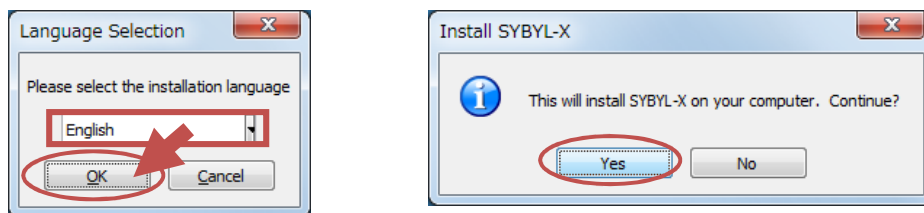


### 5.2 インストーラの起動

Windows 版 SYBYL-X の場合、インストールメディアに格納されているファイル **SYBYL-X2.1.1-Windows.exe** をハードディスクにコピーして実行します。

※ Windows7 の場合、ファイルを右クリックして表示される『管理者として実行』を選択してください

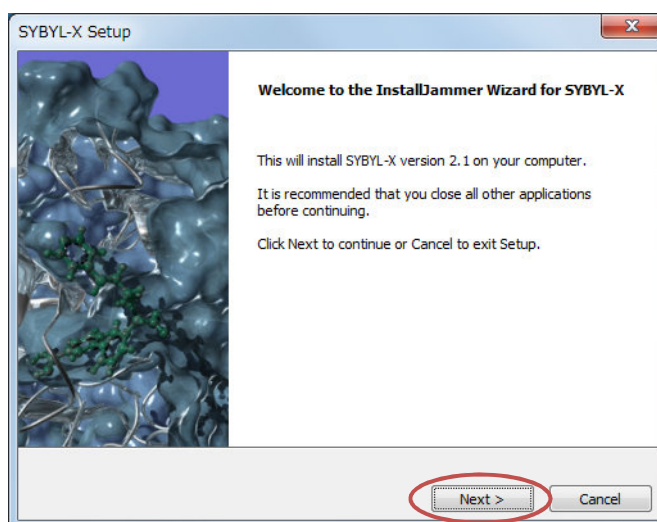
最初にインストールに利用する言語の選択が表示されますので、「英語(English)」を選択してください。



また、実際のインストール手続きを開始してよいかを尋ねてきますので、YES を選択して次に進んでください。(SYBYL-X Setup ダイアログボックスが表示されます)

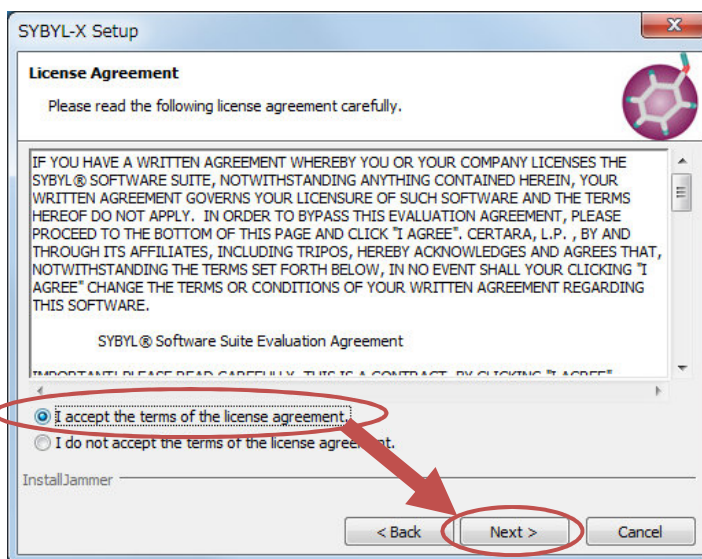
### 5.3 インストールの開始

最初に、SYBYL-X のインストールを開始する旨のダイアログが表示されますので、Next を押して次に進みます。



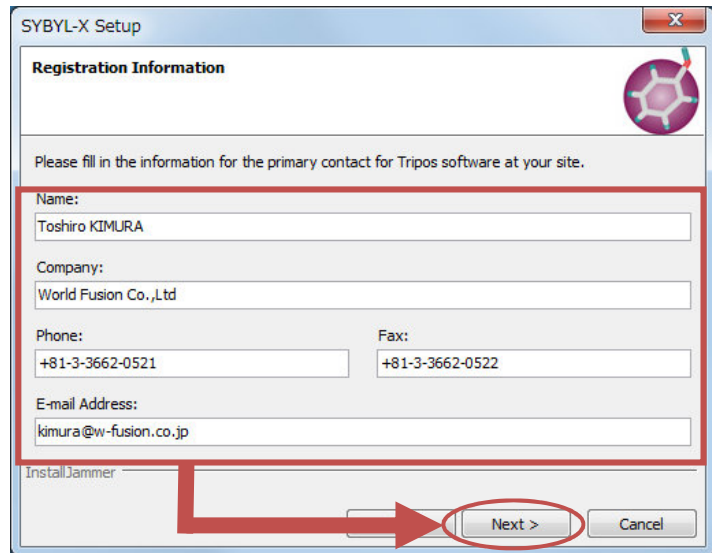
### 5.4 ライセンス条項の確認

次に、SYBYL-X を御利用いただく上でのライセンス条項が表示されますので、ご一読・同意の上で選択肢『I accept the terms of the license agreement』を有効にしてください。その上で YES ボタンを押せば次のステップに進みます。



## 5.5 ユーザ情報の入力

インストールおよびその後のライセンス取得の段階で、御所属、ご担当者名などを Tripos 社に連絡する必要があります。その際に利用する会社名・連絡先メールアドレスなどの情報を英文表記で入力してください。



## 5.6 インストール先ディレクトリの指定

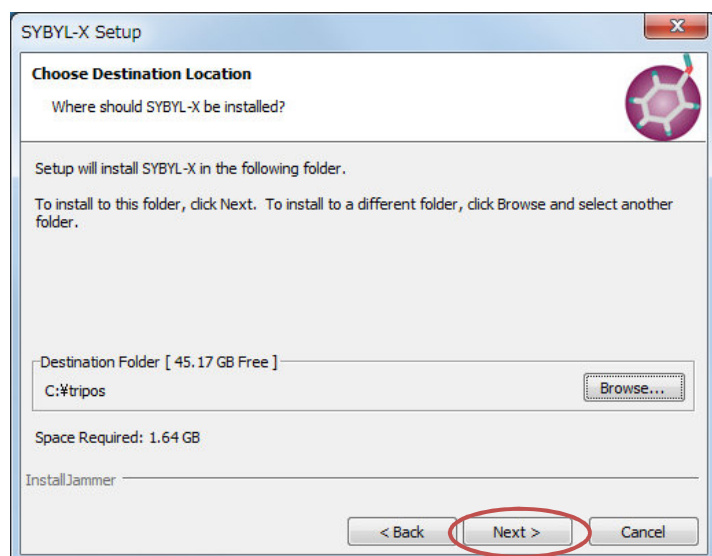
SYBYL-X ソフトウェアのインストール先ディレクトリを指定します。デフォルトはユーザディレクトリの下

**tripos**

ディレクトリとなっています。**デフォルトのまま、もしくは c:\%tripos に設定してのインストールを推奨**します。(インストール先を別のディレクトリに変更したい場合には、Browse ボタンを押して、インストール先のドライブならびにディレクトリを指定してください)

※ インストール先に十分な空き容量があることを確認の上で設定してください

※ **インストールするディレクトリ名に空白が入っている場合、インストールしたソフトウェアが動作しない場合があります**

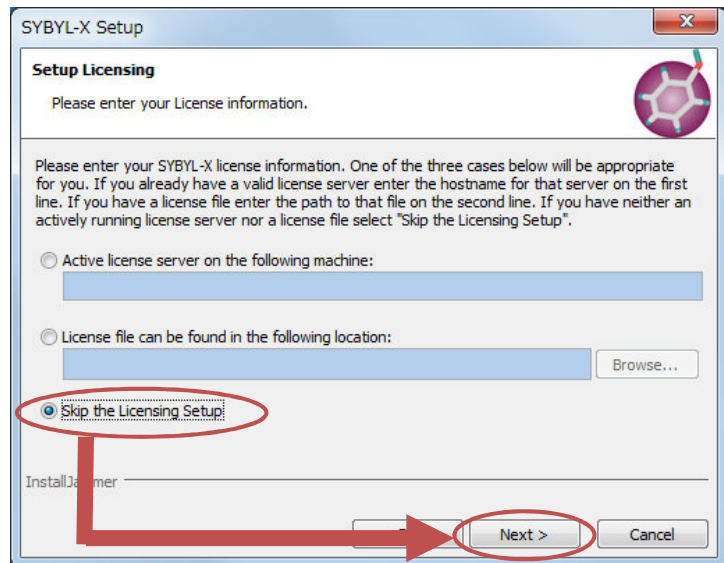




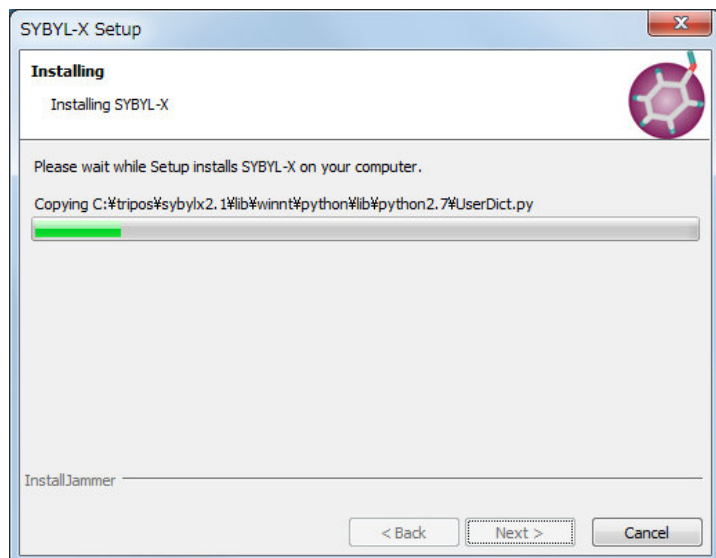
## 5.7 ライセンスの設定

次のステップでは、SYBYL ライセンスファイルの設定を行いません。

このダイアログが表示されたら、『Skip the Licensing Setup』を選択して進みます。

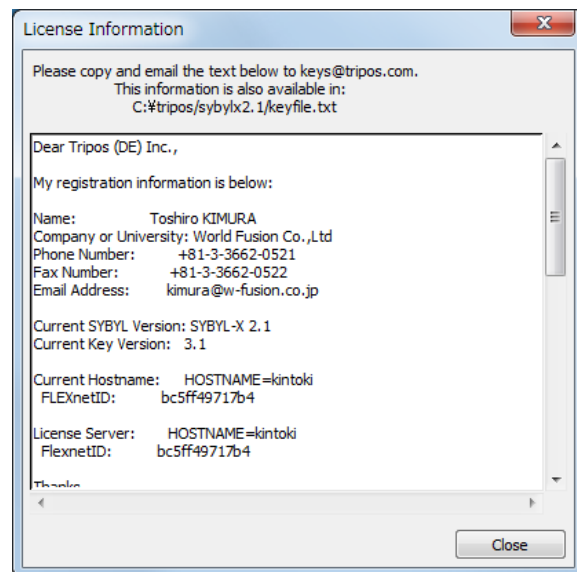


**入力後、確認画面で Next ボタンを押すとインストールが始まります**



## 5.8 ライセンス請求関連情報の表示

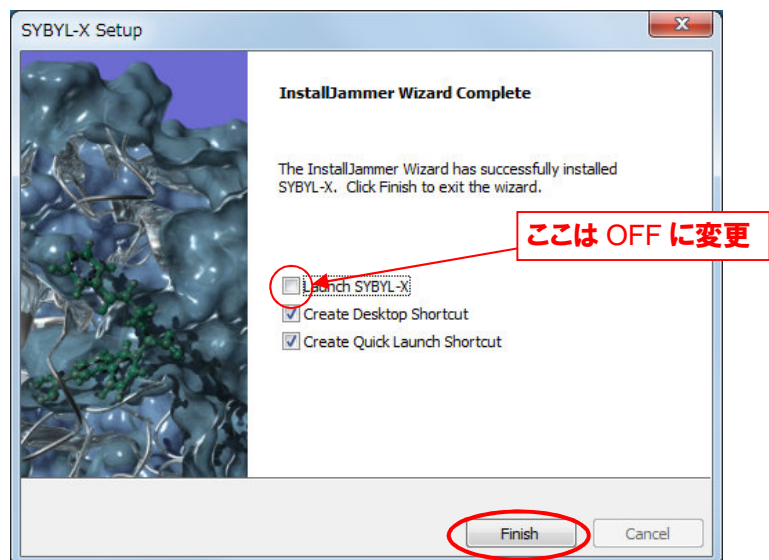
インストールが終わると、終了ダイアログが表示された後でライセンス請求のためにインストーラが収集した情報が表示されます。(表示されるまで約一分かかります)



この状態になったら、License Information ダイアログの Close ボタンを押して閉じたあと、SYBYL-X Setup ダイアログボックスのチェックボックスを適宜設定して Finish ボタンを押してください。

※ ダイアログボックスのチェックボックスのうち『Launch SYBYL-X』を ON のまま操作を進めると、インストーラ終了と同時に SYBYL-X が起動してライセンスエラーが発生しますので、チェックボックスを OFF に変更してください

(SYBYL-X が起動してライセンスエラーが表示されてしまった場合、Windows のタスクマネージャにて sybyl.exe プロセスを停止させてください)



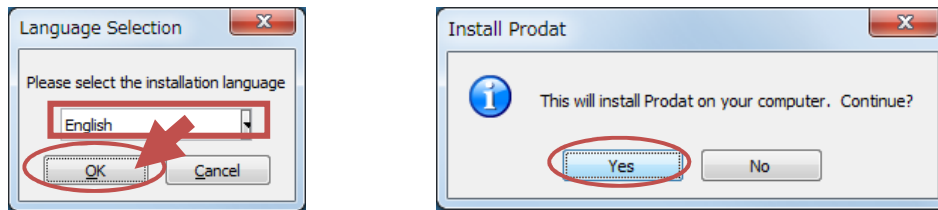
## 6 タンパク質データベース(Prodat)のインストール

SYBYL-X Suite をお持ちの方、もしくは BioPolymer ライセンスをお持ちの方は  
このセクションの作業を行ってください

### 6.1 インストーラの起動

Windows 版 SYBYL-X の場合、インストールメディアに格納されているファイル  
**Prodat\_1009-x2.1.1-Windows.exe**  
をハードディスクにコピーして実行します。

最初にインストールに利用する言語の選択が表示されますので、「英語(English)」を選択してください。

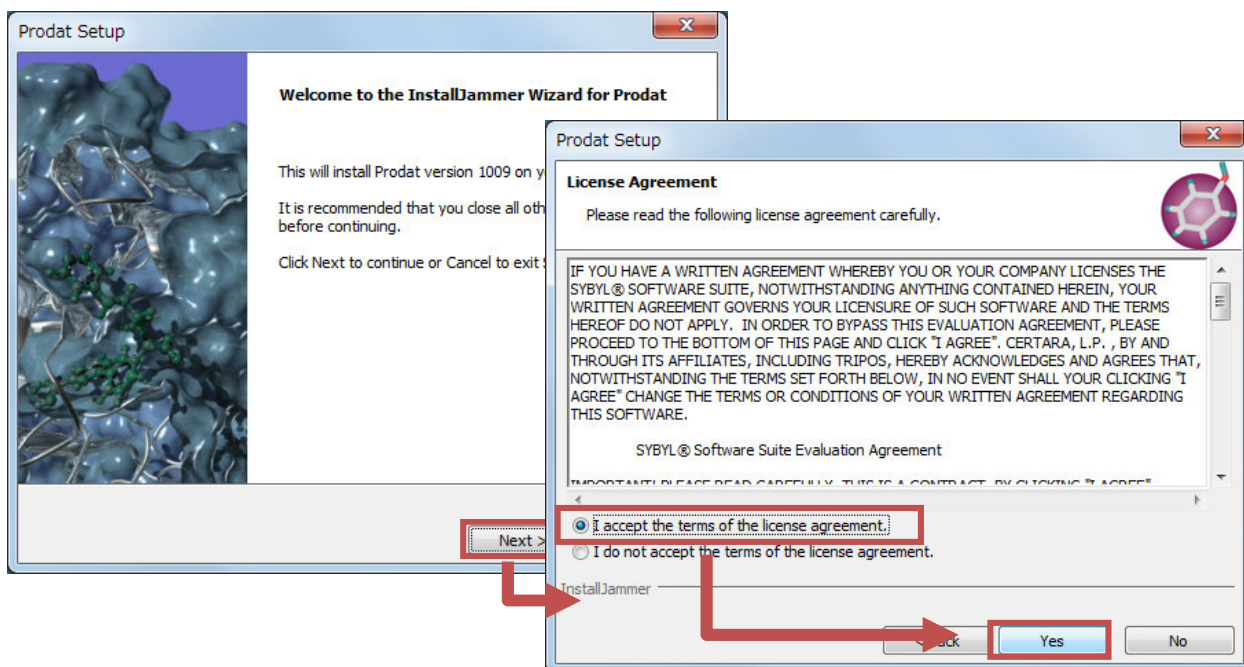


また、実際のインストール手続きを開始してよいかを尋ねてきますので、YES を選択して次に進んでください。(Prodat Setup ダイアログボックスが表示されます)

## 6.2 インストール開始

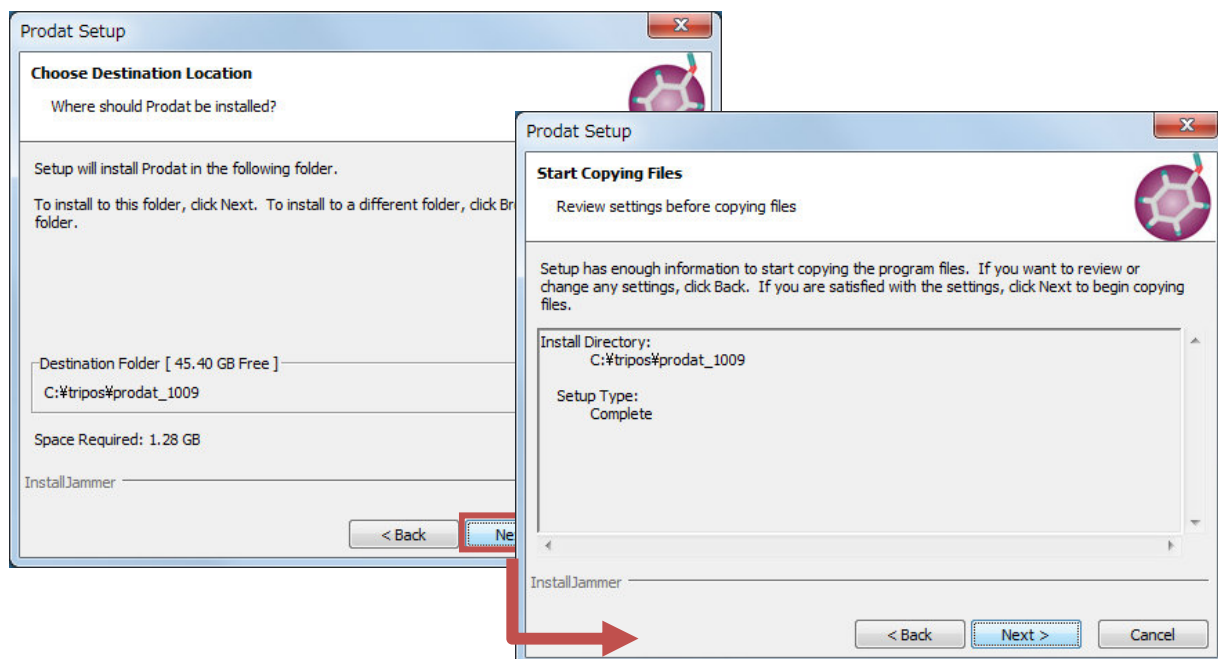
最初に、Prodat データベースのインストールを開始する旨のダイアログが表示されますので、Next を押して次に進みます。

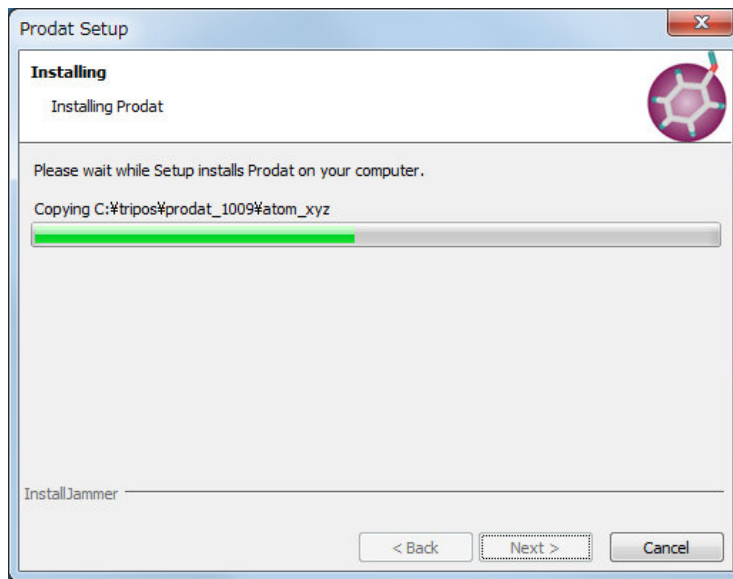
次に、SYBYL-X と Prodat を御利用いただく上でのライセンス条項が表示されますので、ご一読・同意の上で選択肢『I accept the terms of the license agreement』を有効にしてください。



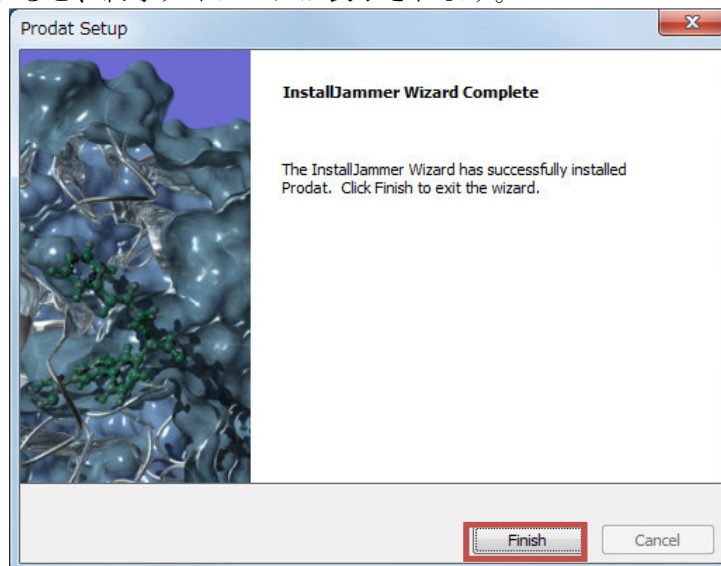
## 6.3 インストール関連情報の表示とインストール

ここで、インストーラが既存の SYBYL-X インストール先を認識すると、そのインストール先情報を表示します。



**この画面で Next ボタンを押すとインストールが始まります**

インストールが終わると、終了ダイアログが表示されます。



Prodat Setup ダイアログボックスの Finish ボタンを押すとインストールは終了です。

## 7 タンパク質データベース(Orchestrar)のインストール

SYBYL-X Suite をお持ちの方、Advanced Protein Modeling ライセンスをお持ちの方は、このセクションの作業を行ってください

### 7.1 インストーラの起動

Windows 版 SYBYL-X の場合、インストールメディア(APM Databases for SYBYL-X2.1.1)に格納されている、

`orchestrar_db_1009_1.dat`

`orchestrar_db_1009_2.dat`

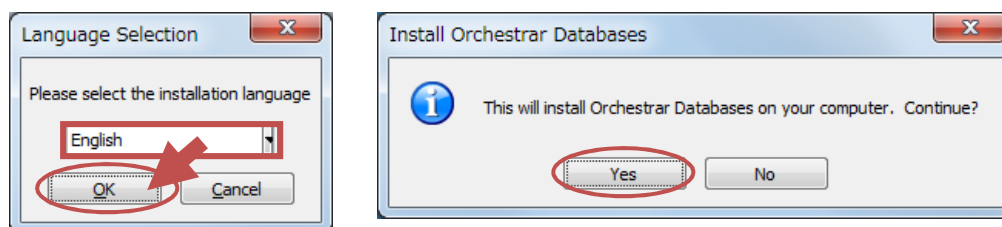
`orchestrar_db_1009-X2.1.1-Windows.exe`

をハードディスクにコピーしてください。その後、ファイル

`orchestrar_db_1009-X2.1.1-Windows.exe`

を実行してください。

最初にインストールに利用する言語の選択が表示されますので、「英語(English)」を選択してください。



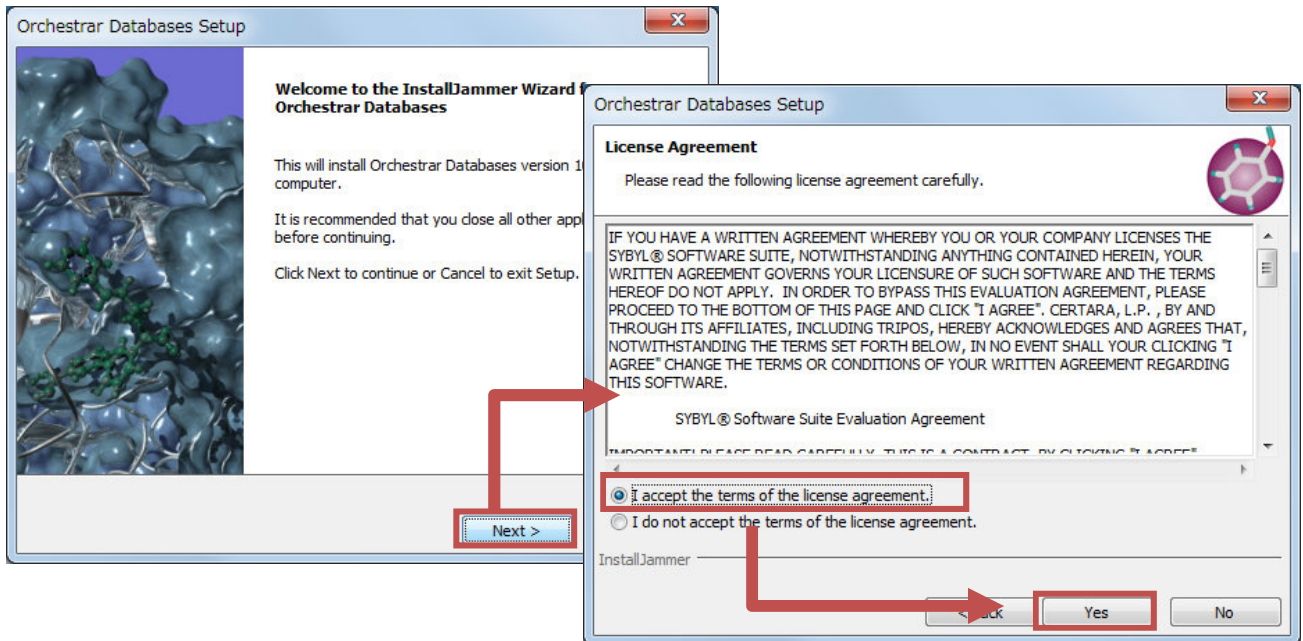
また、実際のインストール手続きを開始してよいかを尋ねてきますので、YES を選択して次に進んでください。(Orchestrar Setup ダイアログボックスが表示されます)

## 7.2 インストールの開始

最初に、Orchestrar データベースのインストールを開始する旨のダイアログが表示されますので、Next を押して次に進みます。

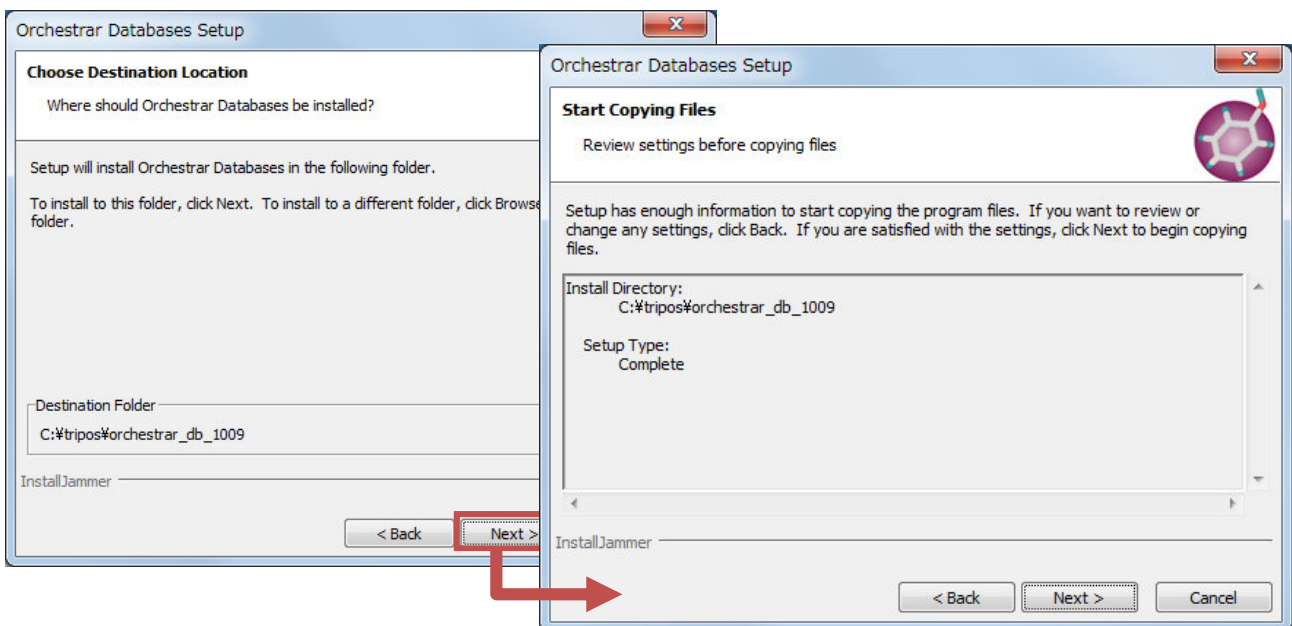
## 7.3 ライセンス条項の確認

次に、SYBYL-X と Orchestrar を御利用いただく上でのライセンス条項が表示されますので、ご一読・同意の上で選択肢『**I accept the terms of the license agreement**』を有効にしてください。



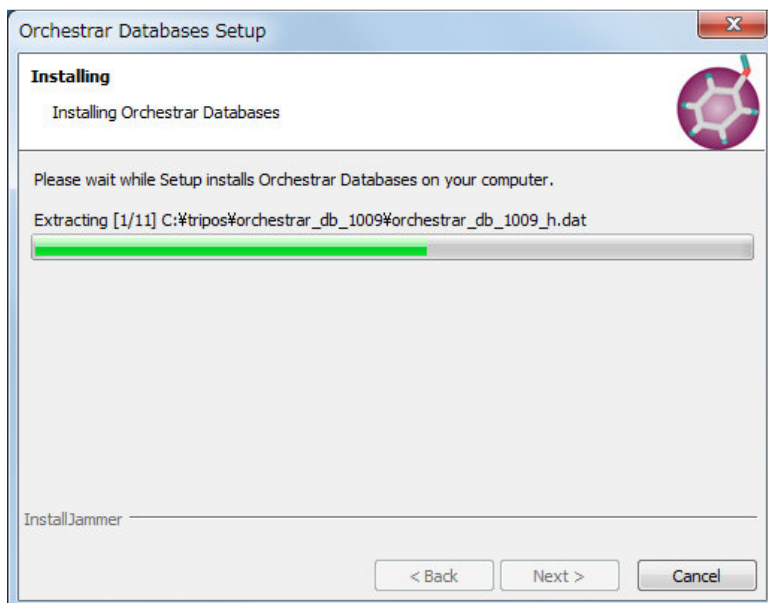
## 7.4 インストール関連情報の表示とインストール

ここで、インストーラが既存の SYBYL-X インストール先を認識すると、そのインストール先情報を表示します。

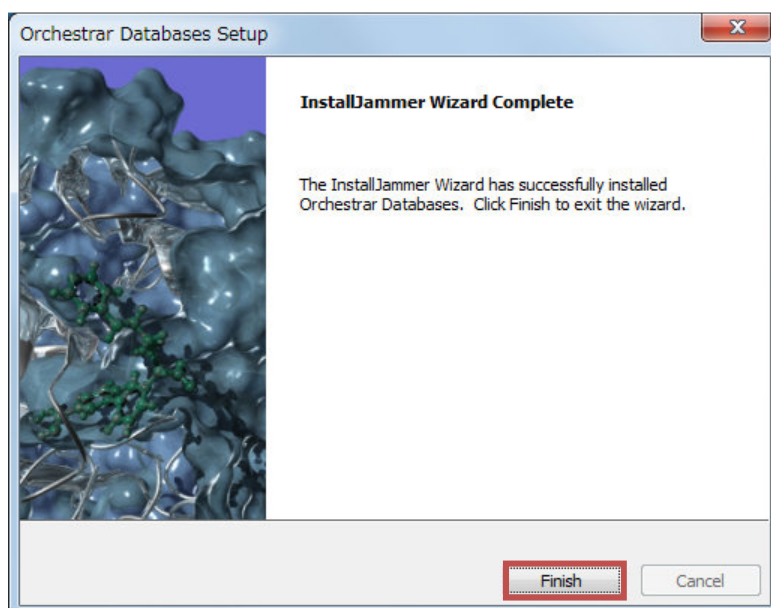


**この画面で Next ボタンを押すとインストールが始まります**

タンパク質データベース(Orchestrar)のインストールには 一時間以上かかります。  
終了まで暫くお待ちください。



インストールが終わると、終了ダイアログが表示されます。



Orchestrar Database Setup ダイアログボックスの Finish ボタンを押すとインストールは終了です。



## 8 ライセンスおよび環境設定

### 8.1 SYBYL-X のライセンスキーをお持ちでない方

今回初めて SYBYL-X を御利用になる方、または SYBYL-X を動作させるマシンを変更した方など、新しいライセンスが必要な方は、SYBYL-X インストール先ディレクトリに作成されているファイル `keyfile.txt` を弊社

**chemsupport@w-fusion.co.jp**

宛にお送りください。手続き終了後、折り返しライセンスファイルをお送りします。

※ ライセンスキー発行にあたって、書面での手続きが必要な場合がございます

※ ライセンスキーは Tripos 社から取り寄せますので、数日程度かかる場合がございます

#### keyfile.txt ファイルの例

```
Dear Tripos (DE) Inc.,

My registration information is below:

Name:                      Toshiro KIMURA
Company or University:      World Fusion Co.,Ltd
Phone Number:               +81-3-xxxx-yyyy
Fax Number:                  +81-3-xxxx-zzzz
Email Address:               kimura@w-fusion.co.jp

Current SYBYL Version:      SYBYL-X 2.1.1
Current Key Version:        3.1

Current Hostname:           HOSTNAME=kintoki
FlexnetID:                   "0123xxyyzzww"

License Server:              HOSTNAME=kintoki
FlexnetID:                   "0123xxyyzzww"
...
```

### 8.2 既に SYBYL ライセンスキーをお持ちの方

既に SYBYL をご利用中の方で、複数のマシンで御利用いただけるライセンスキーをお持ちの場合には、ライセンスサーバの IP アドレスとサービスを行っているポート番号を、次の書式にて SYBYL-X インストール先と並列に存在する **AdminTools11.6/tables** ディレクトリの下にあるファイル **license\_file\_locations** に記載します

1919@xxx.yyy.zz.qq  
TCP/IP ポート番号    ライセンスサーバ IP アドレス

なお、本設定を行っても SYBYL-X が起動しない場合には、`license_file_locations` に記載されているライセンスサーバマシンの IP アドレスに間違いが無いか、およびライセンスサーバマシンにインストールされている `license_file` 中のキーワード **SERVER** で始まる行にポート番号 1 9 1 9 が記載されているか、をご確認ください。

### 8.3 ライセンスキーとライセンスサービスのインストール

新しく SYBYL のライセンスサービスを設定する必要がある方には、弊社よりライセンスキーと設定方法をお送りしますので、それに従ってライセンス設定を行ってください。

## 8.4 複数ユーザでのアプリケーションの共有設定

SYBYL-X アプリケーションを、インストールを行ったユーザ以外のアカウントからも利用する場合、以下の手順での設定が必要です。

### スタートメニューの設定

- (1) スタートメニューをマウスの右ボタンでクリックして、『エクスプローラ – All Users(X)』を開きます
- (2) エクスプローラが開き、スタートメニューの内容等を変更できるようになります
- (3) SYBYL-X をインストールしたユーザの「スタートメニュー>>プログラム」以下に、SYBYL-X2.1.1 フォルダがありますので、それをフォルダ丸ごと「All Users」の「スタートメニュー>>プログラム」以下に移動してください
- (4) スタートメニュー操作のエクスプローラは閉じてください

### アプリケーション関連ファイルの共有設定:WindowsXP の場合

- (5) 別のエクスプローラを開き、SYBYL インストール先のディレクトリ (例 : c:\¥tripos) が見えるディレクトリ (例 : c:\¥) を開いてください
- (6) ディレクトリ c:\¥tripos をマウスの右ボタンでクリックしてメニューを開き、プロパティを呼び出してください
- (7) 『共有』タブを開き、このフォルダを共有する設定としてください
- (8) 『セキュリティ』タブを開き、SYBYL を実行するユーザアカウントの権限として「読み取りと実行」が設定されていることを確認してください
- (9) プロパティダイアログボックスで、OK を押せばこの設定が有効になります

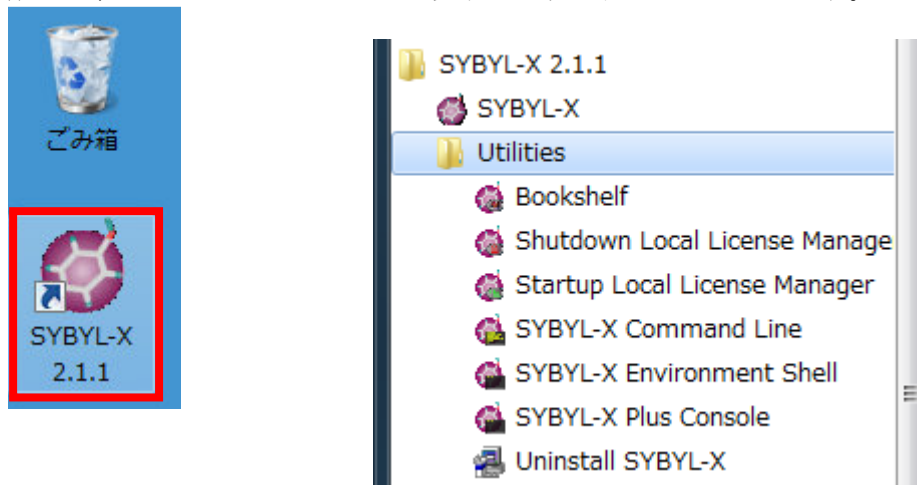
### アプリケーション関連ファイルの共有設定:Windows7 の場合

- (5) 別のエクスプローラを開き、SYBYL インストール先のディレクトリ (例 : c:\¥tripos) が見えるディレクトリ (例 : c:\¥) を開いてください
- (6) ディレクトリ c:\¥tripos をマウスの右ボタンでクリックしてメニューを開き、プロパティを呼び出してください
- (7) 『共有』タブを開き、『詳細な共有』 ボタンを押してください
- (8) 『このフォルダを共有する』にチェックを入れて OK を押してください
- (9) 『セキュリティ』タブを開き、Users グループを選択し、共有 : Tripo s への「読み取りと実行」を設定してください
- (10) プロパティダイアログボックスで、OK を押せばこの設定が有効になります

## 9 インストール後の確認と SYBYL-X の起動

### 9.1 インストール結果の確認

SYBYL-X を正常にインストールできると、Windows のデスクトップに SYBYL-X アイコンが作成され、またスタートメニューに以下のような項目が追加されます。



#### SYBYL-X2.1.1 メニュー

- ◆ SYBYL-X SYBYL-X をグラフィックモードで起動します

#### SYBYL-X2.1.1>>Utilities メニュー

- ◆ Bookshelf オンラインマニュアル(TriposBookshelf)を開きます
- ◆ Shutdown Local License Manager ライセンスサービスを停止します
- ◆ Startup Local License Manager ライセンスサービスを起動します
- ◆ SYBYL-X Command Line SYBYL-X をテキストモードで起動します
- ◆ SYBYL-X Environment Shell SYBYL-X の関連する環境を設定した Shell を起動します  
※このときの Shell は、SYBYL インストールディレクトリ内の cygwin の bash が起動します
- ◆ SYBYL-X Plus Console SYBYL-X をグラフィックモードで起動し、また独立したコンソール画面も表示します
- ◆ Uninstall SYBYL-X SYBYL-X をコンピュータから削除します

## 9.2 SYBYL-X の起動方法

### ライセンスサーバの起動

今回 SYBYL を始めて御利用になる方、および Linux/MacOSX マシンからの置き換えをご希望の方で、ライセンス請求メールを弊社宛お送りいただいた皆様には、SYBYL-X 用のライセンスキーをお送りします。ライセンスファイルにつきましては、弊社から別途お送りする手順でライセンスキーをインストールしてください。

**SYBYL-X を起動するマシンをライセンスサーバマシンとしても利用するケースで、お送りしたライセンスファイル中に『SERVER』で始まる行が含まれている場合には、SYBYL-X 起動前に以下の操作を行ってライセンスサービスを起動してください。**

**スタートメニュー>>SYBYL-X 2.1.1>>Startup Local License Manager**

※この操作は、マシンを起動したあと一度だけ実行すれば、ライセンスサービスを明示的に停止しない限り、マシンをシャットダウンするまで有効です

### SYBYL-X 起動

ライセンスサービスの起動などでエラーが表示されなければ、『SYBYL-X 2.1.1』アイコンもしくはスタートメニューの **SYBYL-X 2.1.1>>SYBYL-X** からアプリケーションを起動することができます。