

mac への xds install

初版 2018/10/29

最終改訂 2019/07/01

PF-UA PX-UG 幹事 藤橋雅宏(mfuji@kuchem.kyoto-u.ac.jp)

2018/10/27 に行われた、第三回中級者講習会での xds install の tutorial でお知らせしたことについてまとめました。間違いや OS の version による違いがあるかもしれません。テストは Mac OS 10.12.6 (sierra)で行っています。間違いやコメント等がありましたら是非お知らせ下さい。最後の方に、CentOS7 への install も少し書いておきます。

作業は管理者権限のあるアカウントで作業して下さい。
管理者権限がないと実行出来ないコマンドがあります。

◎まず、mac のターミナルを開く

以下、ターミナル内のコマンドを

\$ **command**

のように記します。最初の\$はターミナルのコマンド入力部分の右端に出ている記号で、作業時に入力する必要はありません。つまり、\$ **command** と書いてあれば、単に **command** と入力し、return key を押して下さい。

◎XDS の install

<https://strucbio.biologie.uni-konstanz.de/xdswiki/index.php/Installation>

に、従う

\$ **sudo su**

➔ ここで管理者パスワード (=いまのアカウントのパスワードのはず) が要求されます。この先のコマンドを管理者権限で実行します。

\$ **mkdir /usr/local/bin**

\$ **cd /usr/local/bin**

➔ /usr/local/bin を作成して、その directory に移動します。

\$ **curl -L -o - ftp://ftp.mpimf-heidelberg.mpg.de/pub/kabsch/XDS-OSX_64.tar.gz**

➔ ftp.mpimf-heidelberg.mpg.de から、XDS-OSX_64.tar.gz をダウンロードします。/usr/local/bin に XDS-OSX_64.tar.gz がダウンロード出来ているはずです。

ここがうまくいかない例を聞いています。その場合、ご利用中のネットワークが ftp を認めているかを、ネットワーク管理者に問い合わせるなどして調べてください。ノート PC の場合など

は、ネットワーク環境を変更する(自宅からアクセスするなど)のも、一つの対処方法になります。

```
$ tar xvf XDS-OSX_64.tar.gz
```

- ➔ ダウンロードした XDS-OSX_64.tar.gz を展開します。OS の version によっては、tar **xvf** XDS-OSX_64.tar.gz のところを、tar **xvzf** XDS-OSX_64.tar.gz でなければ上手くいかない場合もあるようです。
- ➔ この curl と tar のコマンドは、上記の xds wiki では一つのコマンドとして実施しています。どちらのやり方でも問題ないと思いますが、分けた方が trouble shooting しやすいとおもいます。

```
$ ln -sf XDS-OSX_64/* .
```

- ➔ 実行ファイルのエイリアスを作っています。

この状態で xds は install されています。試しにコマンドラインから実行する場合は、必ず

```
$ exit
```

するなどして管理者権限のない状態に戻してください。新しいターミナルを開き、そちらでテストするのも良いと思います。

◎XDS 関連 package の install

以下は、上記の xds をインストールしたのと同じ terminal を使うことを想定しています。違う terminal を使うときは、もう一度 sudo su をしてから下記コマンドを実行してください。

```
$ mkdir -p /usr/local/bin/mac_bin
```

```
$ cd /usr/local/bin/mac_bin
```

- ➔ xds をインストールする directory /usr/local/bin/mac_bin を作って、そこに移動します。インストール先の directory 名は何でも良いようなので、自分で整理しやすいようにしても良いようです。

```
$ curl -O -R ftp://turn5.biologie.uni-konstanz.de/pub/mac_bin/get_folder.sh
```

- ➔ turn5.biologie.uni-konstanz.de から、get_folder.sh をダウンロードします

```
$ chmod +x get_folder.sh
```

- ➔ get_folder.sh を実行可能にします。

```
$ ./get_folder.sh
```

- ➔ get_folder.sh を実行します。

◎.h5 を処理できるようにする。

上記.get_folder.sh の実行で、eiger のデータ(.h5 形式)も処理できるようになるという話もありますが、未検証です。もし動かない場合、下記の様に brew command を使って install します。

まず、https://brew.sh/index_ja に従って brew を install します。

上記の website の script をコピーします。

```
$ /usr/bin/ruby -e "$(curl -fsSL https://raw.githubusercontent.com/Homebrew/install/master/install)"
```

このコマンドは、管理者権限を出した terminal だと動かないことがありました。

その場合、新しい terminal を開いて実行して下さい。

続いて下記のコマンドをタイプして下さい。

```
$ sudo su
```

```
$ brew install hdf5
```

➔ システムに brew がインストールされます。

さらに、山下恵太郎さんの書かれた website

<https://github.com/keitaroyam/yamtbx/blob/master/doc/eiger-ja.md#eiger2cbf-h5toxds%E4%BA%92%E6%8F%9B>

を、参考に、eiger2cbf をインストールし、H5ToXds を作成します。

以下、上記山下さんのサイト内容の再掲となりますが、

- ・ <https://www.mrc-lmb.cam.ac.uk/harry/imosflm/ver721/downloads.html#Eiger2CBF>

の下の方、converter for Eiger Files から、OS に対応する eiger2cbf をダウンロードして下さい

- ・ 端末で path の通っているところ(例えば/usr/local/bin/mac_bin)に cd で行き、下の緑文字の部分を端末内に copy & paste してください

```
cat <<+ > H5ToXds
```

```
#!/bin/sh
```

```
eiger2cbf ¥$@ 2>/dev/null
```

```
+
```

```
chmod +x H5ToXds
```

➔ 1-4 行目で、スクリプト H5ToXds を作成します。

5 行目で作成した H5ToXds を実行形式にしています

これで、Eiger のデータを処理出来るようになると思います。

最後に、

```
$ exit
```

するなどして管理者権限のない状態にターミナルを戻してください。

Linux (CentOS7)の場合

Linux の場合も

<https://strucbio.biologie.uni-konstanz.de/xdswiki/index.php/Installation> に基本的に従って install します。

.h5 file については、brew の代わりに yum を使って処理可能にします。以下のコマンドは su や sudo を使って、管理者として実行して下さい。管理者権限について学ぶには、例えば <https://eng-entrance.com/linux-root> を読んでください。

```
$ yum -y install epel-release.noarch
```

➔ yum で epel の repository を有効にします。これをやらないと、yum で hdf5 がインストールできません。

```
$ yum -y install hdf5
```

➔ たぶんこれで eiger のデータも処理できると思います。もしダメなら

```
$ yum -y install hdf5-devel
```

も、試して下さい。

mac と同様に、eiger2cbf のインストールと H5ToXds の作成も必要になるかと思います。

こちら、install 後は

```
$ exit
```

するなどして管理者権限のない状態にターミナルを戻して下さい。