

MOE 2024.06

インストール手順書 (Windows 版)

○本編について

本編は、Windows OS (10/11) への MOE 2024.06 のインストール及び各種設定方法を解説した手順書です。他の OS への MOE のインストールは各 OS 用のインストール手順書をご覧ください。

また MOE に関するトラブルは第3章トラブルシューティングをご覧ください。

- 本編に記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
- 本編の内容は、改善のため予告なく変更されることがあります。
- 本編の内容を無断で転載することを禁止します。

MOE 2024.06 インストール手順書 (Windows 版)

目次

第 1 章 はじめに.....	3
第 1 節 本編の構成.....	4
第 2 節 インストール準備.....	4
第 2 章 一般ユーザ編.....	5
第 1 節 MOE インストール.....	6
第 2 節 各種データベースのインストール.....	22
第 3 節 RCSB Download 設定.....	26
第 3 章 管理者編.....	32
第 1 節 ライセンスサーバー設定.....	33
第 2 節 MOE/web 設定.....	50
第 3 節 MOE/smp 設定.....	64
第 4 章 トラブルシューティング.....	80

第 1 章 はじめに

第 1 節 本編の構成

第 2 節 インストール準備

第 1 節 本編の構成

本編は、対象者（一般ユーザ・管理者）を大きく 2 つに分けて各種インストール方法を解説しています。MOE をインストールして使用するのが目的の方は、第 2 章 一般ユーザ編をご覧ください。

MOE のライセンスサーバーの設定や MOE/web、MOE/smp などの他の使用モードの設定については第 3 章 管理者編をご覧ください。

また最後にトラブルシューティング (第 4 章) を載せておりますので、MOE が正常に起動しない場合や、その他のトラブルが生じた場合はこの項をご覧ください。

※ MOE を使用するためには、MOE のライセンスサーバーの設定が完了している必要があります。

※ 設定するクライアント、ライセンスサーバーの OS が異なる場合は各種 OS ごとの「MOE 2024. 06 インストール手順書」をご覧ください。

第 2 節 インストール準備

MOE のインストールには下記が必要です。ライセンスファイルについてはサーバー管理者にお問い合わせください。

1. MOE 2024. 06 の DVD-ROM、もしくは、ダウンロードしたインストーラー
2. ライセンスファイル

下記のいずれかのライセンスファイル (license.dat) が必要です。

- ・弊社より新規にご送付したもの
- ・ライセンスサーバーもしくはクライアント上で今まで使用していたもの
- ・バージョンアップもしくはライセンスの追加により再交付されたもの

MOE 2020. 09 版より 32 ビット版のバイナリを正式サポートしておりません。

第2章 一般ユーザ編

- 第1節 M0E インストール
- 第2節 各種データベースのインストール
- 第3節 RCSB Download 設定

第 1 節 MOE インストール

ここでは MOE GUI の操作をメインとする一般ユーザを対象としたインストール方法を記述しています。この章では MOE GUI のインストール方法しか述べていませんが、ライセンスサーバーや MOE/web、MOE/smp などの設定を行われる方も、まずはこの章を参照して MOE のインストールを行ってください。

「第 2 節 各種データベースのインストール」、「第 3 節 RCSB Download 設定」については必要のある方のみ設定してください。

※ ライセンスサーバー、MOE/web、MOE/smp の設定については MOE インストール後「第 2 章 管理者編」を参照してください。

[1] インストールの流れ

以下の手順に沿ってインストールを行います。今までに MOE をインストールしたことのないマシンには【新規】を、すでに過去の MOE をインストールしているマシンには【更新】の操作を行ってください。

操作	対象
1. [2] インストールマシン環境の確認	新規・更新
2. [3] インストール環境の設定	新規
3. [4] MOE 2024. 06 のインストール	新規・更新
4. [5] ライセンスの設定	新規・更新
5. [6] MOE 2024. 06 起動確認	新規・更新
6. [7] 既存 SVL プログラムの移行	更新
7. [8] パッチ情報の確認	新規・更新
8. [9] MOE 2022. 02 のアンインストール	更新

[2] インストールマシン環境の確認 新規・更新

MOE 2024. 06 のインストールを行う前に、インストールマシンの環境を確認します。
インストール環境が、次のチェック項目を全て満たしているか確認します。

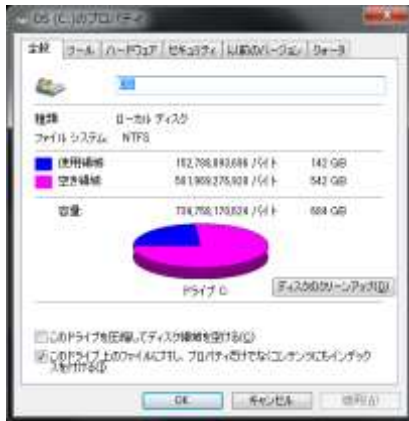
	チェック内容
チェック 1	マシン構成の確認
チェック 2	ディスクの空き容量の確認
チェック 3	ネットワーク環境の確認

チェック 1 マシン構成の確認

MOE が利用できるマシンであるか、「MOE 2024.06 システム環境解説書」を参照して確認します。

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

ディスクの空き容量を確認してください。MOE のインストールには下記のディスク容量が必要です。



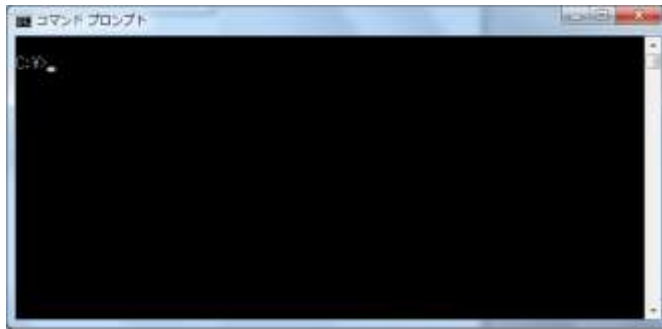
インストール内容	空き容量
MOE 最小構成（プロジェクトデータベースなし Windows 上で稼働させるファイルのみインストール）	808 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム（Windows 上で稼働させるファイルのみインストール）	26.5 GB 以上
MOE 本体のみ フルインストール	26.7 GB 以上
<推奨> MOE + 母核置換用リンカーデータベース	28.6 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース	34.2 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース + ChEMBL データベース	36.4 GB 以上

チェック 3 ネットワーク環境の確認

MOE はライセンスサーバーがライセンスの使用状況を監視および管理しているため、MOE を起動するにはライセンスサーバーとの通信が必要です。

これからインストールするマシンとライセンスサーバーが、通信可能であるか確認します。

《手順 1》 コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 2》 PING コマンドによるライセンスサーバーとの通信確認

○この手順書ではライセンスサーバーのホスト名(マシン名)を moe_server とします。

コマンドプロンプトで、下記のようにタイプします。

```
C:¥> ping moe_server (ping ホスト名)
```

もし、正常にライセンスサーバーを認識できていれば次のような応答があります。

```
C:¥>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),
    Approximate round trip times in milli-seconds:
        Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms
```

正しく認識できていない場合は、

```
C:\>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 0, Lost = 4 (100% loss),
```

と応答されます。

下記のように表示された場合はライセンスサーバーのホスト名が登録されていません。

```
C:\>ping moe_server

Ping request could not find host moe_server. Please check the name and try again.
```

ping によりライセンスサーバーから応答がない場合は、「第4章 トラブルシューティング - [1] MOE ライセンスサーバーが認識できない」を参照して下さい。

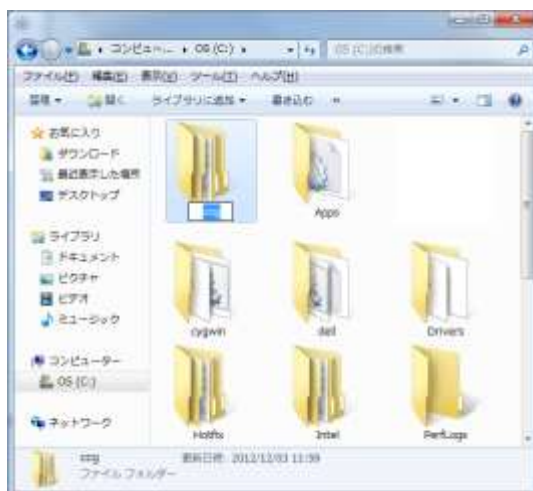
※ セキュリティ上、ファイアウォールなどで ping を許可していない場合もあります。クライアントにライセンスサーバーを登録したにもかかわらず ping での応答がない場合は、システム管理者にお問い合わせください。

[3] インストール環境の設定 新規

MOE インストールフォルダーを作成します。

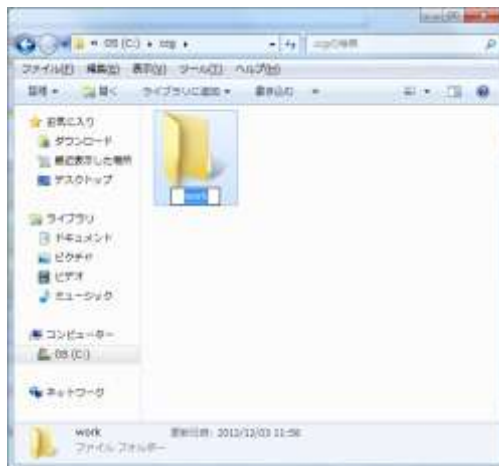
(C:) ドライブ以外に MOE をインストールする場合は、読み替えて操作を行ってください。

《手順 3》 ccg フォルダの作成



(C:) ドライブの直下に「ccg」フォルダーを作成します。

《手順 4》 作業(work) フォルダの作成



ccg フォルダの下に、「work」フォルダを作成します。

[4] MOE 2024.06 のインストール 新規 更新

MOE 2024.06 のインストールを行います。

《手順 1》 インストーラーの入手

弊社から案内したウェブサイトより、Windows 用 インストーラー `moe_2024_06_windows_installer.exe` と `moe_2024_06_installer_datafile.dat` をローカルのハードディスクの**同じ**フォルダに保存します。

(`moe_2024_06_windows_installer.exe` を **Internet Explorer** でダウンロードした場合、拡張子 (`.exe`) が除かれる場合があります。この場合は、ファイル名の最後に拡張子 `.exe` を加えた後に、インストールを実行してください。)

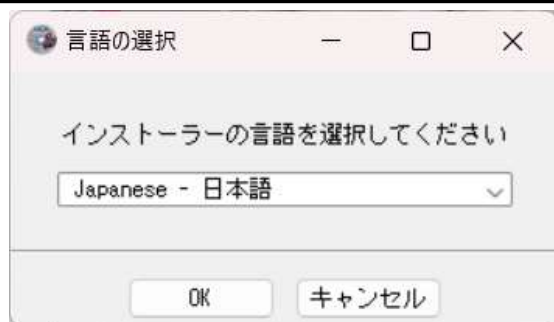


《手順 2》 インストーラーの実行

`moe_2024_06_windows_installer.exe` をダブルクリックします。

インストーラーが起動し、以下のようなパネルが開きます。

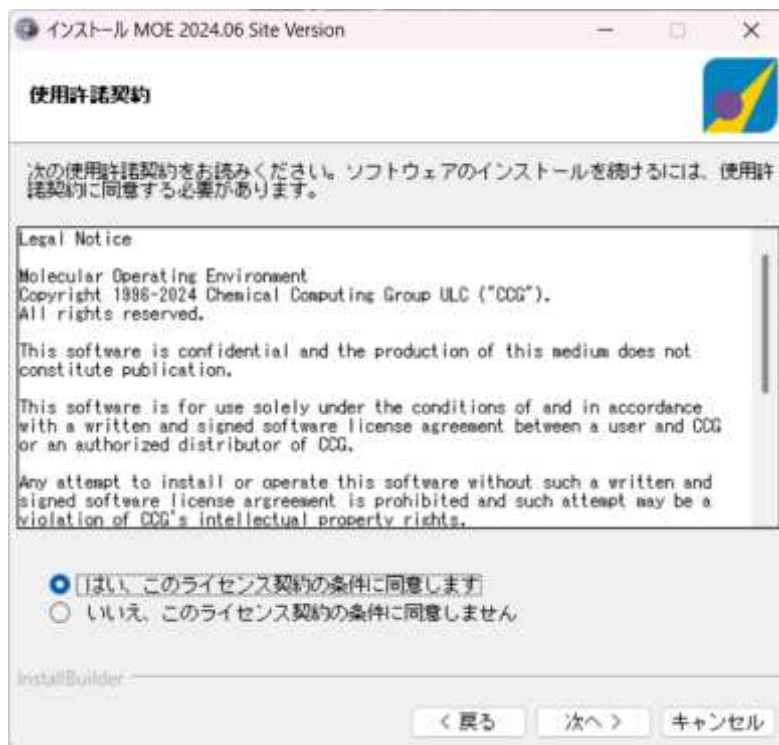
(ファイルの一時的な展開先を要求された場合は適当なフォルダを選択してください。)



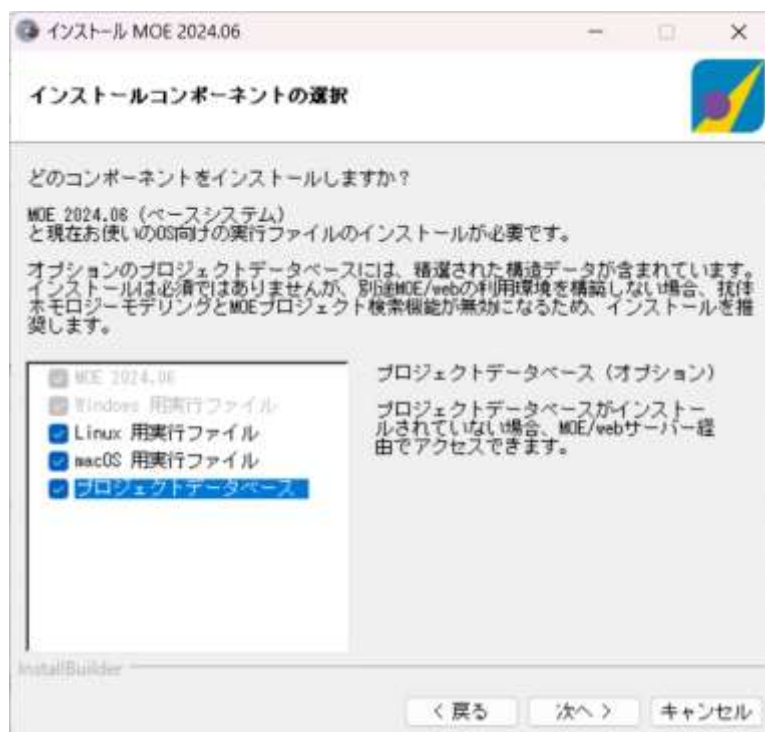
「日本語」を選択し、「OK」を押します。インストール設定画面に進みます。



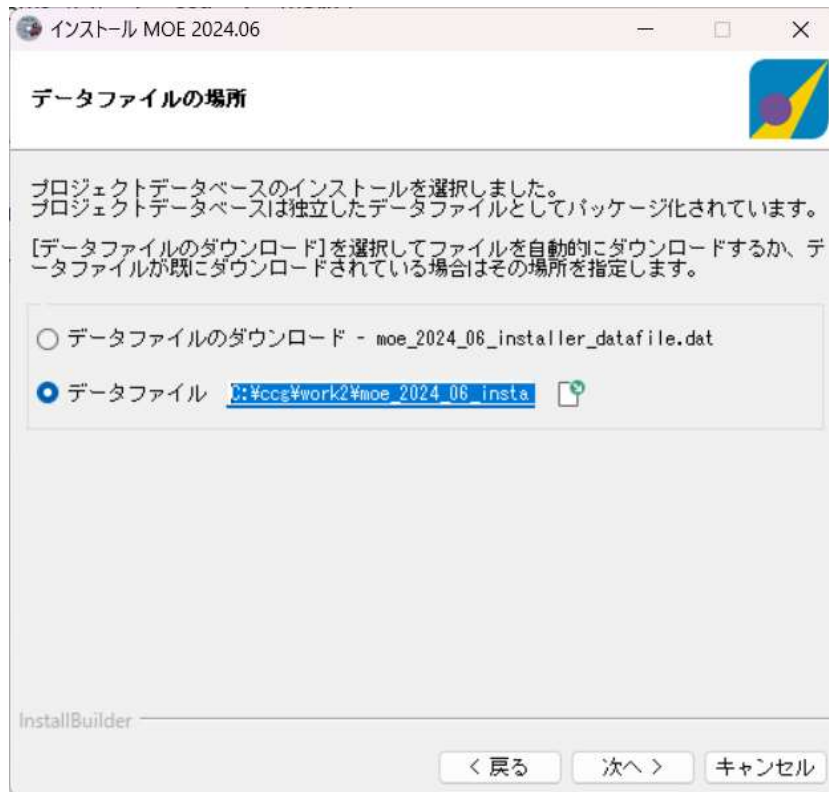
「次へ」を押します。



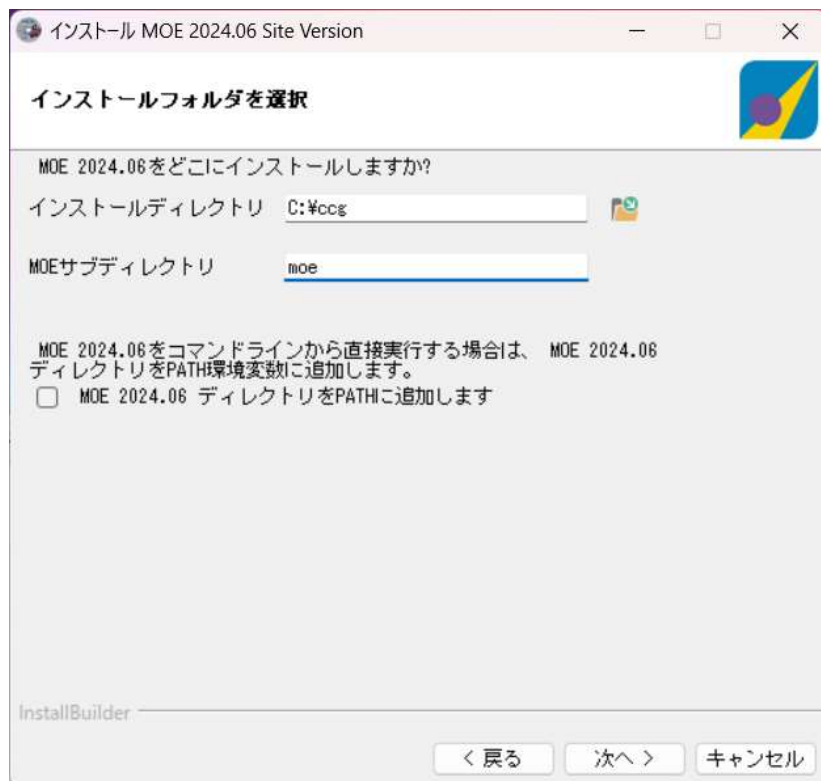
使用許諾契約 (Legal Notice) が表示されますが、MOE のライセンス契約は、別途書面にて締結させていただいておりますので、ここでは、「使用許諾契約の条項に同意する」を選択して、「次へ」を押します。



必要なコンポーネントを選択し、「次へ」をクリックします。旧バージョンで「完全なインストール」では、Linux 用、macOS 用の実行ファイルをインストールしていました。



プロジェクトデータベースのインストールを選択した場合、ローカルにあるデータファイルを使うか、ダウンロードして入手するかを選択します。ファイルサイズが 9.3 GB あるのでダウンロードして入手する場合、時間がかかることに注意してください。

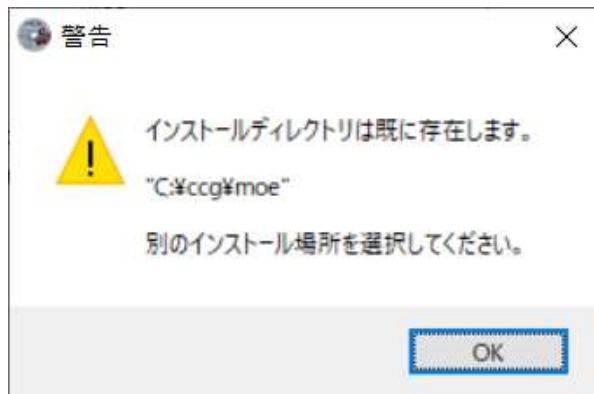


インストールディレクトリと MOE サブディレクトリの場所を尋ねられます。デフォルト設

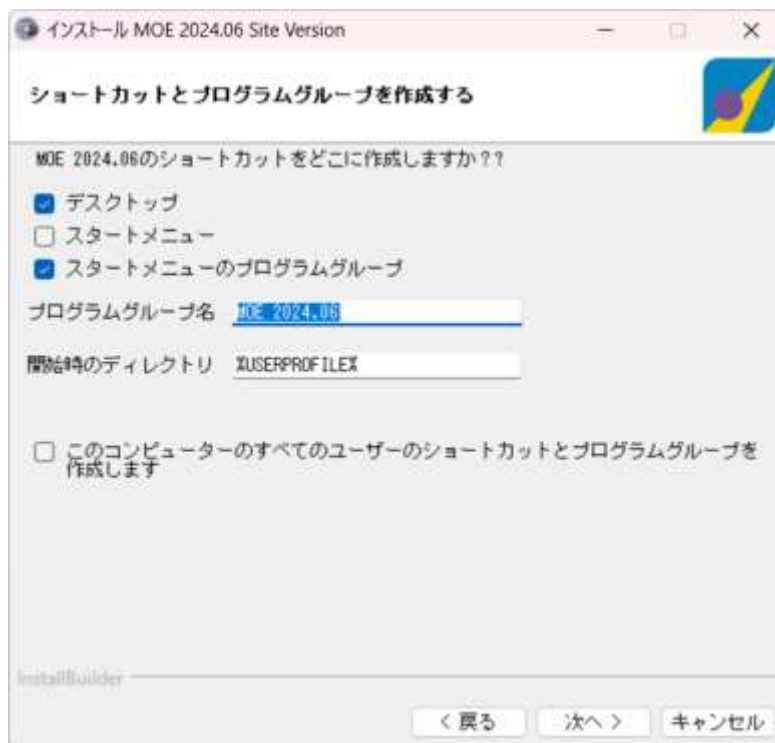
定では、インストールディレクトリは「C:\Program Files」、MOE サブディレクトリは「moe2022」となっています。弊社では、インストールディレクトリは「C:\ccg」、MOE サブディレクトリは「moe」としていただくことをおすすめしております。

パネル下部にある「MOE を PATH に追加する。」は「オフ」のまま、「次へ」を押してください。

既に C:\ccg\moe が存在する場合は、下記のような警告が表示されます。



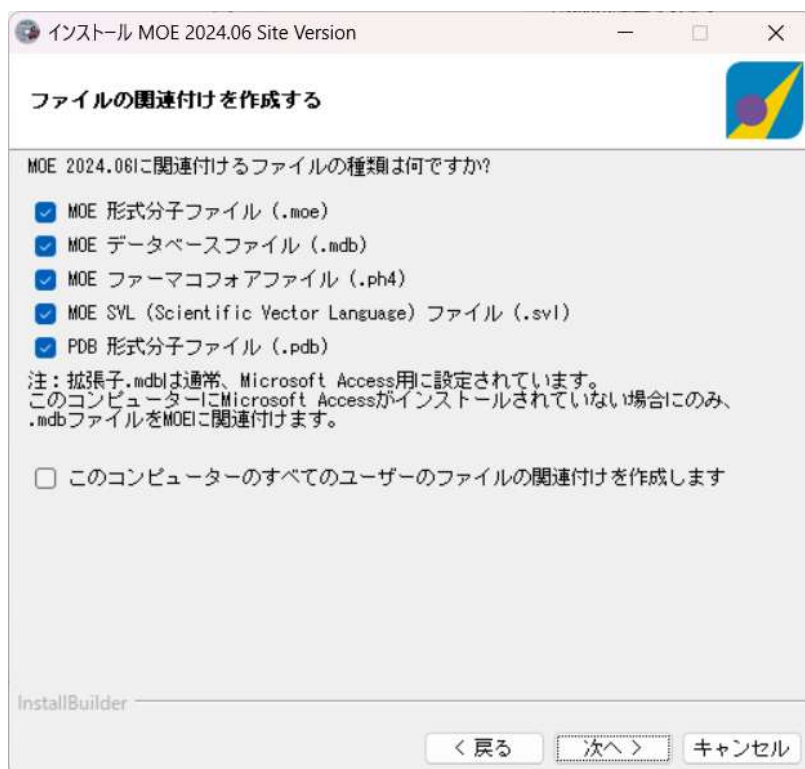
この警告が出た場合は、すでに存在する「moe」フォルダーを「moe.bak」など名称を変更します。



「スタート>すべてのプログラム」にプログラムグループを作成します。プログラムグループが不要であれば、「プログラムグループを作成しない」のチェックを ON にします。

MOE 2024. 06 のショートカットを作成する場所を指定します。MOE 起動時のフォルダー（作

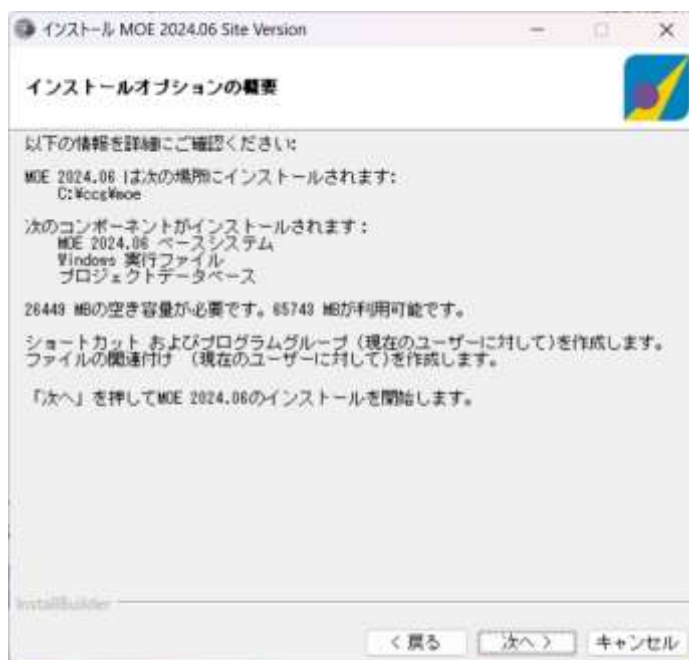
業フォルダー) は、デフォルトでは [C:\Documents and Settings\ユーザー名] または [C:\Users\ユーザー名] となっています。本手順書では [C:\ccg\work] にします。



ファイルの関連付けを行います。関連付けを行うと、インストール後ファイルをダブルクリックすることで MOE が起動し指定したファイルが自動的に開きます。MOE と関連付けさせたい拡張子にチェックを入れます。「次へ」をクリックします。



「license.dat のインストール」は、すでにフォルダーにあるライセンスファイルを MOE のインストールディレクトリにコピーします。インストール後にライセンスファイルを配置することもできます。「MOE/web サーバーURL」は MOE/web サーバーの URL を予め設定できます。インストール後に設定しても問題ありません。「Java 実行ファイル」はすでにインストールされている Java 実行ファイルのパスを指定します。



確認画面が開きます。インストールに問題がなければ「次へ」を押してインストールを開

始してください。



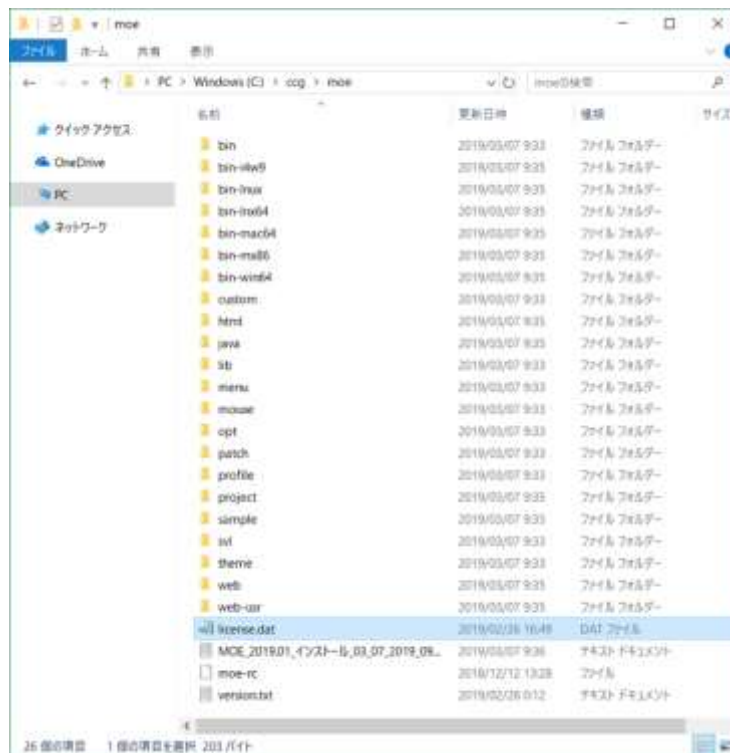
インストールは数分で終了します。



「重要な注意事項を表示」をチェックすると重要事項としてライセンスファイル、Java、サポート窓口の情報が表示されます。「終了」をクリックしてパネルを閉じます。

[5] ライセンスの設定 (インストールの際にコピーしなかった場合)

新規・更新



MOE をインストールした[C:\¥ccg¥moe]の下に、これまでお使いの MOE のライセンスファイルまたは、ライセンスサーバー上にあるライセンスファイルを保存してください。

[6] MOE 2024. 06 起動確認

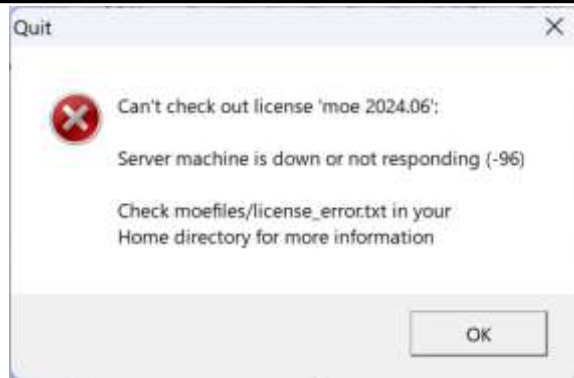
新規・更新

《手順 1》 MOE の起動

作成した「moe」のショートカットをダブルクリックして、MOE を起動させます。



正常に起動すると上のような MOE ウィンドウが表示されます。

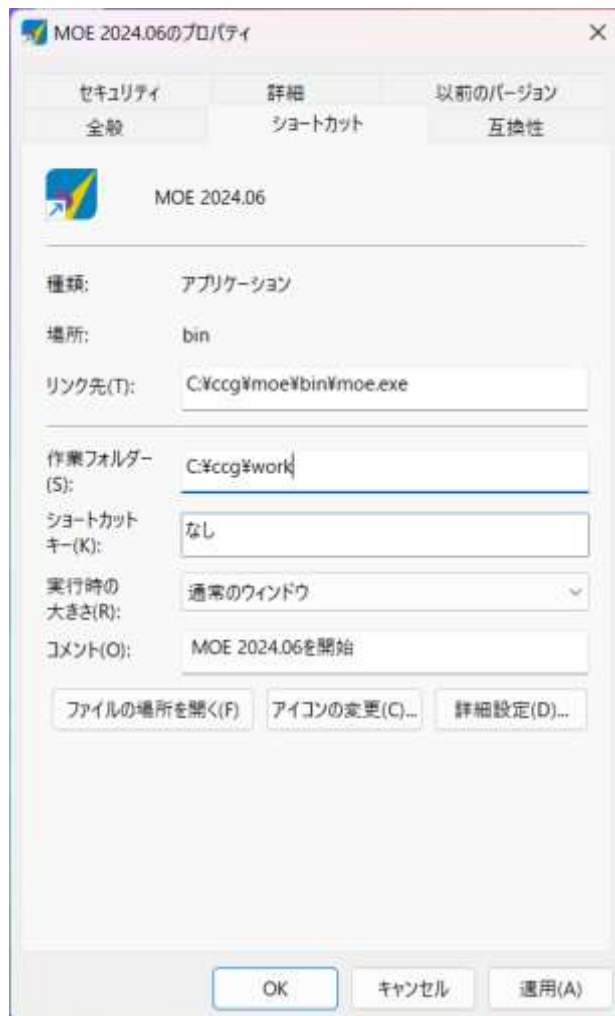


もし、上のようなエラーが表示されたら、

「[第4章 トラブルシューティング - \[2\] MOE が起動しない](#)」を参照してください。

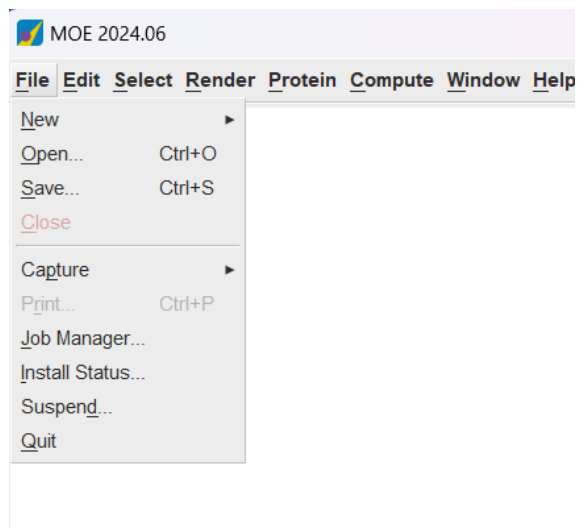
インストーラーからショートカットを作成しなかった方は、MOE 2024.06 ショートカットをマニュアルで作成します。リンク先には、`[C:¥ccg¥moe¥bin¥moe.exe]`を指定してください。

また、作業フォルダーに`[C:¥ccg¥work]`を指定してください。

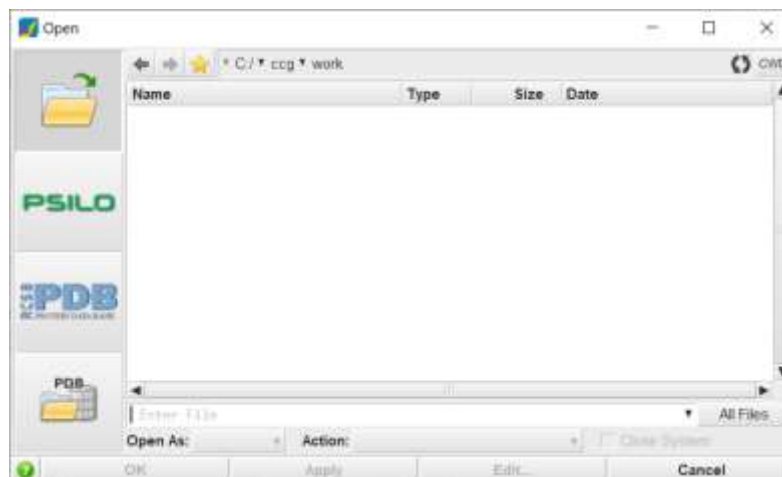


MOE ショートカットのプロパティ例

《手順 2》 作業フォルダーの確認



MOE | File | Open で、Open パネルを開きます。



Open パネルで表示されるフォルダー位置が[C:/ccg/work]になっていることを確認して下さい。

[7] 既存 SVL プログラムの移行 **更新**

すでに MOE をインストールされていた方は、バックアップフォルダーの「(仮に)moe. bak」からカスタマイズした SVL プログラム群 ([c:¥ccg¥moe. bak¥custom¥svl] 内の*. svl および run フォルダー) を [c:¥ccg¥moe¥custom¥svl] の中にコピーします。この場所に SVL プログラムを保存すると、moe 起動時に自動的にロードされます。SVL 関数の一部変更に伴い、旧バージョンで動作しても、本バージョンで動かない場合があります。弊社のホームページでソースを公開しているアドオンプログラムにつきましては、本バージョン用に改訂したプログラムを公開します。

[8] パッチ情報の確認 **新規・更新**

MOE のインストール DVD にパッチ CD が添付されていた場合は、ここでパッチ CD を参照して MOE

2024.06 を最新版に更新してください。

また、弊社の Web サイトにて M0E の最新パッチ情報を掲載することがあります。

M0E 2024.06 に対する修正ファイルについてご確認ください。必要に応じて修正ファイルを適用し、M0E 2024.06 の更新を行ってください。

[9] M0E 旧バージョンのアンインストール 更新

M0E 2024.06 が正常に動作することを確認した後、M0E 2022.02 が不要な場合はフォルダー（例 moe.bak）ごと削除して下さい。

以上で M0E のインストールは、完了です。

第 2 節 各種データベースのインストール

MOE に付属するオプションデータベースのインストールについて説明します。

データベース概要	ファイル名	必要ディスク容量
母核置換用リンカーデータベース	linker_2010_10.mdb	1.8 GB
Lead-like 化合物配座解析データベース	leadlike_conf_001~008.mdb	5.2 GB
ChEMBL フラグメントデータベース	chemblr23_frgs.mdb	2.1 GB
ChEMBL 低分子データベース	chemblr23_150.mdb	64 MB

母核置換用リンカーデータベース、Lead-like 化合物配座解析データベースは前バージョン MOE 2022. 02 で提供されたものと同一です。

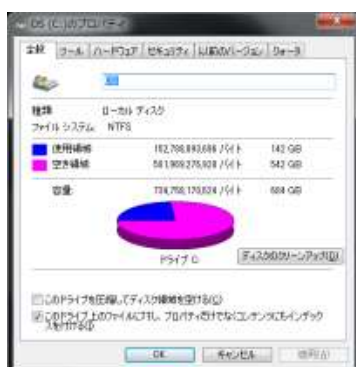
既にインストールされている方や希望されない方はデータベースのインストールは必要ありません。

それぞれのデータベースの新規インストール・更新は下記の項目を参照してください。

- [1] ディスクの空き容量の確認【全データベース共通】
- [2] 母核置換用リンカーデータベースのインストール
- [3] Lead-like 化合物配座解析データベースのインストール
- [4] ChEMBL フラグメントデータベースのインストール
- [5] ChEMBL 低分子データベースのインストール

[1] ディスクの空き容量の確認

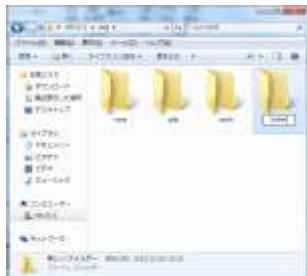
マイ コンピューターの「ローカル ディスクのプロパティ」でディスクの空き容量を確認します。



[2] 母核置換用リンカーデータベースのインストール

《手順 1》 リンカー フォルダの作成 新規

リンカーデータベースを保存する場所として リンカー フォルダ[C:\ccg¥linker]を作成します。



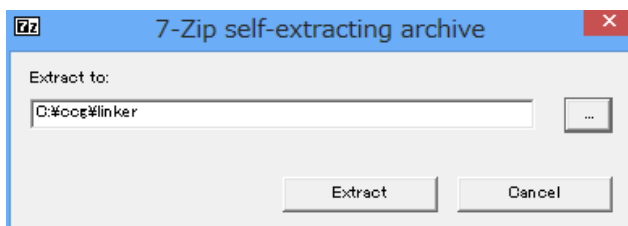
《手順 2》 linker_2010_10 圧縮ファイルの配置 新規

ダウンロードして取得した linker_2010_10.exe、もしくは MOE Databases DVD-ROM に入っている linker_2010_10.mdb.gz を linker フォルダに配置します。

《手順 3》 ファイルの解凍 新規

[linker_2010_10.exe の解凍]

解凍先に リンカー フォルダ[C:\ccg¥linker]を指定して、「Extract」をクリックしてください。解凍後、linker_2010_10.exe を削除してください。



[linker_2010_10.mdb.gz の解凍]

1. コマンドプロンプトを開きます。
2. linker フォルダ[C:\ccg¥linker]に移動します。
3. 次のコマンドを入力し解凍します。

```
C:\ccg¥moe¥bin-win64¥gzip.exe -d linker_2010_10.mdb.gz
```

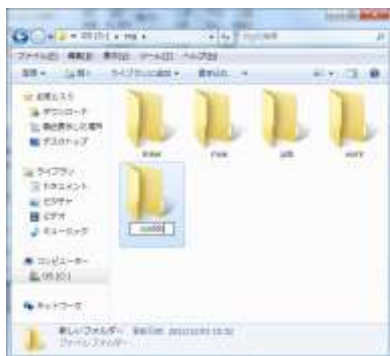
```
C:\>cd C:\ccg¥linker  
C:\ccg¥linker> C:\ccg¥moe¥bin-win64¥gzip.exe -d linker_2010_10.mdb.gz
```

以上でリンカーデータベースのインストールは完了です。

[3] Lead-like 化合物配座解析データベースのインストール

《手順 1》 Lead-like 化合物配座解析データベースのインストール環境の設定 新規

データを保存する場所として confdb フォルダ [C:¥ccg¥confdb] を作成します。

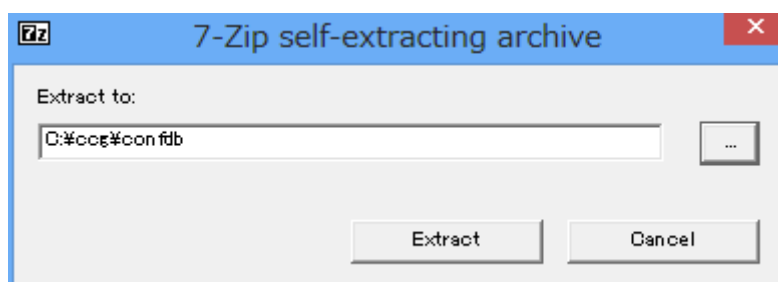


《手順 2》 leadlike_conf.exe の実行 新規

ダウンロードして取得した、もしくは MOE Databases DVD-ROM に入っている leadlike_conf.exe を開いてください。

《手順 3》 配座解析データベースの解凍 新規

解凍先に confdb フォルダ [C:¥ccg¥confdb] を指定して、「Extract」をクリックしてください。leadlike_conf_001.mdb~008.mdb の 8 個のファイルが作成されます。解凍後、leadlike_conf.exe を削除してください。

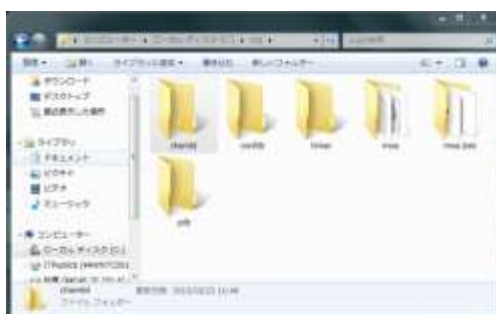


以上で配座解析データのインストールは完了です。

[4] ChEMBL フラグメントデータベースのインストール

《手順 1》 ChEMBL フラグメントデータベースのインストール環境の設定 新規

データを保存する場所として chembl フォルダ [C:¥ccg¥chembl] を作成します。



《手順 2》 chemblr23_frgs 圧縮ファイルの配置 新規

ダウンロードして取得した、もしくは DVD-ROM に入っている chemblr23_frgs.mdb.gz を chembl フォルダ [C:\ccg\chembl] に配置します。

《手順 3》 ChEMBL フラグメントデータベースの解凍 新規

[chemblr23_frgs.mdb.gz の解凍]

1. コマンドプロンプトを開きます。
2. chembl フォルダ [C:\ccg\chembl] に移動します。
3. 次のコマンドを入力し解凍します。

「C:\ccg\moe\bin-win64\gzip.exe -d chemblr23_frgs.mdb.gz」

```
C:\>cd C:\ccg\chembl
```

```
C:\ccg\chembl> C:\ccg\moe\bin-win64\gzip.exe -d chemblr23_frgs.mdb.gz
```

以上で ChEMBL フラグメントデータベースのインストールは完了です。

[5] ChEMBL 低分子（分子量 150 以下）データベースのインストール

《手順 1》 ChEMBL 低分子データベースのインストール環境の設定 新規

データを保存する場所として chembl フォルダ [C:\ccg\chembl] を作成します。

《手順 2》 chemblr23_150 圧縮ファイルの配置 新規

ダウンロードして取得した、もしくは DVD-ROM に入っている chemblr23_150.mdb.gz を chembl フォルダ [C:\ccg\chembl] に配置します。

《手順 3》 ChEMBL 低分子データベースの解凍 新規

[chemblr23_150.mdb.gz の解凍]

1. コマンドプロンプトを開きます。
2. chembl フォルダ [C:\ccg\chembl] に移動します。
3. 次のコマンドを入力し解凍します。

「C:\ccg\moe\bin-win64\gzip.exe -d chemblr23_150.mdb.gz」

```
C:\>cd C:\ccg\chembl
```

```
C:\ccg\chembl> C:\ccg\moe\bin-win64\gzip.exe -d chemblr23_150.mdb.gz
```

以上で ChEMBL 低分子データベースのインストールは完了です。

第 3 節 RCSB Download 設定

RCSB Download とは RCSB Protein Data Bank の Web サイトより MOE を経由して直接 PDB ファイルをダウンロードする機能です。この機能を使用するためには下記の設定が必要です。使用されたい方のみ設定を行ってください。

各ユーザのネットワーク環境によってはセキュリティ対策のためにプロキシサーバーが設置されている可能性があります。このような環境で RCSB Download 機能を使用する場合はプロキシ設定が必要です。

- ※ プロキシサーバーの設定が特にない場合は設定不要です。
- ※ プロキシサーバーの詳細は、システム管理者にお問い合わせください。

【RCSB Download の実行環境】

○この手順書では、以下の構成のマシン環境に RCSB Download を設定します。

機能	構成
プロキシサーバー IP アドレス	192. 168. 10. 10
プロキシサーバー ポート番号	8800
プロキシサーバー ユーザ名	moe
プロキシサーバー ユーザパスワード	password
自動構成スクリプト	http://192. 168. 10. 11/proxy. pac

- ※ プロキシサーバーの詳細は、システム管理者にお問い合わせください。

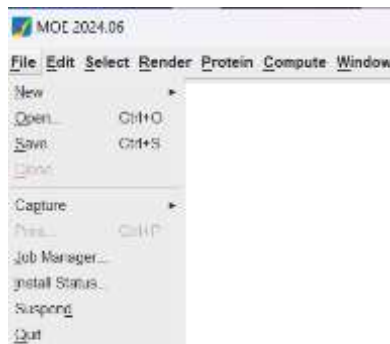
[1] PDB ファイルのダウンロード確認

インターネットへの接続において、既定の設定ではインターネットオプションの設定を利用します。Internet Explorer で、すでにインターネットがご利用可能であれば、MOE 上でのプロキシ設定は不要です。以下では PDB ファイルをダウンロードしてプロキシ設定に問題ないか確認します。

《手順 1》 MOE の起動

moe アイコンをダブルクリックして、MOE を起動させます。

《手順 2》 Open パネルを開く



MOE | File | Open で、Open パネルを開きます。

《手順 3》 PDB ファイルのダウンロードリストの取得

パネル左の PDB ボタンを押します。



最初にデータを読み込む際は時間がかかる場合があります。

正常に起動すると上図のウィンドウの様に PDB リストが表示されます。

新規に MOE をインストールした場合は、通信速度にもよりますが、

PDB リストの読み込みに数分かかる場合があります。

エラーメッセージが表示される場合は、以下のプロキシ設定を行ってください。

〔2〕プロキシ設定

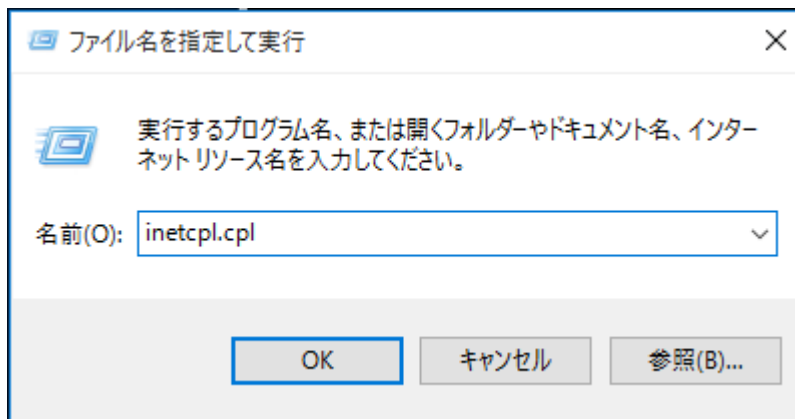
RCSB Download 機能を使用するのに必要なプロキシサーバーの設定を MOE に反映させます。**既定の設定ではエラーメッセージが表示される場合に行ってください。**

詳細は、インストールフォルダー内の html/appendix/settings. htm の Proxy Settings をご参照ください。

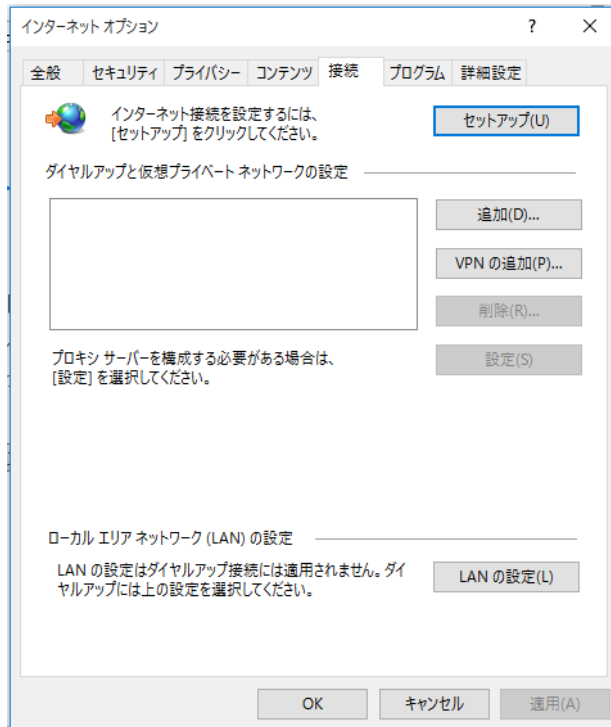
まず、プロキシ設定に必要なプロキシサーバーの情報を確認します。

《手順 1》 インターネットオプションの起動

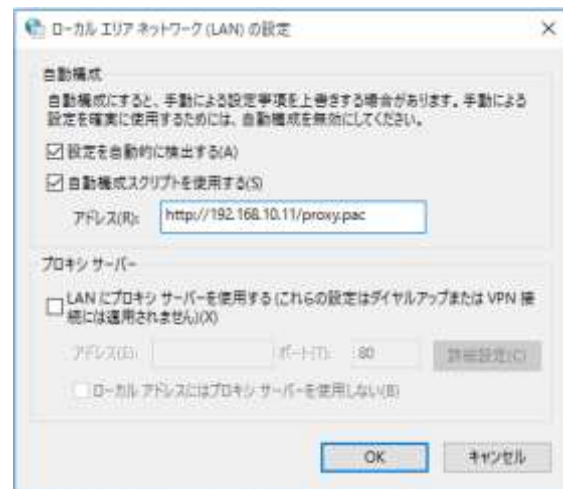
キーボードの Windows キーと R キー同時押しします。



「inetcpl.cpl」を指定して、「OK」をクリックします。



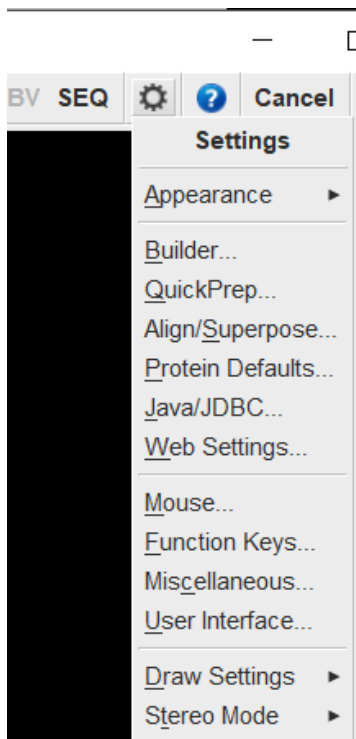
接続タブの LAN の設定をクリックします。



左のようにプロキシサーバーをマニュアルで設定されている場合は、「**マニュアルでの設定**」をご参照ください。

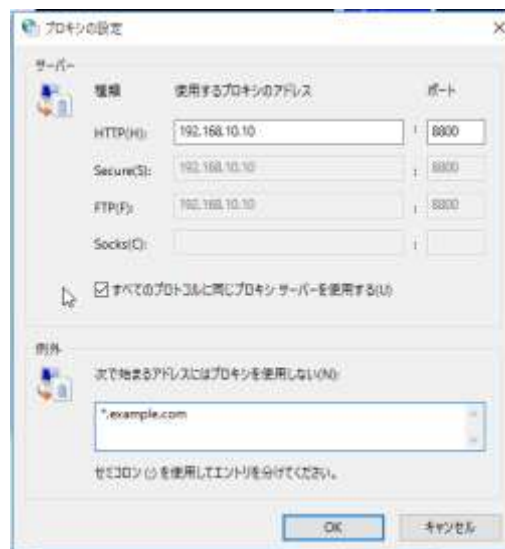
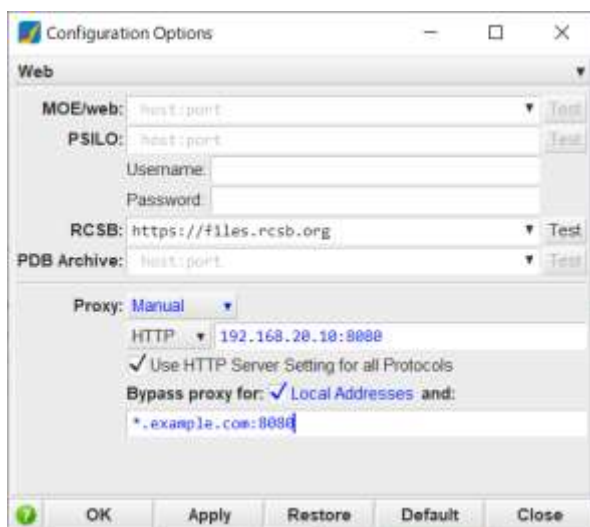
右のように自動構成スクリプトを使用している場合は、「**自動構成スクリプトの設定**」をご確認ください。

《手順 2》 プロキシ設定



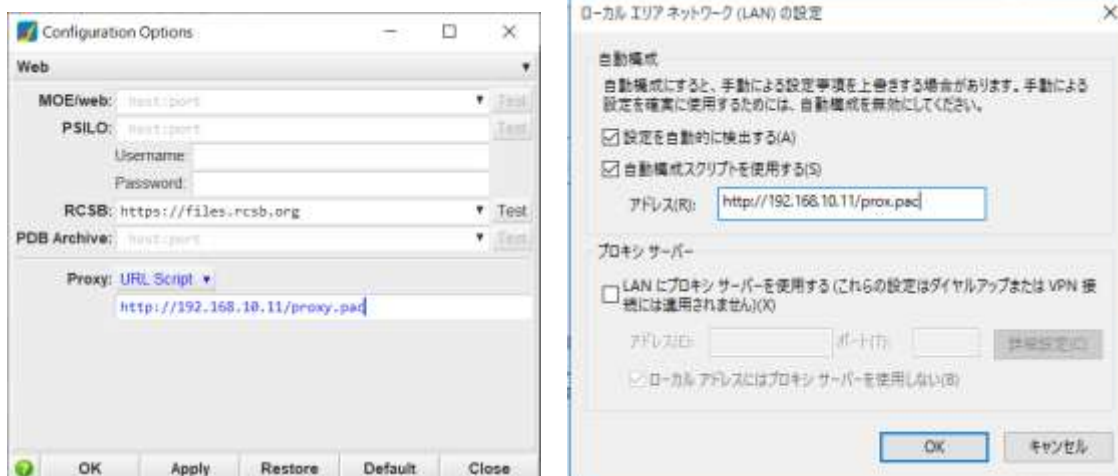
MOE | Settings | Web Settings をクリックします。

[マニュアルでの設定]



左のように Proxy:に **Manual** を選択し、プロキシサーバーのアドレスとポート番号を指定します。
「OK」をクリックします。
(右はインターネットオプションの接続タブの LAN 設定のプロキシサーバーの詳細設定です。)

[自動構成スクリプトの設定]



左のように Proxy:に URL Script を選択し、自動構成スクリプトを指定します。

「OK」をクリックします。

(右はインターネットオプションの接続タブの LAN 設定です。)

設定後、「[1] PDB ファイルのダウンロード確認」を再度実施します。

第 3 章 管理者編

第 1 節 ライセンスサーバー設定

第 2 節 MOE/web 設定

第 3 節 MOE/smp 設定

第 1 節 ライセンスサーバー設定

M0E を使用するためには、弊社に登録した M0E ライセンスサーバーで M0E のライセンス使用状態を管理するためのライセンスサービスを設定する必要があります。ライセンスサーバーを設定することで、M0E がインストールされているネットワーク上のどのマシンからでも M0E を使用することが可能になります。

この作業は、弊社に登録されている M0E ライセンスサーバーのみ行ってください。

※ 詳細は、M0E のインストールフォルダーの `html/install/license_install.htm` をご参照ください。

※ M0E 2024.06 では M0E ライセンス管理システムにおいて、利用可能な M0E のバージョンを制御します。M0E リリース時の際に付属する FlexNet Publisher を使用しないと、最新版の M0E を利用できなくなります。FlexNet Publisher アップデートした場合、ライセンスファイルのフォーマットが同一であれば、旧バージョンの M0E を利用することが可能です。

M0E 2024.06 のライセンス管理は、Flexera 社の FlexNet v. 11.18.1 を利用しています。ライセンスサーバーの FlexNet のバージョンが古く、M0E のバージョンが新しい場合、エラーコード-83 を返します。

[1] ライセンスサーバー設定の流れ

ライセンスサーバー設定の内容は、以下の 4 つに分けられています。下記の対象者はそれぞれの手順に従ってライセンスサーバー設定を行ってください。

【ライセンスサーバーの新規設定】

対象者 M0E を新規購入された方、または M0E のライセンスサーバーを変更された方。

1. [2] ライセンスサーバー環境の確認
2. [5] M0E 2024.06 のインストール
3. [6] ライセンスファイルの編集とインストール

4. [7] ライセンスサービスの設定
5. [8] ライセンスサービスの起動
6. [9] MOE 2024. 06 起動確認
7. [10] パッチ情報の確認

【MOE のバージョンアップ】

対象者 以前のバージョンから MOE 2024. 06 にバージョンアップされる方。

1. [2] ライセンスサーバー環境の確認
2. [3] ライセンスサービスの停止
3. [4] ライセンスサービスの削除
4. [5] MOE 2024. 06 のインストール
5. [6] ライセンスファイルの編集とインストール
6. [7] ライセンスサービスの設定
7. [8] ライセンスサービスの起動
8. [9] MOE 2024. 06 起動確認
9. [10] パッチ情報の確認

【ライセンスファイルの更新】

対象者 ライセンスファイルを再交付された方。

1. [2] ライセンスサーバー環境の確認
2. [3] ライセンスサービスの停止
3. [6] ライセンスファイルの編集とインストール
4. [8] ライセンスサービスの起動
5. [9] MOE 2024. 06 起動確認

【ライセンスサービスの削除】

対象者 ライセンスサーバーの変更によりライセンスサービスを削除される方。MOE の使用を終了される方。

1. [2] ライセンスサーバー環境の確認
2. [3] ライセンスサービスの停止
3. [4] ライセンスサービスの削除

[2] ライセンスサーバー環境の確認 **ライセンスサーバーの新規設定・MOE のバージョンアップ・**
ライセンスファイルの更新・ライセンスサービスの削除

ライセンスサーバーの環境が、下記のチェック項目を全て満たしているか確認します。

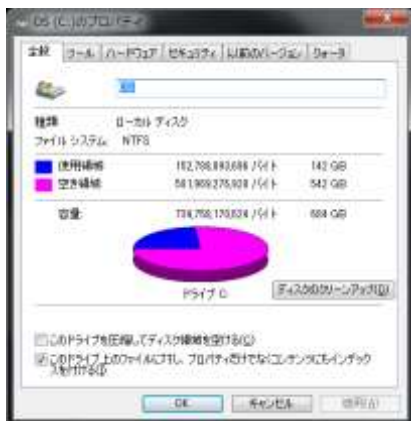
	チェック内容
チェック 1	マシン構成の確認
チェック 2	ディスクの空き容量の確認
チェック 3	ユーザ権限の確認
チェック 4	ネットワーク機能の確認
チェック 5	MOE の稼動停止

チェック 1 マシン構成の確認

MOE が利用できるマシンであるか、「MOE 2024. 06 システム環境解説書」を参照して確認します。

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

ディスクの空き容量を確認してください。MOE のインストールには下記のディスク容量が必要です。



○この手順書では、(C:) ドライブに MOE をインストールします。

MOE をインストールするには以下の空き容量が必要です。

インストール内容	空き容量
MOE 最小構成（プロジェクトデータベースなし Windows 上で稼動させるファイルのみインストール）	808 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム（Windows 上で稼動させるファイルのみインストール）	26.5 GB 以上
MOE 本体のみ フルインストール	26.7 GB 以上
<推奨> MOE + 母核置換用リンカーデータベース	28.6 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース	34.2 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース + ChEMBL データベース	36.4 GB 以上

-
- ※ ライセンスサーバー上でも MOE を使用する場合は<推奨>の構成をお薦めします。
- ※ ライセンスシステムのみインストールする場合は下記のファイルを展開してご利用ください。
- MOE をインストールした場合は、必要ありません。
- ・moe_2024_license_manager_11.18.1.tgz (10.4 MB)
 - ・moe_2024_license_manager_11.18.1.zip (10.4 MB)
- 展開すると次のフォルダーとファイルが現れます。
- (フォルダー) bin、bin-armm、bin-lnx64、bin-win64、bin-mac64、html
- (ファイル) license.dat、chemcomp-licadmin.service.cfg、lm_version.txt
- moe2024_standalone_license_manager_guide.htm、chemcompd.opt
- 「C:\ccg\moe\lm」となるように「lm」フォルダーを作成し、これらのフォルダーとファイルを格納します。

チェック 3 ユーザ権限の確認

Administrator (管理者) 権限を持つユーザでログオンします。

MOE のライセンスサーバーを設定するには、Administrator (管理者) 権限が必要です。

チェック 4 ネットワーク環境の確認

MOE ではライセンスサーバーがライセンスの使用状況を監視し、管理を行っており、計算を行う MOE クライアントとライセンスサーバーはたえず通信可能でなければなりません。もしライセンスサーバー上でファイアウォールの機能が有効の場合、クライアントからの通信を遮断してしまう恐れがあります。

ライセンスサーバー上で、ファイアウォールを設定している場合は、「第 4 章 トラブルシューティング、[4] Windows ファイアウォール設定によるエラー(-96)」を参照し対処してください。

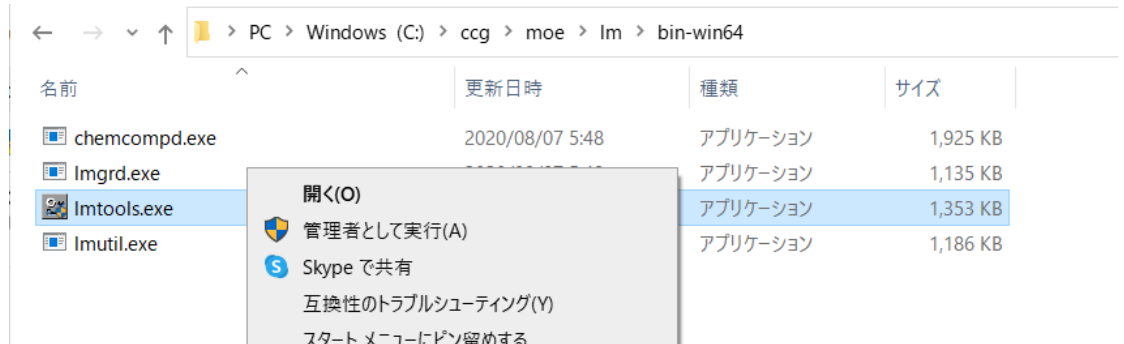
チェック 5 MOE の稼働停止

現在、ネットワーク内で使用している「全ての MOE」を終了してください。

[3] ライセンスサービスの停止 MOE のバージョンアップ・ライセンスファイルの更新・ ライセンスサービスの削除

現在、稼働しているライセンスサービスを停止します。

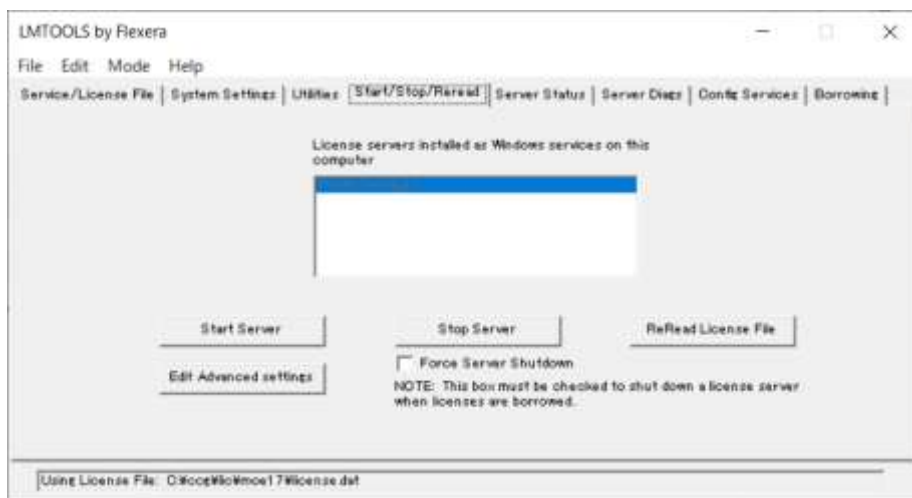
《手順 1》 lmtools の起動



[C:\Program Files\moe\lm\bin-win64] フォルダの「lmtools.exe」を右クリックし、現れるメニューの中から「管理者として実行(A)」を選択します。実行を許可するかどうかの旨が表示された場合、許可を選択してください。また、この操作中に管理者としての認証が必要な場合があります。また、右クリックメニューに「管理者として実行(A)」の選択肢が無い場合は、「第4章 トラブルシューティング、[6] Windows で LMTTOOLS の設定ができない」を参照の上、Administrator でログインした状態で、「lmtools.exe」をダブルクリックして起動してください。

《手順 2》 ライセンスサービスの停止

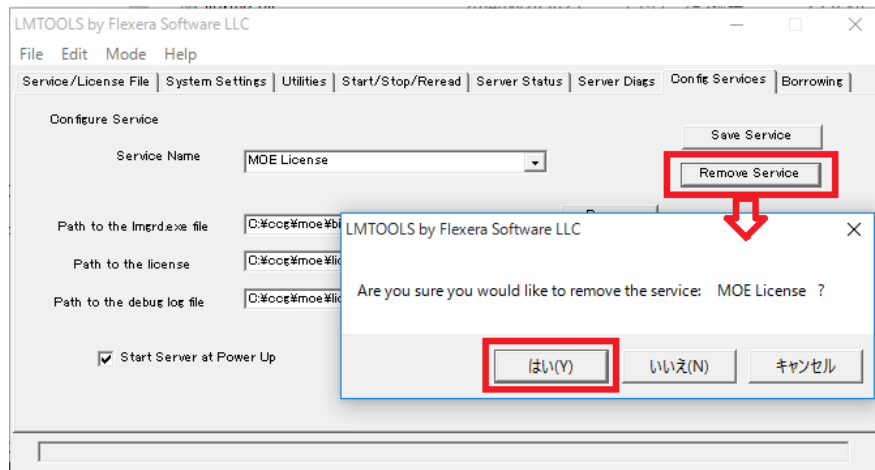
「Start/Stop/Reload」のタブに切り替えます。「Stop Server」を押します。（※古いバージョンを弊社提供の手順書に従ってインストールされた場合、サービス名は「MOE License」です。）



[4] ライセンスサービスの削除 MOE のバージョンアップ・ライセンスサービスの削除

現在、稼動しているライセンスサービスを削除します。

《手順 1》 ライセンスサービスの削除



「Config Services」タブをクリックすると上のような内容が表示されます。「Remove Service」ボタンをクリックして、表示された確認画面では「はい」を選択してください。
 ※今後このサーバー上で MOE を使用されない方は、MOE のフォルダーごと削除してください。

[5] MOE 2024. 06 のインストール ライセンスサーバーの新規設定・MOE のバージョンアップ

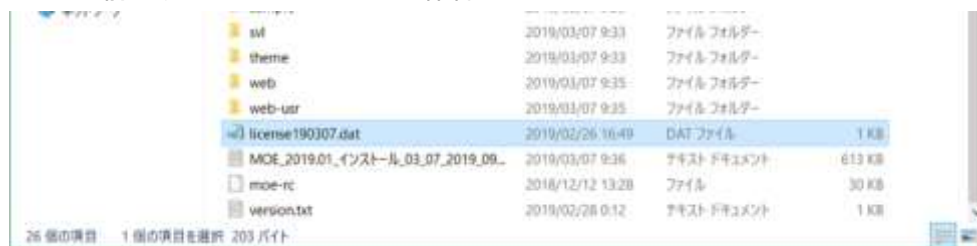
[第1章 第1節 MOE インストール]を参考にして MOE をインストールして下さい。

○この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:\%ccg%\moe] にインストールします。

「第2章 第1節 [5] ライセンスの設定」以降の作業は、必要ありません。

[6] ライセンスファイルの編集とインストール ライセンスサーバーの新規設定・ MOE のバージョンアップ・ライセンスファイルの更新

《手順 1》 以前のライセンスファイルの保管



現在のライセンスファイル license.dat の名前を license_YYMMDD.dat (年月日) 等に変更し、ライセンスファイルの履歴として保管します。

[注意] MOE 2024. 06 にバージョンアップをされた方は、以前使用していたライセンスファイルをコピーしてご利用ください。この後の手順 [2] と [3] は必要ありません。

《手順 2》 ライセンスファイルの作成・編集

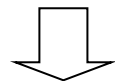
弊社よりお送りしたライセンスファイル license.dat を [C:\%ccg%\moe] にコピーします。

もし弊社よりメールにて下記のような書式でライセンス情報をお送りした場合は、その情報

をワードパッドやメモ帳などでコピーし、新規にlicense.datの名前でファイルを作成してください。

弊社よりお送りしたライセンスファイルは以下のような書式になっています。Windowsマシンをライセンスサーバーとして利用する場合は、ファイル3行目のDAEMON行をワードパッドもしくはメモ帳を使用して編集してください。 ※Microsoft Wordでは、開かないで下さい。

```
SERVER MOE_SERVER 09AF1234B234 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/lm/bin/chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2025.01 31-dec-2024 6 SIGN="AE86 49E6 122A 3AAA ¥
          3CBC 2345 8765 A677 2B1A 5963 B777 002A AB36 4649 345F 1236 ¥
          123A 4222 1233 22C2 888E"
```

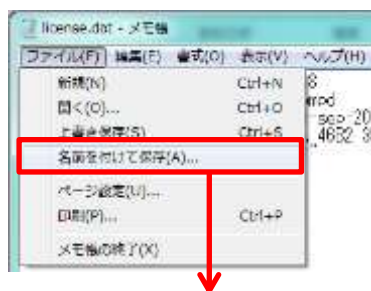


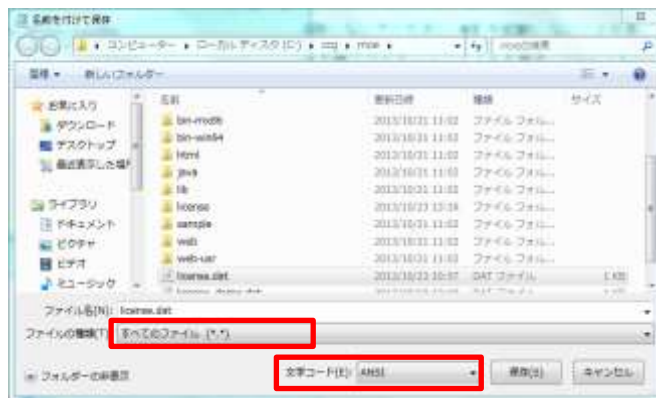
編集

```
SERVER MOE_SERVER 09AF1234B234 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd C:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2025.01 31-dec-2024 6 SIGN="A896 49E6 122A 3AAA ¥
          3CBC 2345 8765 A677 2B1A 5963 B790 002A AB36 4649 345F 1236 ¥
          123A 4222 1233 22C2 888E"
```

※ ライセンスファイルの詳細は「[11] ライセンス管理システム補足説明」を参照して下さい。

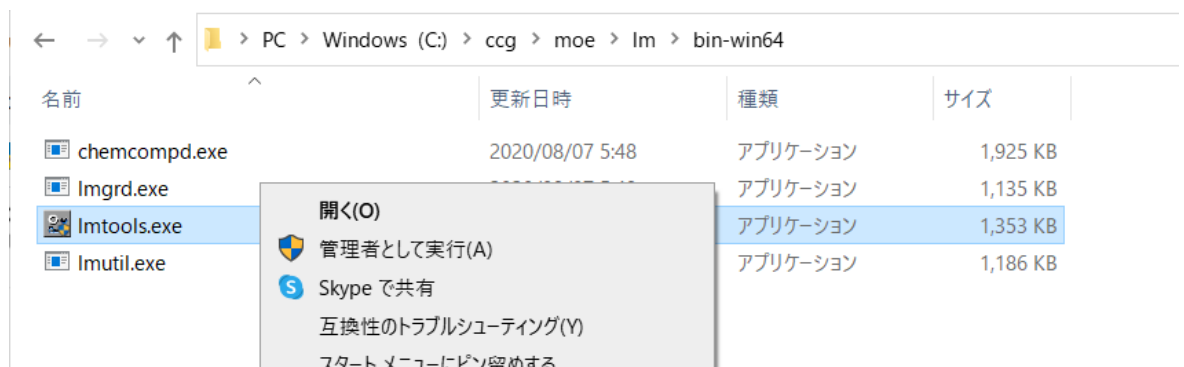
注意：ライセンスファイルは、文字コード ANSI のプレーンテキストとして保存してください。UTF-8 や Unicode などほかの文字コードで保存しないでください。MOE が起動しないことがあります。文字コードを確認するためには、メモ帳でライセンスファイルを開き、「ファイル」メニューから「名前を付けて保存」を選択します。表示されたパネルの下部の「文字コード」をご参照ください。





〔7〕ライセンスサービスの設定 ライセンスサーバーの新規設定・MOE のバージョンアップ

《手順 1》 LMTTOOLS の起動

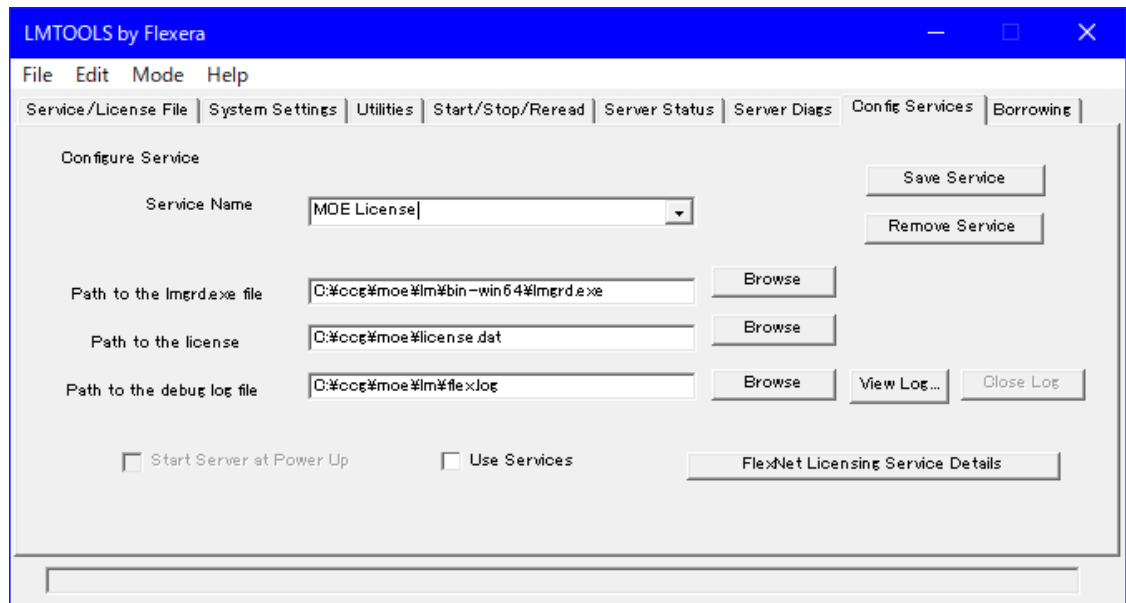


[C:\¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64] フォルダの「lmttools.exe」を右クリックし、現れるメニューの中から「管理者として実行(A)」を選択します。実行を許可するかどうかの旨が表示された場合、許可を選択してください。また、この操作中に管理者としての認証が必要な場合があります。また、Windows Vista で右クリックメニューに「管理者として実行(A)」の選択肢が無い場合は、「第4章 トラブルシューティング - [6] Windows で LMTTOOLS の設定ができない」を参照の上、Administrator でログインした状態で、「lmttools.exe」をダブルクリックして起動してください。

《手順 2》 ライセンスサービス情報の設定

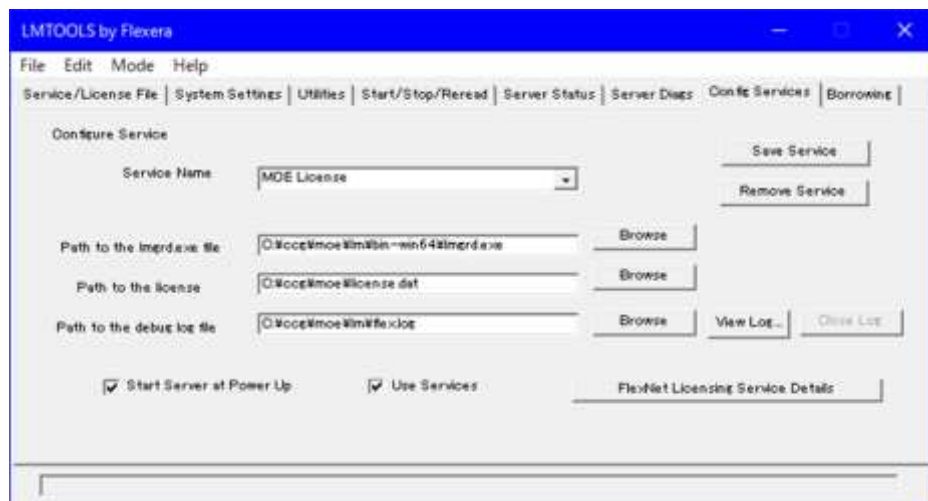
「Config Services」のタブに移動し、必要な情報を入力します。

以下のように入力してください。

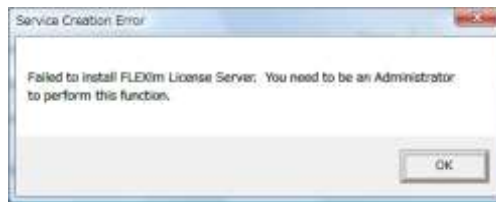


- *Service Name* 「MOE License」
- *Path to the lmgrd.exe file* 「C:\ccg\moe\lm\bin-win64\lmgrd.exe」
- *Path to the license* 「C:\ccg\moe\license.dat」
- *Path to the debug.log file* 「C:\ccg\moe\lm\flex.log」

《手順 3》 ライセンスサービス起動の設定

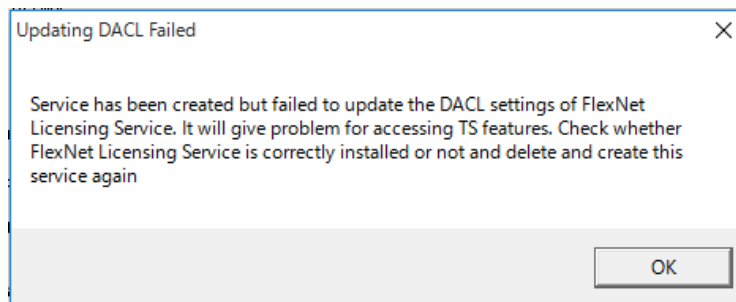


まず下部の「Use Services」のチェックボックスをオンにします。
次に「Start Server at Power Up」のチェックボックスをオンにします。
最後に、右上の「Save Service」ボタンをクリックして設定を保存します。

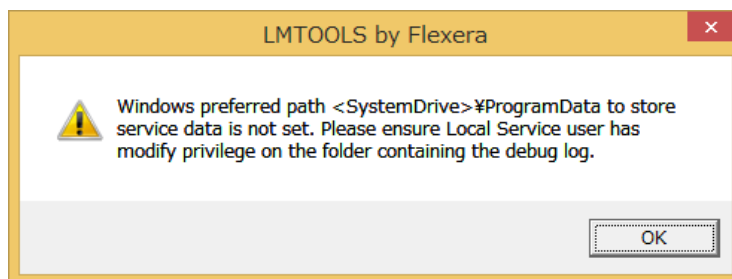


上記のようなエラーが出て、設定の保存ができない場合は、「第4章 トラブルシューティング」の「[6] Windows で LMTTOOLS の設定ができない」を参照してください。

また、以下のようなメッセージが表示された場合は「OK」ボタンをクリックして、閉じて下さい。ライセンスサービスの設定には問題ありません。

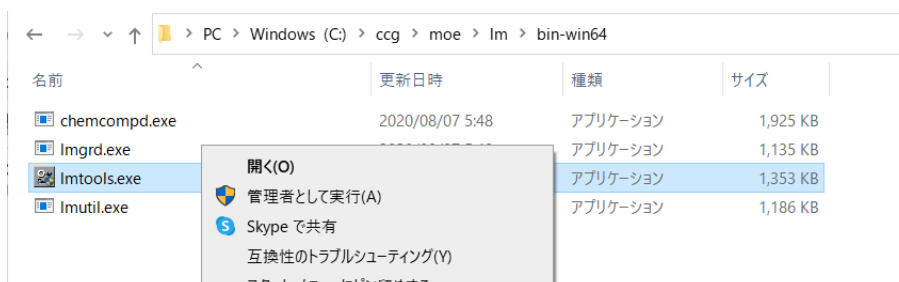


その他に、以下のようなメッセージが表示された場合は「OK」ボタンをクリックして、閉じて下さい。ライセンスサービスの設定には問題ありません。



[8] ライセンスサービスの起動 ライセンスサーバーの新規設定・MOE のバージョンアップ・ライセンスファイルの更新

《手順 1》 LMTTOOLS の起動

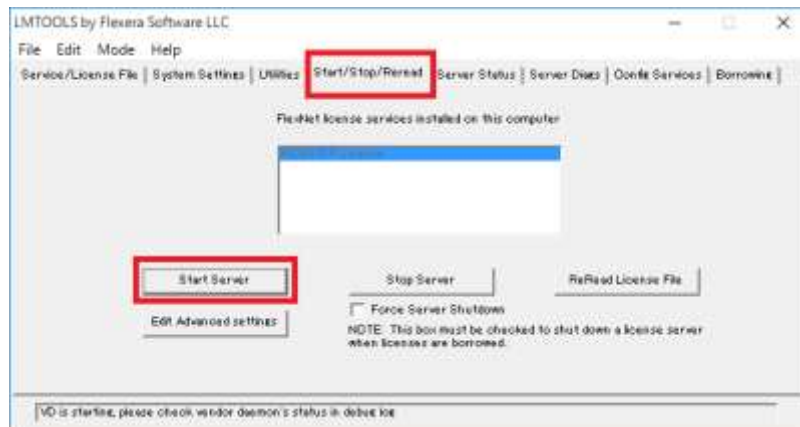


[C:\ccg\moe\lm\bin-win64] フォルダの「lmtools.exe」を右クリックし、現れるメニューの

中から「管理者として実行 (A)」を選択します。実行を許可するかどうかの旨が表示された場合、許可を選択してください。また、この操作中に管理者としての認証が必要な場合があります。

また、Windows 7 で右クリックメニューに「管理者として実行 (A)」の選択肢が無い場合は、「第 4 章 トラブルシューティング、[6] Windows で LMT00LS の設定ができない」を参照の上、Administrator でログインした状態で、「lmttools.exe」をダブルクリックして起動してください。

《手順 2》 サービスの起動



「Start/Stop/Reread」のタブに切り替えます。

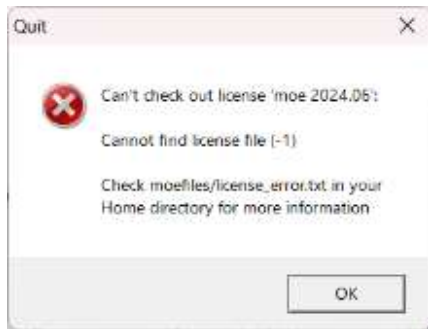
「MOE License」の項目で、「Start Server」でサービスを開始します。

[9] MOE 2024.06 起動確認 ライセンスサーバーの新規設定・MOE のバージョンアップ・ ライセンスファイルの更新

MOE アイコンをダブルクリックして、MOE の起動を確認します。



正常に起動すると上のような MOE ウィンドウが表示されます。



もし、上のようなエラーが表示されたら、

「第4章 トラブルシューティング、[2] MOE が起動しない」を参照してください。

以上でライセンスサービスの設定は完了です。

[10] パッチ情報の確認 [ライセンスサーバーの新規設定](#)・[MOE のバージョンアップ](#)

MOE のインストール DVD にパッチ CD が添付されていた場合は、ここでパッチ CD を参照して MOE 2024.06 を最新版に更新してください。

弊社の Web サイトにて MOE の最新パッチ情報を提供しております。

MOE 2024.06 に対する修正ファイルについてご確認ください。必要に応じて修正ファイルを適用し、MOE 2024.06 の更新を行ってください。

[11] ライセンス管理システム 補足説明

MOE ライセンスサービス設定作業には直接関係ありませんが、MOE のライセンス管理システムについて下記にまとめていますので参考にしてください。

《補足 1》 MOE のライセンスの仕組み

MOE は、ネットワークフローティングライセンスと呼ばれるライセンス形態を採用しています。このライセンス形態は、MOE をインストールするマシンの台数に上限を設けるのではなく、ネットワーク上で同時に起動可能な MOE の本数を制限しています。MOE ライセンスの管理は、ライセンスサーバーと呼ばれるマシンが、MOE の使用状況を常時監視することにより、制限本数まで使用できるようになっています。ライセンス管理には、Flexera Software 社の FlexNet v. 11.18.1 を採用しています。

《補足 2》 ライセンスサービスとは

MOE のライセンス管理システムを Windows OS のサービス機能に登録することにより、マシン起動時に MOE のライセンス管理システムを自動的に起動させるシステムです。

《補足 3》 license.dat の内容

弊社より送付したライセンスファイル[license.dat]の内容は下記のようにになっています。
(メモ帳、ワードパット等で開くことができます。)

※ **Microsoft Word では、開かないで下さい。ライセンスファイルが使用できなくなる恐れがあります**

```
SERVER MOE_SERVER 09AF1234B234 7788  
USE_SERVER  
DAEMON chemcompd c:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥chemcompd PORT=7790  
FEATURE moe chemcompd 2025.09 31-dec-2024 6 SIGN="AE86 49E6 122A 3AAA ¥  
3CBC 2345 8765 A677 2B1A 5963 B777 002A AB36 4649 345F 1236 ¥  
123A 4222 1233 22C2 888E"
```

1 行目 SERVER 行のフォーマット **SERVER ホスト名 id ポート番号**

ホスト名 : ライセンスサーバーのホスト名が記載されています。
(または IP アドレス) ライセンスサーバーの IP アドレスでも代用可能です。
id : \$MOE¥lm¥bin-win64¥lmutil lmhostid コマンドで取得される番号です。
これは、LAN カードの MAC アドレスです。
ポート番号 : FLEXlm が使用する TCP ポート番号です。MOE でのデフォルト値は、7788 です。
※もし、ライセンスサーバーが既にこのポート番号を使用している場合は、
1 から 64000 の間で別の番号を指定して下さい。

2 行目 USE_SERVER 行: クライアントマシンの場合、この行があると、以下の行は
無視され、ライセンス情報をライセンスサーバーから直接取得します。

3 行目 DAEMON 行のフォーマット **DAEMON デーモン名 実行ファイルパス** (port=[ポート番号])

デーモン名 : 4 行目の FEATURE 行で使用するベンダーデーモン名。
chemcompd になっています。
実行ファイルパス : このデーモンの実行ファイルが保存されている場所。
※もし、ライセンスが上手く起動しない場合はデーモンの保存場所を確認し
て下さい。この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:¥ccg¥moe] にインス
トールされている場合の設定例を説明しています。

(port (または PORT)=[ポート番号]) : ※通常はこの部分は必要ありません。

明示的にデーモンが利用するポート番号を指定する場合は、DAEMON 行の
末尾にポート番号を指定するオプションを追加します。

```
DAEMON chemcompd c:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥chemcompd  
port=7790
```

上記は 7790 番ポートを使用する例です。※SERVER 行とは別のポート番号を

指定する必要があります。

4 行目 FEATURE 行のフォーマット

FEATURE	ソフト名	デーモン名	バージョン	有効期限	保有トークン数	ライセンスキー
ソフト名 :	ソフトウェア名。moe になっています。					
デーモン名 :	3 行目の DAEMON 行で指定されているデーモン名です。 MOE の場合は、chemcompd です。					
バージョン :	このライセンスがサポートしている MOE のバージョンです。 この数字以降にリリースされた MOE は、このライセンスでは動作しません。 実際の MOE のリリースバージョンと一致しない場合もあります。					
有効期限 :	このライセンスの有効期限です。 もし、購入したライセンスが永久ライセンスの場合、西暦を表す部分が 0000 と表記されます。					
保有トークン数 :	ライセンスの保有トークン数です。					
ライセンスキー :	この FEATURE 行のライセンスキーです。 FEATURE 行が複数記載されているライセンスの場合、この数値はこの行ごとに異なります。					

《補足 4》 ライセンス使用状況の確認方法

MOE のライセンス管理システムは、MOE のライセンスを今どこで誰が使用しているのか追跡できるようになっています。

《手順 1》 コマンドプロンプトの起動

スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 2》 FLEXlm コマンドによるライセンスの使用状況確認

コマンドプロンプトで下記コマンドをタイプします。

○この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:\ccg\moe] にインストールされています。

```
C:\> C:\ccg\moe\lm\bin-win64\lmutil.exe lmstat -a -c C:\ccg\moe\license.dat
```

すると下記メッセージが出力されます。

```
lmutil - Copyright (c) 1989-2022 Flexera. All Rights Reserved.  
Flexible License Manager status on Fri 6/13/2022 18:26  
License server status: 7788@MOE0  
License file(s) on MOE0: c:\ccg\moe\license.dat:  
MOE0: license server UP (MASTER) v11.18.1  
Vendor daemon status (on MOE0):  
  
chemcompd: UP v11.18.1  
Feature usage info:  
Users of moe: (Total of 32 licenses issued; Total of 4 licenses in use)  
"moe" v2024.06, vendor: chemcompd, expiry: 30-sep-2024  
floating license  
ccg moe0 /dev/tty (v2024.06) (MOE0/7788 102), start Fri 11/13 18:22, 3 licenses  
ccg moe0 /dev/pts/9 (v2024.06) (MOE0/7788 201), start Fri 11/13 18:25
```

Users of moe: 以降の行にライセンスの使用状況の詳細が表示されます。

この例の場合、現在のライセンス使用状況は下記の通りです。

ユーザ名	マシン名	モード	トークン数
ccg	moe0	MOE/GUI	3
ccg	moe0	MOE/batch	1

※ MOE/GUIを起動した際には3トークンを使用するので、行の右端に「3 licenses」と表記されます。

《補足 5》ライセンスサービスの再起動方法

MOE のライセンス管理システムは、クライアントマシンが異常終了した場合、クライアントマシンが使っていたライセンスは自動的に開放するように設計されています。しかし、稀にクライアントマシンが使っていたライセンスが開放されていない場合があります。このような場合は、MOE のライセンスサービスを再起動する必要があります。

MOE のライセンスサービスを再起動する方法は、二つあります。

手順としては、まず方法 1 を実行し、それでもなお問題が解決されない場合は、方法 2 を実行して下さい。

〔方法 1〕lmreread コマンドを使う

《手順 1》Administrator 権限をもつユーザでログオン
Administrator 権限をもつユーザでログオンします。

《手順 2》コマンドプロンプトの起動

スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 3》FLEXlm コマンドによるライセンスファイルの再読み込み
コマンドプロンプトで下記コマンドをタイプします。

※この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:\ccg\moe] にインストールされています。

```
C:\> C:\ccg\moe\lm\bin-win64\lmutil lmreread -c C:\ccg\moe\license.dat
```

すると下記メッセージが出力されます。

```
lmutil - Copyright (c) 1989-2021 Flexera. All Rights Reserved.  
lmreread successful
```

[方法 2] M0E のライセンス管理システムを再起動する

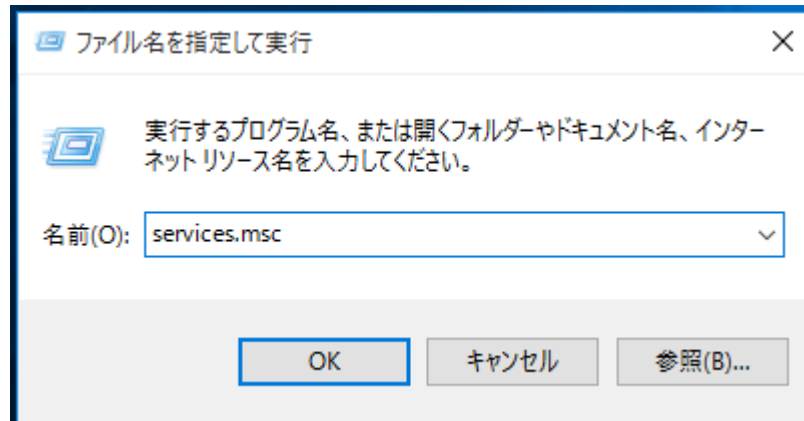
《手順 1》 Administrator 権限をもつユーザでログイン

Administrator 権限をもつユーザでログインします。

《手順 2》 サービスパネルの起動

Windows キーと R キーを同時に押します。

以下のパネルで「services.msc」と入力し、Enter キーを押します。



《手順 3》 ライセンスサービスの再起動

サービスパネルの中で「M0E License」をクリックして選択した後、「停止」をクリックして一旦サービスを停止させた後、「開始」をクリックして M0E のライセンス管理システムを再起動します。

第 2 節 MOE/web 設定

MOE の使用モードには、グラフィックモードの MOE/GUI、ノングラフィックモードの MOE/batch に加え、Web サーバーを介して計算を行える MOE/web があります。ある特定のマシンで MOE/web を設定すると、ネットワーク上に接続されたマシンから Web ブラウザを通して計算を実行させることができます。また、MOE/web は SOAP サーバー機能も搭載しており、SOAP に対応したソフトウェアからネットワーク越しに MOE の機能を利用できます。

※ SOAP サーバー機能および MOE/web 設定の詳細は、MOE 2024.06 オンラインヘルプの「Installing and Running MOE/web」を参照して下さい。

※ MOE/web は Java を利用します。Java を事前にインストールしてください。

[1] MOE/web 設定の流れ

MOE/web の設定では、以下の手順に従って MOE/web を設定して下さい。

1. [2] MOE/web サーバー環境の確認
2. [3] MOE 2024.06 のインストール
3. [4] MOE/web 起動テスト
4. [5] MOE/web 起動確認
5. [6] MOE/web オプション設定
6. [7] MOE/web 自動起動設定

[2] MOE/web サーバー環境の確認

MOE/web サーバーの設定を行う前に、MOE/web サーバーの環境を確認します。

MOE/web サーバーの環境が、下記のチェック項目を全て満たしているか確認します。

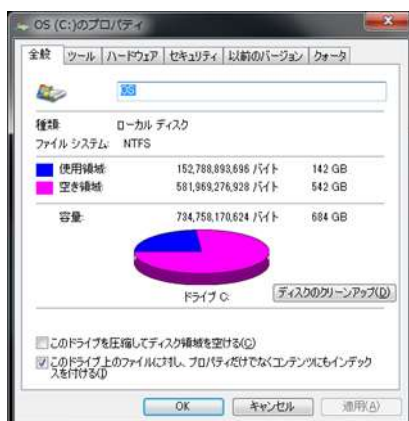
	チェック内容
チェック 1	マシン構成の確認
チェック 2	ハードディスクの空き容量の確認
チェック 3	ユーザ権限の確認
チェック 4	ネットワーク環境の確認

チェック 1 マシン構成の確認

MOE/web が利用できるマシンであるか、「MOE 2024.06 システム環境解説書」を参照して確認します。

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

マイ コンピューターの「ローカル ディスクのプロパティ」パネルでディスクの空き容量を確認します。



○この手順書では、(C:) ドライブに MOE をインストールします。

(C:) ドライブ以外に MOE をインストールする場合は、インストールするドライブの空き容量を確認します。

MOE をインストールするには以下の空き容量が必要です。

インストール方法	空き容量
MOE 本体のみ	26.5 GB 以上

※ 上記以外に、MOE/web が作成するファイルを保存する領域が必要になります。

チェック 3 ユーザ権限の確認

Administrator（管理者）権限を持つユーザでログオンします。

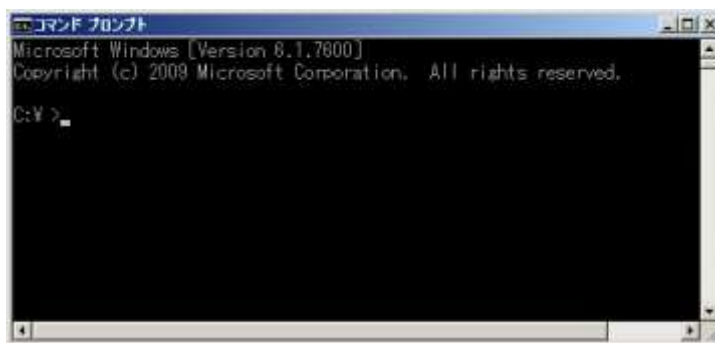
MOE/web を設定するには、Administrator（管理者）権限が必要です。

チェック 4 ネットワークの確認

MOE は、ライセンスサーバーがライセンスの使用状況を監視、管理を行っています。

計算を行う Web サーバーからライセンスサーバーに通信可能かどうかを予め確認します。

《手順 1》 コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 2》 PING コマンドによるライセンスサーバーとの通信確認

○この手順書ではライセンスサーバーのホスト名(マシン名)を **moe_server** とします。

コマンドプロンプトで、下記のようにタイプします。

```
C:\> ping moe_server (ping ホスト名)
```

もし、正常にライセンスサーバーを認識できていれば下記のような応答があります。

```
C:\>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),
    Approximate round trip times in milli-seconds:
        Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms
```

正しく認識できていない場合は、

```
C:\Y>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 0, Lost = 4 (100% loss),
```

と応答されます。

下記のように表示された場合はライセンスサーバーのホスト名が登録されていません。

```
C:\Y>ping moe_server

Ping request could not find host moe_server. Please check the name and try again.
```

ping によりライセンスサーバーから応答がない場合は、「第4章 トラブルシューティング、[1] MOE ライセンスサーバーが認識できない」を参照して下さい。

※ セキュリティ上、ファイアウォールなどで ping を許可していない場合もありますので、その際はサーバー管理者にお問い合わせください。またファイアウォールが有効の場合、Web サーバーの機能が正しく動作しない可能性があります。い。

※MOE/web は、Java 環境下で動作するためファイアウォールの通信設定では java.exe の通信を許可する必要があります。

[3] MOE 2024.06 のインストール

[第1章 第1節 MOE インストール]に従って MOE をインストールします。

○この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:¥ccg¥moe] にインストールします。

MOE が MOE/web サーバー上で正常に起動することを確認して下さい。

※ ここで MOE が正常に起動しないと、MOE/web は正常に動きません。

[4] MOE/web 起動テスト

[方法1] コマンドラインからの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト

(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))

から、コマンドプロンプトを起動します。

コマンドプロンプト内で、下記のようにタイプします。

C:¥> C:¥ccg¥moe¥bin¥moeweb

以下のエラーメッセージが表示された場合は、コマンドスイッチ「-home」でホームフォルダーを指定してください。例、「C:¥ccg¥moe¥bin¥moeweb -home C:¥ccg¥work」

-- [fatal] No HOME directory has been found.

Use -home or set \$HOME or \$MOE_HOME

※ この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:¥ccg¥moe] にインストールします。

正常に稼働すれば下記のような応答があります。



途中省略



[5] MOE/web 起動確認

MOE/web が正常に動作するかどうかを確認します。MOE/web サーバマシン上で Web ブラウザを起動してテストを行った後、MOE/web サーバ以外のクライアントマシンでテストを行います。

【MOE/web マシン上でテスト】

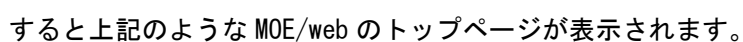
《手順 3》 Web ブラウザの起動

Web ブラウザ（例：Google Chrome）を起動します。

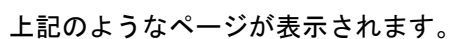
《手順 4》 MOE/web のトップページを開く

Web ブラウザのアドレス入力部分で下記アドレスを入力します。

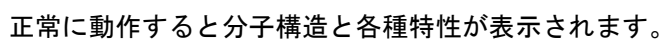
URL <http://localhost:8888/>



Small Molecule Properties をクリックします。



表示される分子構造のスケッチツールに適切な分子構造を描画します。



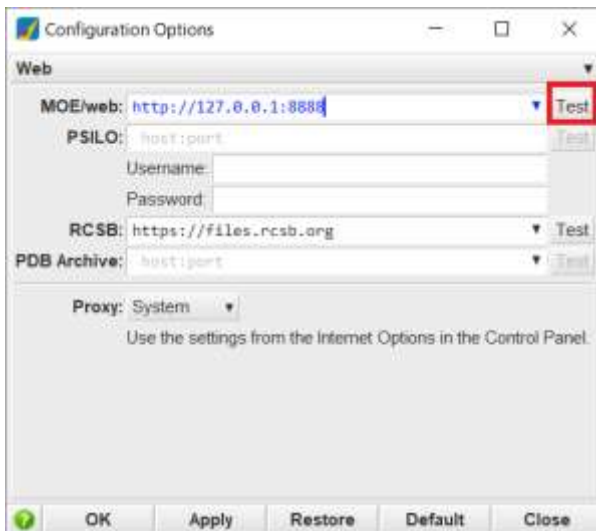
【クライアントマシン上でテスト】

サーバーマシン上で行った《手順 1》から《手順 4》をクライアントマシンからテストします。テストする際の URL は「http://(M0E/web を設定したマシン名):8888/」です。

[方法 2] 【M0E/GUI からのテスト】

4 トークン以上で M0E/GUI から M0E/web の起動確認が簡単にできます。

M0E/GUI を起動して、右上の歯車マークのボタンをクリックし、Web Settings を選択します。



Configuration Options パネルの Test ボタンをクリックします。



通信を確認するパネルが表示されます。

《手順 7》 M0E/web の終了

コマンドプロンプトで Ctrl キー + C キーを同時に押して moeweb を中断します。

【正常に動作しない時は】

下記のオプションを指定して moeweb を起動し、上述のテストを行ってください。

```
moeweb -tmp (一時フォルダー) -host (IP アドレス) -port (ポート番号)
```

例) `C:¥ccg¥moe¥bin¥moeweb -tmp c:¥Windows¥Temp -host 192.168.1.10 -port 80`

テストする際の URL は「`http://(IP アドレス):(ポート番号)/`」です。

※ moeweb 実行時に「`java.net.BindException: Address already in use`」と表示される場合は、指定したポート番号が利用中です。別のポート番号を指定するか、あるいは該当するポート番号を使用しているサーバーを終了してから実行してください。

[6] MOE/web オプション設定

[5]までの手順で確認した起動オプションに加え、MOE/web サーバーの利用形態に応じたオプションを設定します。1 台のマシン上の MOE/web を共同で利用する場合には、他のマシンから、個人的に MOE/web サーバーを利用する際に、一定時間計算の要求がない状況では MOE を停止してライセンスを解放する設定も可能です。

《手順 1》 オプションを適用したテスト

下記のオプションから利用形態に応じたものを指定した起動テストを行ってください。

【MOE/web サーバーの各種オプション】

- webMaxHosts # MOE/web に利用するライセンス数を# token とする。デフォルト 1 token。
- webMinHosts # 一定時間計算の要求がない場合に稼働する MOE を# token にする。
(-webMinHosts 0 を指定すると非計算時に token を解放する)
- webIdleWait # -webMinHosts となる計算の要求がない一定時間(秒)。
- host ホスト名 サーバーのホスト名または IP アドレス。デフォルトはシステムのホスト名。
- port # MOE/web に利用するポート番号。デフォルト 8888 番。
- tmp パス MOE/web で内部的に利用する書き込み可能な一時ディレクトリ。
- log ファイル名 MOE/web のログを出力するファイル名。

例 1) 個人マシン上で MOE/web を起動し、計算しない時間は token を消費しないように起動。
ウェブブラウザからは <http://localhost/> へ接続して利用。他のマシンからは利用できない。

```
moeweb -webMinHosts 0 -webIdleWait 1 -host localhost -port 80
```

例 2) 共通マシン host01 上で MOE/web を起動し、2 トークンを割り当て。ただし一定時間計算のない場合は token を消費しないように起動。ネットワーク内の各マシンのウェブブラウザから <http://host01/> へ接続して利用可能。

```
moeweb -webMaxHosts 2 -webMinHosts 0 -host host01 -port 80
```

※MOE/web ではウェブからの要求に対して moebatch が起動し計算を行います。このため、1 token につき 1 プロセスの moebatch が起動します。複数の要求があった場合には稼働中の moebatch にそれぞれ計算が割り当てられますが、token が不足する場合には計算待ちが発生します。

自動起動の必要がない場合の設定は以上です。必要に応じて MOE/web を起動してご利用ください。

[7] MOE/web 自動起動設定

1 台のマシン上の MOE/web を共同で利用する場合など、サービスとして MOE/web を自動起動するように設定します。MOE/web を必要に応じて起動する場合は、この手順は不要です。

《手順 1》 自動起動時のオプション設定ファイルを編集

[C:¥ccg¥moe¥web¥moeweb service.cfg] をワードパッドもしくはメモ帳で開きます。
前項でテストしたオプションを 1 行ずつ指定するように編集します。

(デフォルト状態)

```
-host localhost  
-port 8888
```

(例 1)

```
moeweb -webMinHosts 0 -webIdleWait 1 -host localhost -port 80
```

```
-host localhost  
-webMinHosts 0  
-webIdleWait 0.1  
-port 80
```

(例 2)

```
moeweb -webMaxHosts 2 -webMinHosts 0 -host host01 -port 80
```

```
-host host01  
-webMaxHosts 2  
-webMinHosts 0  
-port 80
```

《手順 2》 コマンドプロンプトを管理者として起動する

スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))

コマンドプロンプトを右クリックし、「管理者として実行」を選択します。

《手順 3》 コマンドプロンプト内で、下記のようにタイプします。

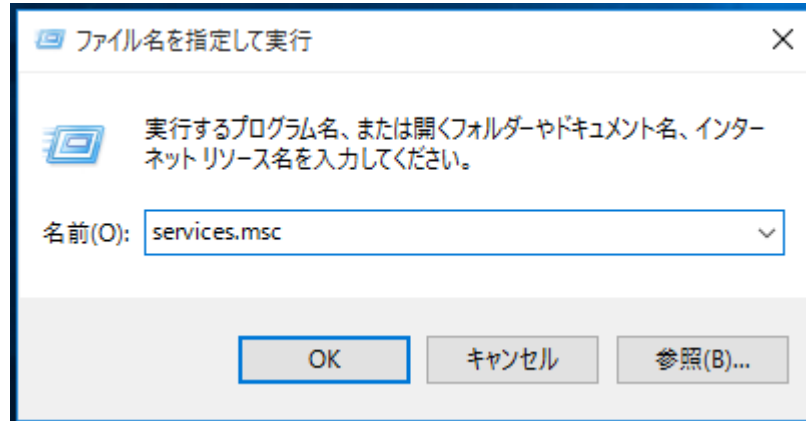
```
C:¥> c:¥ccg¥moe¥web¥moeweb service.exe /install
```

正常に自動起動設定が完了すると、下記のメッセージが表示されます。
MOE/web Service installed.

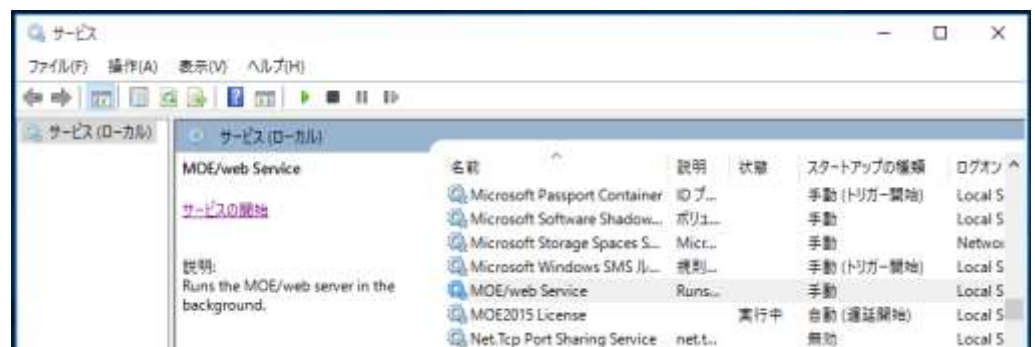
《手順 4》 サービスパネルの起動

Windows キーと R キーを同時に押します。

以下のパネルで「services.msc」と入力し、Enter キーを押します。



《手順 5》 MOE / Web Service のエントリーをダブルクリックします。



《手順 6》 サービスパネルの中で「MOE/web Service」をクリックして選択した後、「サービスの開始」をクリックしてサービスを開始します。

マシン上で Web ブラウザを起動してテストを行った後、MOE/web サーバー以外のクライアントマシンでテストを行います。

以上で MOE/web の設定は完了です。

《補足》 MOE/web 自動起動設定の解除方法

MOE/web の自動起動設定を解除する場合は、サービスの停止後に解除プログラムを実行する必要があります。下記の手順に沿って操作してください。

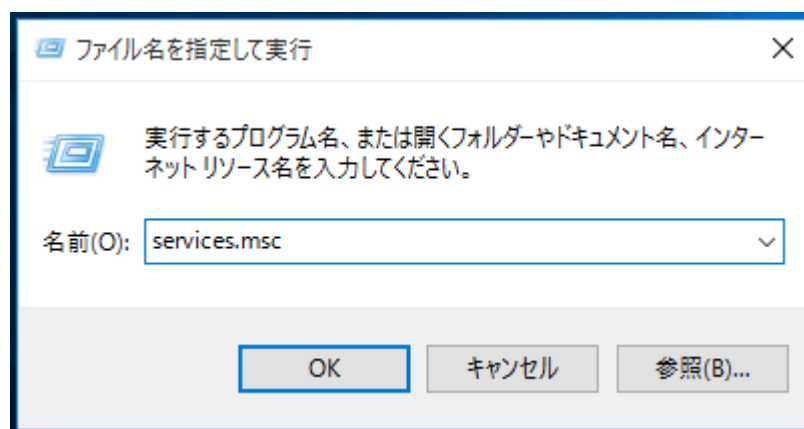
《手順 1》 Administrator 権限をもつユーザでログイン

Administrator 権限をもつユーザでログインします。

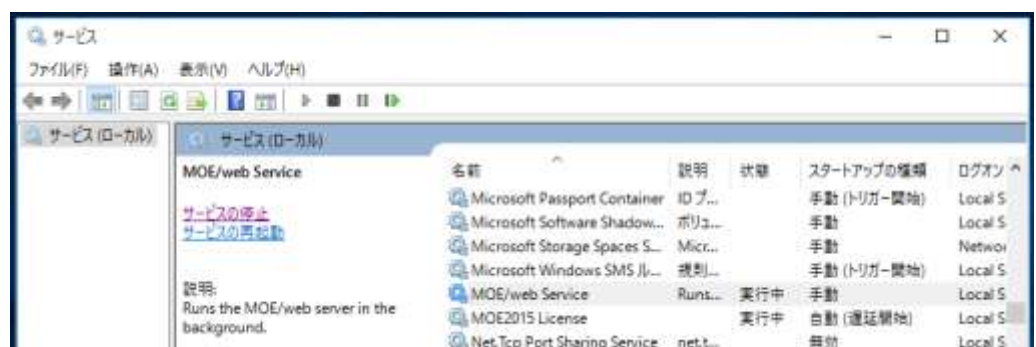
《手順 2》 サービスパネルの起動

Windows キーと R キーを同時に押します。

以下のパネルで「services.msc」と入力し、Enter キーを押します。



《手順 3》 MOE/web サービスの停止



サービスパネルの中で「MOE/web Service」をクリックして選択した後、「サービスの停止」をクリックしてサービスを停止します。

《手順 4》 コマンドプロンプトの起動

スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))

から、コマンドプロンプトを起動します。

≪手順 5≫M0E/web 自動起動設定の解除

コマンドプロンプトで下記コマンドをタイプします。

```
C:¥> c:¥ccg¥moe¥web¥moeweb service.exe /remove
```

正常に解除されると下記メッセージが出力されます。

M0E/web Service removed.

第 3 節 MOE/smp 設定

MOE/smp は、MOE のアプリケーションを複数の CPU 上で並列計算させ分散処理を行う機能です。MOE/smp に対応するアプリケーションには、Conformation Import、Flexible Alignment、PDB Search、Homology Model、QuaSAR Model-Evaluate、Database Paritial Charge、Database SCF Calculation、Dock 等があります。

また、マルチコア CPU または複数の CPU を搭載しているマシンでは、1 台のマシン内で簡易的に搭載 CPU 分の MOE/smp を構築することも可能です。この設定方法については本節 [8] MOE/smp 補足説明を参照ください。

※ MOE/smp 設定の詳細は、MOE 2024. 06 オンラインヘルプの「Installing and Running MOE/smp」を参照して下さい。

[1] MOE/smp の実行環境と設定の流れ

【MOE/smp の実行環境】

○この手順書では、以下の構成のマシン環境に MOE/smp を設定します。

機能	構成
ユーザ	moe
ユーザパスワード	password
マシン構成 (マシンスペック)	cluster1, cluster2, cluster3 (全て同一機種、同一性能)
MOE/smp 計算投入マシン	cluster1
MOE ライセンス数 (1 台: 1 トークン)	3 トークン
MOE インストールディレクトリ	C:\¥ccg¥moe (全マシン共通)

【MOE/smp の設定】

対象者 MOE/smp を新規に設定される方を対象にしています。

1. [2] MOE/smp 環境の確認
2. [3] MOE 2024. 06 のインストール
3. [4] Rexecd サービスの設定
4. [5] MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの設定
5. [6] 環境変数の設定
6. [7] MOE/smp 起動確認

[2] MOE/smp 環境の確認

MOE/smp の設定を行う前に、マシンの環境を確認します。

インストール環境が、下記の5つのチェック項目を全て満たしているか確認します。

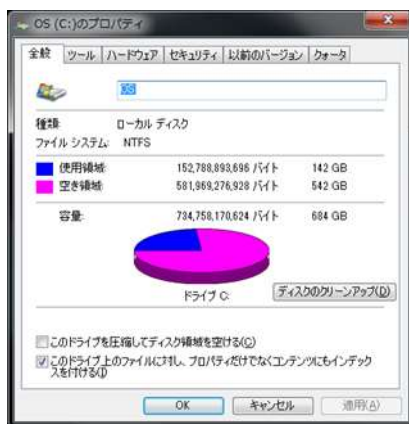
	チェック内容
チェック 1	マシン構成の確認
チェック 2	ディスクの空き容量の確認
チェック 3	MOE/smp の設定時におけるユーザ権限の確認
チェック 4	MOE/smp の実行ユーザの確認
チェック 5	ネットワーク環境の確認

チェック 1 マシン構成の確認

MOE/smp が利用できるマシンであるか、「MOE 2024.06 システム環境解説書」を参照して確認します。

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

マイ コンピューターのディスクのプロパティでディスクの空き容量を確認します。



○この手順書では、(C:) ドライブに MOE をインストールします。

MOE をインストールするには以下の空き容量が必要です。

インストール方法	空き容量
MOE 本体のみ	26.5 GB 以上

※ 上記以外に、MOE/smp が作成するファイルを保存する領域が必要になります。

チェック 3 MOE/SMP の設定時におけるユーザ権限の確認

Rexecd サービスを設定するには、Administrator (管理者) 権限が必要です。したがって、MOE/smp の環境設定を行う際には、Administrator 権限を持つユーザでログオンする必要があります。

※ サービスの設定の際には Administrator 権限が必要ですが、MOE/smp を実行するユーザには Administrator 権限は必要ありません。

チェック 4 MOE/SMP の実行ユーザの確認

MOE/smp を実行するマシンの全てに MOE/smp を実行するための共通ユーザを作成します。

共通ユーザのパスワードは、同一にしておく必要があります。

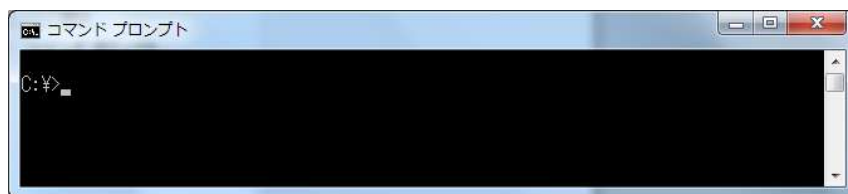
チェック 5 ネットワークの確認

MOE では、ライセンスサーバーがライセンスの使用状況の監視および管理を行っています。

従って、MOE/smp を実行するには、これからインストールする各マシンとライセンスサーバーが通信可能である必要があります。

また、MOE/smp を構成する各マシンが相互に通信できるかどうかを確認します。

《手順 1》 コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 2》 PING コマンドによるライセンスサーバーとの通信確認

○この手順書ではライセンスサーバーのホスト名 (マシン名) を moe_server とします。

コマンドプロンプトで、下記のようにタイプします。

```
C:¥> ping moe_server (ping ホスト名)
```

もし、正常にライセンスサーバーを認識できていれば下記のような応答があります。

```
C:\¥>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),
    Approximate round trip times in milli-seconds:
        Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms
```

同手順で MOE/smp を構成する各マシン間でも ping で応答があるかどうかを確認します。

下記のように表示された場合はライセンスサーバー、または MOE/smp を構成するホスト名が登録されていません。

```
C:\¥>ping moe_server

Ping request could not find host moe_server. Please check the name and try again.
```

「第4章 トラブルシューティング、[1] MOE ライセンスサーバーが認識できない」を参照してホスト名を登録してください。

また下記のような応答があった場合は、

```
C:\¥>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.
Request timed out.

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 0, Lost = 4 (100% loss),
```

セキュリティ上、ファイアウォールなどで ping を許可していない場合もあります。MOE/smp を使用するためにはサーバーを含む MOE/smp 構成マシンで相互に通信可能な状態にする必要があります。

ファイアウォールの設定に関しては「**第4章トラブルシューティング、[4]Windows ファイアウォール設定によるエラー(-96)**」を参照、またはシステム管理者にお問い合わせください。

[3] MOE 2024.06 のインストール

[第2章 第1節 MOE インストール]に従って MOE/smp を構成する各マシンに MOE をインストールします。原則的に MOE/smp を構成する全てのマシンでは、インストールされている MOE の環境を全て同一にする必要があります。したがって、カスタマイズした SVL をお持ちの方は、MOE/smp を構成する全てのマシンにインストールして下さい。

MOE が MOE/smp を構成する各マシン上で正常に起動することを確認して下さい。

※ ここで MOE が正常に起動しないと、MOE/smp は正常に動作しません。

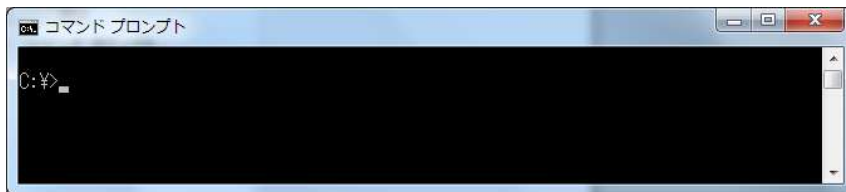
[4] Rexecd サービスの設定

MOE/smp は構成するマシン間でのデータの相互通信に Rexecd サービスを使用します。

通常、Windows OS には、Rexecd サービスはインストールされていないので、ここでインストールします。

※ この作業は、MOE/smp を構成する全マシンで行って下さい。

《手順 1》 コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト

(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))

から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 1》 rexecd.exe のインストール

各マシンに rexecd.exe をインストールします。

コマンドプロンプト内で、下記のようにタイプします。

```
C:¥> C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥rexecd.exe -install
```

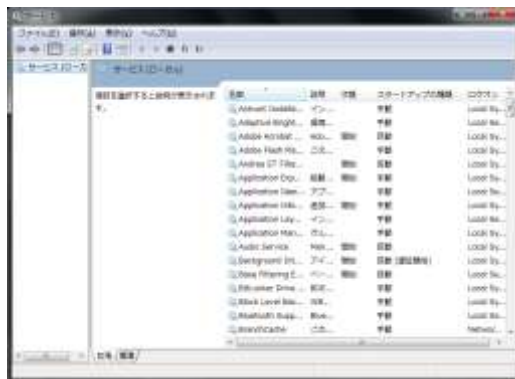
※ この手順書では、MOE は (C:) ドライブの [C:¥ccg¥moe] にインストールします。

正常にインストールが終了すれば下記のような応答があります。

```
C:¥> C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥rexecd.exe -install
[15:56:55 2021/10/22 0]: Rexecd was succesfully installed.

C:¥>
```

《手順 2》 サービスパネルの起動



スタート> コントロールパネル > システムとセキュリティ > 管理ツール> サービス

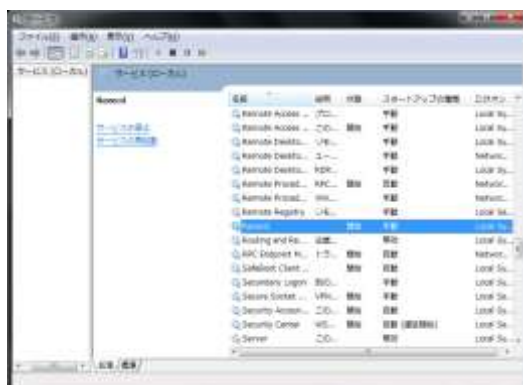
(スタート > Windows システムツール > コントロールパネル > システムとセキュリティ

＞ 管理ツール＞ サービス (Windows 10 の場合))

から、サービスパネルを開きます。

《手順 3》 Rexecd の開始

Rexecd サービスを開始します。



サービスパネルで Rexecd をマウスでクリックして選択した後、

開始ボタンをクリックしてサービスを開始します。

サービスパネルの Rexecd の状態が開始になっていることを確認します。

※ 現在の設定では、マシンを起動するたびに Rexecd サービスを開始する必要があります。

す。自動的に Rexecd サービスを開始したい場合は「**[8] MOE/smp 補足説明**」を参照して

サービスを自動起動するように設定して下さい。

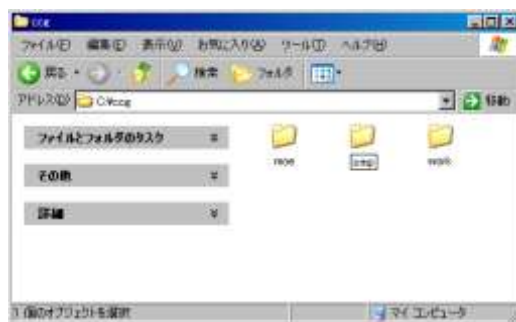
[5] MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの設定

MOE/smp を実行させるためには、どのユーザがどのマシンで実行させるか、実行マシンの構成を定義したファイル (MOE/smp 設定ファイル) を用意する必要があります。この設定ファイルは、テキスト形式で指定されたフォーマットにしたがって記入する必要がありますが、ファイル名の指定はありません。

- ※ この設定は、MOE/smp に計算ジョブを投入するマシン (ルートノード) だけで行って下さい。
- ※ この手順書では、この設定ファイル名を「smpconfig」(拡張子無し) とします。

《手順 1》 smp フォルダの作成

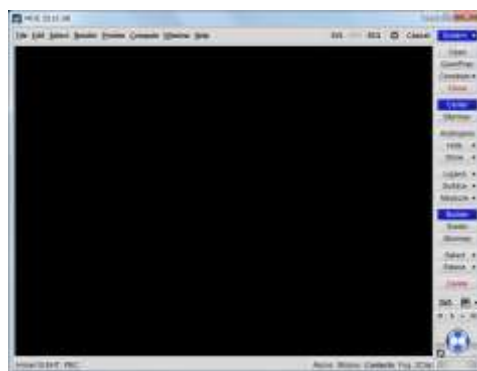
MOE/smp の定義ファイル及び実行ログを保存する場所として smp フォルダを作成します。



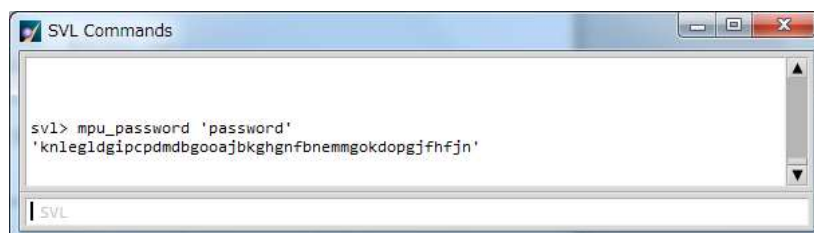
(C:) ドライブの ccg フォルダの中に、smp フォルダ [C:¥ccg¥smp] を作成します。

《手順 2》 ログオンパスワードの暗号化

MOE/smp を実行させるには、MOE/smp を実行させるユーザのログオンパスワードを MOE で暗号化したもの (mpu_password) を MOE/smp 設定ファイルに記述する必要があります。



MOE または、MOE/batch を起動します。



MOE の場合は、SVL コマンドウィンドウ (MOE | Window | Commands) を開きます。

MOE または、MOE/batch のコマンド入力部分で下記コマンドをタイプします。

```
svl> mpu_password 'password' (mpu_password `ユーザのパスワード`)
'mhnoabfmofeffgflaeikckolifeifbofggamkkaolanldgb'
```

すると 46 文字のスクランブルパスワードが作成されます。

- ※ このスクランブルパスワードは、同じパスワードでも毎回異なる文字列を返します。
- ※ 該当ログオンアカウントにパスワードが設定されていない場合は、下記方法でスクランブルパスワードを作成してください。

```
svl> mpu_password ''
'pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb'
```

《手順 3》 MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの作成

テキストエディタ (メモ帳) を開きます。

例えば、MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルを下記のように作成します。

```
$mpu-user moe
$mpu-password pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb
$mpu-rexec $MOE/bin-win64/moebatch -mpu -
cluster1
cluster2
cluster3
$eof
```

この MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルは、下記環境下で使用するための設定が記載されています。

ユーザ名 : moe

パスワード (mpu_password) : pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb

マシン構成 : cluster1, cluster2, cluster3

計算投入マシン : cluster1

MOE ライセンス必要数 : 3 トークン

これをファイル名 [C:\ccg¥smp¥smpconfig] として保存します。

- ※ MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの詳細は、「[8] MOE/smp 補足説明」を参照して下さい。

[6] 環境変数の設定

MOE/smp を利用するためには、構成する各マシンに MOE 環境変数を設定する必要があります。

《手順 1》MOE/smp を実行するユーザでログイン

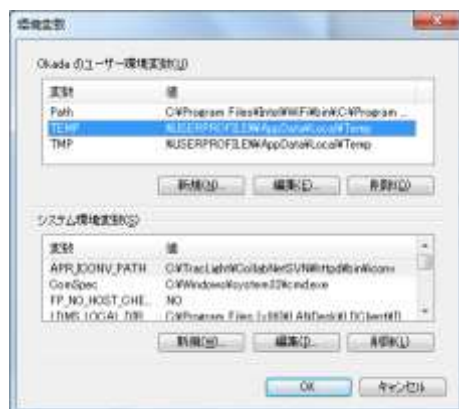
MOE/smp を実行するユーザ（例:moe）でログインします。

《手順 2》システムのプロパティパネルを開く

スタート> コントロールパネル > システムとセキュリティ > システム
(スタート > Windows システムツール > コントロールパネル > システムとセキュリティ
> システム (Windows 10 の場合))
から、システムのプロパティパネルを開きます。

《手順 3》環境変数パネルを開く

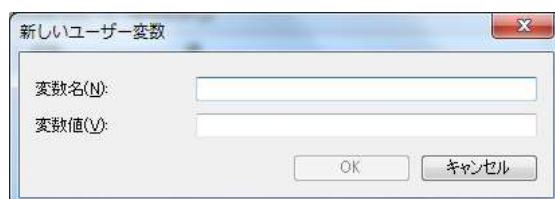
「システムの詳細設定」から環境変数パネルを開きます。



システムの詳細設定 > 環境変数

《手順 4》新しいユーザ変数パネルを開く

「環境変数」パネルの上段に存在するユーザの環境変数の新規 (N) ボタンをクリックします。



「新しいユーザ変数」パネルが開きます。

《手順 5》環境変数 MOE の追加

環境変数 MOE を追加します。



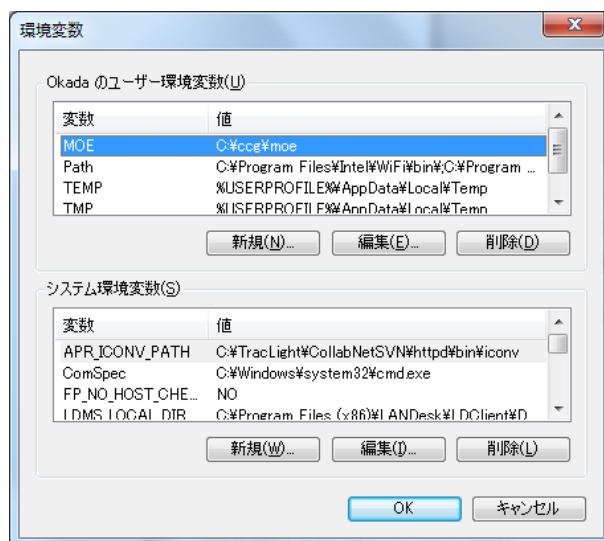
「新しいユーザ変数」パネルで下記内容を登録してください。

変数名 (N) : MOE

変数値 (V) : C:\%ccg%moe

入力が終了したら「OK」を押してパネルを閉じます。

※ この手順書では、MOE を (C:) ドライブの [C:\%ccg%moe] にインストールしています。



正しく、入力されるとユーザの環境変数に MOE が追加されます。

その作業を MOE/smp を構成する全てのマシンで行います。

[7] MOE/smp 起動確認

MOE/smp の起動確認を行います。

《手順 1》moesmp ショートカットアイコンの作成



デスクトップに [C:\%ccg%moe\bin-win64\moebatch.exe] のショートカットアイコンを作成します。MOE/smp の使用を明示的にするために、ショートカットアイコン名を [moesmp] に変更します。

≪手順 2≫ moesmp アイコンのプロパティの編集



作成した moesmp ショートカットアイコンを右クリックして **moesmp のプロパティ**を開きます。ショートカットタブをクリックします。

MOE/smp は下記コマンドで実行します。

moebatch -mpu smpconfig ファイル名 -mpulog MOE/smp ログファイル名

従って、リンク先 (T) のパスを下記のように変更します。

[C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥moebatch.exe -mpu C:¥ccg¥smp¥smpconfig -mpulog C:¥ccg¥smp¥smp.log]

この作業を行うことで、MOE/smp が実行できるようになります。

作業フォルダー (S) のパスを、[C:¥ccg¥work]に変更します。

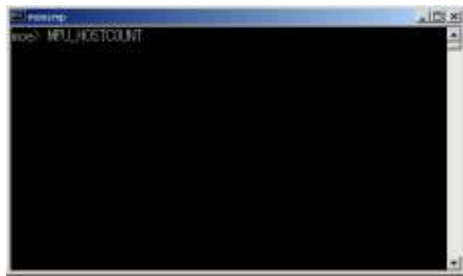
この作業を行うことで、MOE 起動時の作業フォルダーが C:¥ccg¥work になります。

≪手順 3≫ MOE/smp の起動



moesmp ショートカットアイコンをダブルクリックして MOE/smp を起動します。

≪手順 4 ≫M0E/smp の起動確認



起動した M0E/smp のコマンド入力部分で下記コマンドをタイプします。

```
smp> MPU_HOSTCOUNT  
3
```

M0E/smp を構成している全 CPU 数が表示されます。

以上で M0E/smp の設定は完了です。

[8] MOE/smp 補足説明

MOE/smp の設定の変更を行う際に、参考にして下さい。

≪補足 1≫smpconfig ファイルの内容

MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの編集方法を解説します。

この smpconfig ファイルは、下記環境下で使用するための設定が記載されています。

ユーザ名 : moe

パスワード (mpu_password) : pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb

マシン構成 : cluster1, cluster2, cluster3

計算投入マシン : cluster1

必要 MOE ライセンス数 : 3 トークン

```
$mpu-user moe
$mpu-password pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb
$mpu-rexec $MOE/bin-win64/moebatch -mpu -
cluster1
cluster2
cluster3
$eof
```

1 行目 \$mpu-user 行のフォーマット \$mpu-user ユーザ名

ユーザ名 : MOE/smp を実行するユーザです。

2 行目 \$mpu-password 行のフォーマット \$mpu-password パスワード

パスワード : MOE/smp を実行するユーザのパスワードを MOE で暗号化したものです。

3 行目 \$mpu-rexec 行のフォーマット \$mpu-rexec moebatch の保存場所 -mpu -
moebatch の保存場所 : moebatch の保存場所を記載します。

※ \$MOE は、環境変数 MOE を意味します。

※ \$MOE は、MOE/smp を構成しているマシンの環境が統一されていない時に使用します。

4～9 行目 フォーマット マシン名

マシン名 : MOE/smp を構成するマシン名を記入します。

※ 計算ジョブを投入するマシン (ルートノード) 名が先頭行になるようにして下さい。

※ 2CPU 以上のマシンの場合は、ジョブを投入する CPU の数だけマシン名を記入します。

10 行目 \$eof 行のフォーマット \$eof
ファイルの最後の行に必ずこの行を入れてください。

《補足 2》マルチコア CPU または複数 CPU マシン内での MOE/smp 構築

マルチコア CPU または複数の CPU を搭載しているマシンでは、1 台のマシン内で簡易的に搭載 CPU 分の MOE/smp を構築することができます。

《手順 1》 MOE/smp ショートカットの作成



[C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥moebatch.exe] または [C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥moe.exe] のショートカットアイコンを作成します。MOE/smp の使用を明示的にするために、ショートカットアイコン名を[moesmp]に変更します。

moesmp のアイコンを右クリックし、プロパティを開きます。



ショートカッタブを選択し、リンク先に下記のコマンドを指定します。

C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥moebatch.exe -mpu cpu 数

または

C:¥ccg¥moe¥bin-win64¥moe.exe -mpu cpu 数

《手順 2》 MOE/smp の起動確認



moesmp ショートカットアイコンをダブルクリックして MOE/smp を起動します。

※M0E/smp のために moe および moebatch 間で通信を行うため、通信に関する Windows セキュリティの警告が現れる場合があります。その場合は通信を許可するように設定を行って下さい。

moebatch のコマンド入力部分あるいは moe の SVL Commands に下記コマンドを入力します。

```
svl> MPU_HOSTCOUNT  
2
```

M0E/smp を構成している全 CPU 数が表示されます。

1 台のマシン内での M0E/smp の設定は以上です。

第4章 トラブルシューティング

- [1] MOE ライセンスサーバーが認識できない
- [2] MOE が起動しない
- [3] クライアントマシンが MOE を起動したままクラッシュした
- [4] Windows ファイアウォール設定によるエラー (-96)
- [5] 分子が回転しない
- [6] Windows で LMTTOOLS の設定ができない

[1] MOE ライセンスサーバーが認識できない

クライアントマシンが MOE ライセンスサーバーを認識できないために起こっている現象です。ライセンスエラーは一般的に-96 が出力されます（同章の「[2]MOE が起動しない」を参照）。したがって、MOE を使用するためにはクライアントマシンから MOE ライセンスサーバーを認識できるようにする必要があります。

クライアントマシンから MOE ライセンスサーバーを認識する方法は、2 つあります。

1. DNS サーバーに MOE ライセンスサーバーを登録する。
2. クライアントマシンの HOSTS ファイルに MOE ライセンスサーバーを登録する。

※ どちらの方法を採用するかは、ネットワークの運用方法によって異なります。
したがって、詳細は、システム管理者にお問い合わせください。

1. DNS サーバーに MOE ライセンスサーバーを登録

ネットワーク管理者に、MOE ライセンスサーバーを登録するように申請してください。

2. クライアントマシンの HOSTS ファイルに MOE ライセンスサーバーを登録

クライアントマシンの hosts ファイルに MOE ライセンスサーバー情報を追加登録します。

《手順 1》 Administrator 権限を持つユーザでログオン

Administrator 権限を持つユーザでログオンします。

《手順 2》 hosts ファイルを開く

hosts ファイルをワードパッドもしくはメモ帳で開きます。

C:\Windows\system32\drivers\etc\hosts

《手順 3》 hosts ファイルの編集

hosts ファイルの末尾に MOE ライセンスサーバー情報を 1 行追加します。

```
192.168.1.10 moe_server
```

○手順書では、MOE ライセンスサーバーを

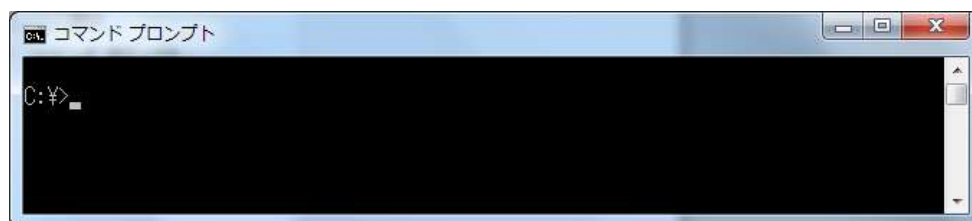
「IP アドレス : 192.168.1.10, マシン名 : moe_server」とします。

例えば hosts ファイルは以下のように記述されていますので、サーバーのホスト名を追加し上書き保存します。

```
# Copyright (c) 1993-2009 Microsoft Corp.
#
# This is a sample HOSTS file used by Microsoft TCP/IP for Windows.
#
# This file contains the mappings of IP addresses to host names. Each
# entry should be kept on an individual line. The IP address should
# be placed in the first column followed by the corresponding host name.
# The IP address and the host name should be separated by at least one
# space.
#
# Additionally, comments (such as these) may be inserted on individual
# lines or following the machine name denoted by a '#' symbol.
#
# For example:
#
#       102.54.94.97      rhino.mshome.com          # source server
#       38.25.63.10      x.mshome.com              # x client host
#
127.0.0.1      localhost
192.168.1.10   moe_server
```

サーバーのホスト名
を追加

《手順 4》 コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト(Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 5》 PING コマンドによるライセンスサーバーとの通信確認

コマンドプロンプト内で、下記のようにタイプします。

```
C:¥> ping moe_server (ping ホスト名)
```

もし、正常にライセンスサーバーを認識できていれば下記のような応答があります。

```
C:¥>ping moe_server

Pinging moe_server [192.168.1.10] with 32 bytes of data:

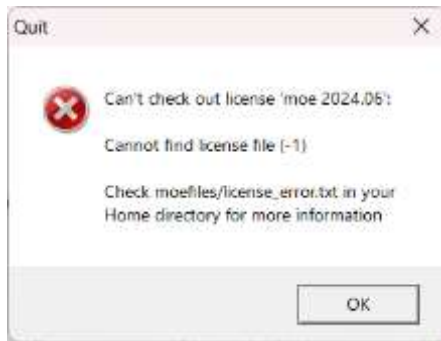
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128
Reply from 192.168.1.10: bytes=32 time<10ms TTL=128

Ping statistics for 192.168.1.10:
    Packets: Sent = 4, Received = 4, Lost = 0 (0% loss),
    Approximate round trip times in milli-seconds:
        Minimum = 0ms, Maximum = 0ms, Average = 0ms
```

※ セキュリティ上、ファイアウォールなどでサーバーが ping を許可していない場合もあります。クライアントにライセンスサーバーを登録したにもかかわらず ping での応答がない場合は、システム管理者にお問い合わせください。

※ hosts ファイルによりサーバーのホスト名を登録する場合は、すべての MOE を使用するクライアント上でこの設定を行ってください。

[2] MOE が起動しない



もし、上図のようなウィンドウが表示され MOE が起動しない場合は、**ライセンス管理システム**に問題があります。(-##)の番号が、エラーの原因を示唆します。

下記一覧表に、主なエラーの原因を示します。

エラー番号	エラー原因
-1	ライセンスファイルが MOE のインストールフォルダーにない場合に表示されるエラーです。ライセンスファイル (license.dat) を MOE のインストールフォルダー (C:\¥ccg¥moe) に保存してください。
-4	MOE ライセンスが、全て使用中です。起動中の MOE を終了させるか、他の MOE が終了するまで待ちます。
-7	MOE2017 とそれより古いライセンスサービスを使用して、MOE 2024.06 を起動させようとしています。ライセンスサーバーの MOE を MOE 2024.06 にバージョンアップさせてください。
-10	MOE ライセンスが、有効期限切れです。現在の日付が、ライセンスファイルの有効期限の日付以降です。
-12	別のサービスが、ネットワークポートを使用中です。license.dat の SERVER 行の一番後の番号 (ポート番号) を別の番号に変更して下さい。
-14	MOE ライセンスサーバーが、ネットワーク上で認識できません。ネットワークの設定方法は、「第 3 章トラブルシューティング [1] MOE ライセンスサーバーが認識できない」参照して下さい。
-15	MOE ライセンスサーバーに接続できません。MOE ライセンス管理システムが起動していない可能性があります。MOE ライセンス管理システムの起動方法は、「第 2 章管理者編 第 1 節ライセンスサーバー設定」参照して下さい。
-18	ライセンスサーバーのライセンスファイルが更新されていない可能性があります。 <u>サーバーとクライアントのライセンスファイル</u> を弊社からご送付した新しいライセンスファイルに更新してください。サーバーのライセンスの更新作業は、それぞれの OS 用

	のインストール手順書「ライセンスサーバー設定」部分をご覧ください。
-20	現在のライセンスが MOE 2024.06 に対応していません。 <u>サーバーとクライアント</u> のライセンスファイルを弊社からご送付した新しいライセンスファイルに更新してください。サーバーのライセンスの更新作業は、それぞれの OS 用のインストール手順書「ライセンスサーバー設定」部分をご覧ください。
-83	MOE ライセンスサーバーの MOE がバージョンアップされていません。MOE ライセンスサーバーの MOE をバージョンアップして下さい。
-88	コンピューターまたはライセンスマネージャの日付が遅らせてあります。ハードディスクの日付とシステムクロックが一貫するまで、この問題は解消されません。
-96	クライアントからライセンスサーバーを参照できないために、このエラーが出力されます。hosts ファイルへの登録ミス（同章の [1]MOE ライセンスサーバーが認識できない」を参照）、ファイアウォールの設定が有効になっているなどが考えられます。Windows ファイアウォールの設定については、同章の「[5] Windows ファイアウォール設定によるエラー (-96)」をご参照ください。
-97	ライセンスサービスが正常に起動していないために、このエラーが出力されます。ライセンスファイルのデーモン行が正しく記載されているかご確認ください。 DAEMON chemcompd c:\moe\lm\bin-win64\chemcompd また、テンポラリーフォルダーに chemcompd.lock がある場合は、削除して、ライセンスサービスを停止、再起動してください。
-114	ライセンスファイルがライセンス認証システム (FlexNet Publisher 11.18.1) のバージョンに適合しないため、発生するエラーです。MOE 2010.10 以前で使用されていたライセンスファイルが読み込まれている可能性があります。MOE 2012.10 以降のライセンスファイルをご使用下さい。

これ以外の原因で MOE が起動しない場合は、

https://www.chemcomp.com/manuals/fnp_LicAdmin.pdf

の「20 Error Codes」をご参照ください。

(\$MOE は MOE がインストールされているフォルダー、このテキストでは c:\ccg\moe を表しています。)

問題が解決されない場合は、

(-##)の番号と一緒にライセンスサーバー中のライセンスログファイル（ライセンスサーバーがWindows であればC:\ccg\moe\lm\flex.log、Linux であれば/home/ccg/moe/lm/flex.log）を添付して、弊社サポート窓口 ccg@molsis.co.jp までご連絡下さい。

[3] クライアントマシンが M0E を起動したままクラッシュした

M0E のライセンス管理システムは、クライアントマシンが異常終了した場合、クライアントマシンが使っていたライセンスを開放するように設計されています。しかし、稀にクライアントマシンが使用していたライセンスが開放されない場合があります。

このような場合は、M0E のライセンス管理システムを再起動する必要があります。

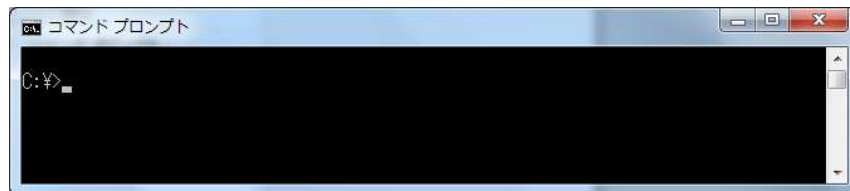
M0E のライセンスデーモンを再起動する方法は、2 つあります。

1. lmreread コマンドの実行
2. M0E のライセンス管理システムの再起動

1. lmreread コマンドの実行

《手順 1》Administrator 権限をもつユーザでログオン
Administrator 権限をもつユーザでログオンします。

《手順 2》コマンドプロンプトの起動



スタート > すべてのプログラム > アクセサリ > コマンドプロンプト
(スタート > Windows システムツール > コマンドプロンプト (Windows 10 の場合))
から、コマンドプロンプトを起動します。

《手順 3》FLEXlm コマンドによるライセンスファイルの再読み込み
コマンドプロンプトで下記コマンドをタイプします。

※ この手順書では、M0E は (C:) ドライブの [C:\ccg\moe] にインストールされています。

```
C:\> C:\ccg\moe\lm\bin-win64\lmutil lmreread -c C:\ccg\moe\license.dat
```

すると下記メッセージが出力されます。

```
lmutil - Copyright (c) 1989-2021 Flexera. All Rights Reserved.  
lmreread successful
```

2. MOE のライセンス管理システムの再起動

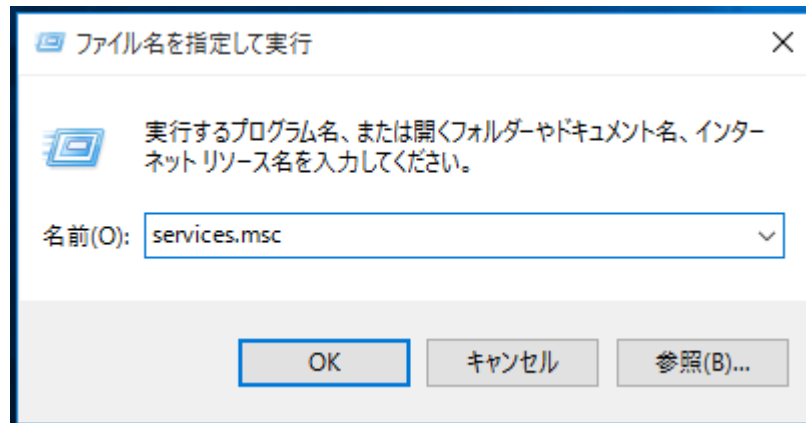
《手順 1》Administrator 権限をもつユーザでログイン

Administrator 権限をもつユーザでログインします。

《手順 2》サービスパネルの起動

Windows キーと R キーを同時に押します。

以下のパネルで「services.msc」と入力し、Enter キーを押します。



《手順 3》ライセンスサービスの再起動

サービスパネルの中で **[MOE License]** をクリックして選択した後、**サービスの停止** ボタンをクリックして一旦サービスを停止させた後、**サービスの開始** ボタンをクリックして MOE のライセンス管理システムを再起動します。

[4] Windows ファイアウォール設定によるエラー(-96)

原因：

お使いのマシンに Windows ファイアウォールの機能が有効になっていると、“Can’t check out license ‘moe 2024.06’ (-96)”のエラーが出力される可能性があります。Windows ファイアウォールとは、ウイルスによる攻撃や不正なアクセスからコンピューターを保護する機能です。この機能により、M0E のライセンス管理システム等、一部の機能が使用制限されます。M0E を使用するためには、この使用制限を解除する必要があります。

※ Windows ファイアウォール以外でも、ご利用のセキュリティソフトなどのアプリケーションに搭載されているファイアウォール機能のため、M0E のライセンス管理システムへの通信が制限されている場合があります。その場合は、ご利用のアプリケーションのファイアウォールが有効となっているかどうかをご確認後、通信制限を解除してください。

※ ファイアウォールが有効な状態で M0E/web、M0E/smp を使用するためには必ずファイアウォールの設定を行う必要があります。

[5] 分子が回転しない

ホイールボタンや中ボタンドラッグ操作で分子が回転しない場合、ボタン設定を変更する必要があります。

《手順 1》 MOE 右上の歯車ボタンから Settings | Mouse を選択

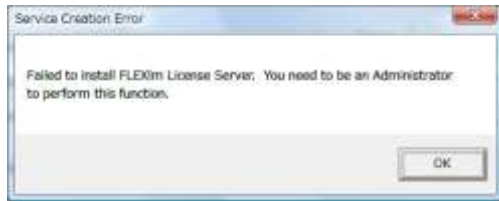
《手順 2》 ボタンの割り当てを変更

ボタンの割り当てを変更します。



ホイール部分を**中央ボタン**または中央ボタンに該当するボタン設定に変更します。

[6] Windows で LMTTOOLS の設定ができない



サービスを起動する際には、ユーザー : Administrator で設定を行う必要があります。しかしこのユーザーアカウントはデフォルトで無効になっている場合、有効にする必要があります。

《手順 1》 管理ツールを開く

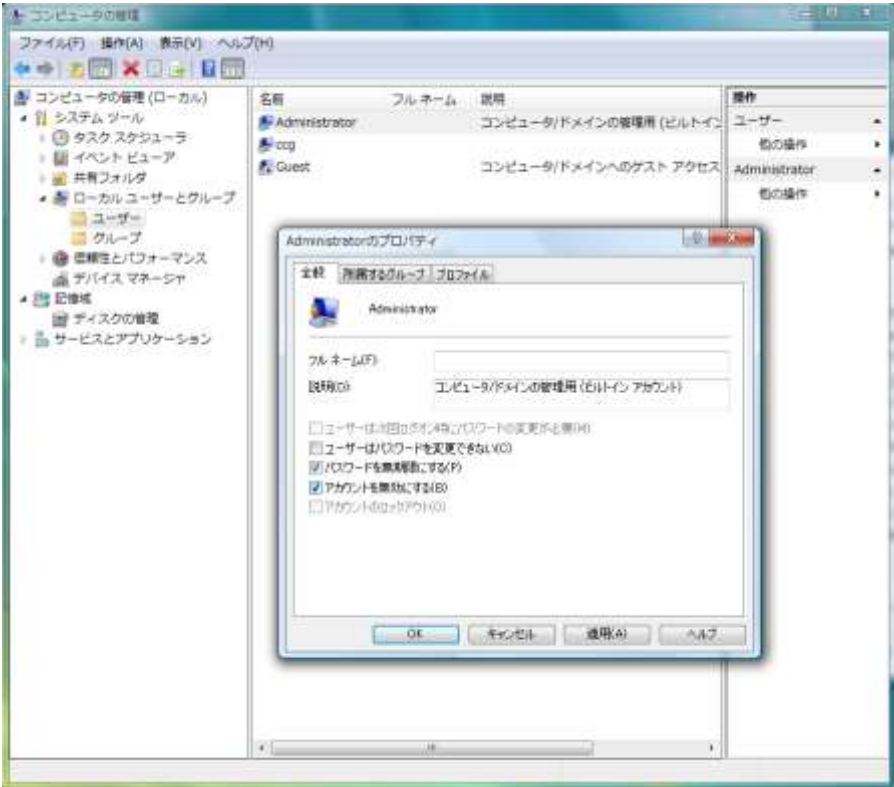


エクスプローラで「コンピューター」の部分で右クリックし、「管理」を選択します。

《手順 2》 Administrator のアカウントを有効にする。

「コンピューターの管理」→「システムツール」→「ローカルユーザーとグループ」
→「ユーザー」から「Administrator」を右クリックし、「プロパティ」を選択します。

「アカウントを無効にする」のチェックを外します。



(初期状態)

《手順 3》 Administrator での設定

Administrator でログインして再び LMTTOOLS の設定を行います。

サポートリクエストについて

弊社では日頃よりユーザーサポートの一環といたしまして、技術的なご質問につきましては、「サポートリクエスト」として以下のような手順で対応させて頂いております。

1. 電子メール等によるお客様からのお問い合わせ受領
2. お問い合わせ内容に応じて、弊社担当者を決定した上で、お問い合わせを受け付けた旨を、受付番号(MOE #)と共にお客様へ返信
3. 担当者より直接、お客様へご回答を送付

サポートリクエストは、出来る限り迅速な対応を心がけておりますが、より円滑に進めさせて頂くために、ご質問内容と一緒に以下の情報を必ずご記入下さるようご協力のほど宜しくお願い申し上げます。また、サポートリクエストは、下記のメールアドレス宛てに電子メールにてお送りくださいますようお願い申し上げます。

- ・ ご使用マシンのホスト名
- ・ OS のバージョン
- ・ MOE のバージョン
- ・ 学生の方につきましては、ご所属の研究室名
- ・ ライセンスエラーの場合は、*Can't check out license 'moe 20XX.XX'*の後に記載されているエラー番号(- XX)
- ・ 計算時のエラーの場合は、警告パネルの More...クリック時に表示される SVL Clash History の Report...クリック時のレポート内容

お客様のご契約されている保守サービス内容が「アカデミック保守契約」の場合、サポートリクエストは、必ず契約書に記載されているご登録者^{※1}からお申込み下さいますようお願いいたします。契約内容に関するご質問は ccg@molsis.co.jp までご連絡下さい。

※1 MOE を購入してから最初の 1 年間は、ご登録者以外の方からのサポートリクエストもお受けいたします。

サポートリクエスト受付窓口

E-Mail: ccg@molsis.co.jp

TEL: 03-3553-8030 (9:30~17:00 (土日祝日を除く))

FAX: 03-3553-8031

以上



<CCG 社日本総代理店>

株式会社 モルシス
ライフサイエンス部

URL: <https://www.molsis.co.jp/>

E-mail: ccg@molsis.co.jp

TEL: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031