

MOE 2022.02

新規インストール手順 (一般ユーザ用)

本紙は MOE を新規にインストールする手順について解説しています。

詳細は各 OS のインストール手順書をご覧ください。

[MOE サポート | ドキュメント] <https://www.molsis.co.jp/lifescience/moe/support/>

■ インストール方法の選択

MOE 2022.02 のインストール方法は、「(A)ライセンスサーバからの MOE 2022.02 プログラムファイルのコピー」と、「(B)インストーラを使ったインストール」の 2 種類があります。ライセンスサーバとの通信環境や、インストーラの取得状況に応じて選択してください。

■ プログラムのインストール

(A) ライセンスサーバからの MOE 2022.02 プログラムファイルのコピー

ライセンスサーバマシンから、moe フォルダをコピーします。コピー先は、Windows では C:\¥ccg¥moe、Linux では /home/ccg/moe、Mac では /Applications/ccg/moe を推奨しています。

(B) インストーラを使ったインストール

- MOE 2022.02 Software DVD から、OS に応じたインストーラと必要に応じてデータファイル (moe_2022_02_installer_datafile.dat ; 全 OS 共通) を取得して同一のフォルダに配置します。これらが同一フォルダに無い場合は、インストール開始後に現れるパネルでデータファイルのパスを指定する必要があります。データファイルは、インストールの過程でダウンロードすることもできます。この場合はデータファイルを予め用意する必要はありません。

[重要] DVD に収録されているデータファイルを用いる場合は、ファイル結合が必要です。操作手順は説明書「データファイルの準備」をご確認ください。

次の対応表のとおり OS に対応したインストーラを実行します。

OS	インストーラ名	インストーラの実行方法
Windows	moe_2022_02_windows_installer.exe	自己解凍形式のため、解凍ツールは必要ありません。 ダブルクリックしてインストーラを起動します。
Mac OS	moe_2022_02_macos_installer.dmg	dmg ファイルをダブルクリックし、得られたインストーラをダブルクリックします。

Linux	moe_2022_02_linux_installer.bin	以下のコマンドを入力します。 sh moe_2022_02_linux_installer.bin
-------	---------------------------------	--

2. インストーラの指示に従ってインストールを行います。
 - * インストール先は、Windows では C:\¥ccg¥moe、Linux では /home/ccg/moe、Mac では /Applications/ccg/moe を推奨しています。
3. ライセンスファイル license.dat を、インストールした moe フォルダ直下の同名ファイルに上書きコピーします。
 - * MOE の管理者から新しいライセンスファイル license.dat が配布された場合は、新しいファイルで上書きコピーしてください。

■ オプションデータベースについて

MOE | Help | Database からダウンロードサイトに移動しファイルをダウンロード後、適宜インストールしてください。

leadlike_conf* データベースファイルには配座解析化合物、linker_2010_10.* データベースファイルには母核置換用リンカーフラグメント、chembl23_frag*には ChEMBL フラグメントデータベースを収録しています。gz ファイルは、\$MOE/bin/gzip -dv <file name>で展開することができます。exe ファイルは、実行すれば自動で展開できます。

必要に応じてハードディスクにコピー、展開してご利用ください。

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

Phone: 03-3553-8030

URL: <https://www.molsis.co.jp/> FAX: 03-3553-8031

E-mail: support@molsis.co.jp

Copyright © 2022 MOLSIS Inc.