

MOE 2022.02

バージョンアップ手順 (管理者用)

本紙は、ライセンスサーバマシンにおいて MOE 2020.09 を MOE 2022.02 にアップデートする方法について解説しています。

※ **重要**: ライセンス管理システム FlexNet Publisher は今回 11.18.1 にバージョンアップにバージョンアップしました。

MOE 2022.02 ご利用にあたり、FlexNet Publisher を更新してください。

※ MOE2020.09 から 32 bit OS はサポート対象外となりました。

■ ライセンスサービスの停止

1. クライアントを含む全ての MOE を終了して下さい。
2. ライセンスサービスを停止します。

(A). Windows の場合

① LMTOOLS の起動

C:\¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64 フォルダの **lmtools.exe** を右クリックし、現れるメニューから「管理者として実行」を選択して管理者権限で実行します。

② Start/Stop/Reload タブに移動します。

③ サービスのリストから「MOE License」が選択されていることを確認します。

(古いライセンスサービスをご利用頂いている方はサービス名が異なっている(「FLEXlm License Manager」など)可能性があります。古いライセンスサービス名の場合は削除して新たに「MOE License」でサービスを作り直してください。)

④ Stop Server ボタンでサービスを停止します。

(B).Linux の場合

ターミナルから以下のコマンドを実行します。

```
/home/ccg/moe/lm/bin/lmutil lmdown -c /home/ccg/moe/license.dat
```

(~/moe ディレクトリまでのパスは適宜環境に合わせて下さい。)

(C).Mac OS の場合

ターミナルから以下のコマンドを実行します。

```
/Applications/ccg/moe/lm/bin/lmutil lmdown -c /Applications/ccg/moe/license.dat
```

(~/moe ディレクトリまでのパスは適宜環境に合わせて下さい。)

■ MOE 2022.02 プログラムのインストール

1. 現在の moe フォルダを、名前を変えてバックアップしておきます。
moe フォルダは、Windows では C:\¥ccg¥moe、Linux では /home/ccg/moe、Mac では /Applications/ccg/moe などです。
2. 別途弊社からご連絡した CCG 社のダウンロードサイト (<https://www.chemcomp.com/download/>) または MOE 2022.02 Software DVD から、OS に応じたインストーラとデータファイル (moe_2022_02_installer_datafile.dat ; 全 OS 共通) を取得します。インストール時、インストーラとデータファイルは同一のフォルダに配置します。これ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。

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

3. 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、元の moe フォルダが存在した場所を指定してください。
4. 元の moe フォルダ内のライセンスファイル license.dat を、新しくインストールした moe フォルダ直下の同名ファイルに上書きコピーします。
5. 別途弊社からお送りした新しいライセンス (ダウンロード用ライセンスを除く) がある場合は、次頁を参照してライセンス内容を新しくインストールした moe フォルダ直下の license.dat に適用します。
6. オリジナル SVL ファイルがある場合は、バックアップした旧 moe の \$MOE/custom/svl/ フォルダから新しい moe の \$MOE/custom/svl/ フォルダ内にコピーしてください (\$MOE は moe をインストールしたフォルダです)。

【弊社から別途ライセンスファイルをお送りした場合の編集作業について(前頁手順5.)】

moe フォルダ直下の license.dat をテキストエディタで編集します。

標準のライセンス情報を上書きする形で、お送りした新しいライセンス情報を貼り付けた後、さらに次の例のようにマシン環境に合わせて編集します。

DAEMON 行の chemcompd のファイルパスを編集します。MOE2020 よりライセンス管理システムに関するファイルは **\$MOE/lm/**以下にまとめられていることにご注意ください。

新しいライセンス情報を貼り付けた license.dat 内容例

```
SERVER MOESVR 09AF1234B234 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/lm/bin/chemcompd
FEATURE moe chemcompd 2023.04 30-sep-2022 5 SIGN="A126 49E6 122A 3AAA ¥
    3CBC 2345 8765 A677 2B1A 5963 B7A7 002A ABA6 4643 345F 1236 ¥
    123A 4222 1233 22C2 888B"
```

編集

マシン環境に合わせて編集した例

```
SERVER MOESVR 09AF1234B234 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd C:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥chemcompd
FEATURE moe chemcompd 2023.04 30-sep-2023 5 SIGN="A126 49E6 122A 3AAA ¥
    3CBC 2345 8765 A677 2B1A 5963 B7A7 002A ABA6 4643 345F 1236 ¥
    123A 4222 1233 22C2 888B"
```

編集例は Windows 環境で MOE を C:¥ccg¥moe にインストールした場合です。

他の環境の場合は、下線部をそれぞれ下記のように編集して下さい。

Windows 環境の例 C:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥chemcompd

Linux 環境の例 /home/ccg/moe/lm/bin-lnx64/chemcompd

Mac OS 環境の例 /Applications/ccg/moe/lm/bin-mac64/chemcompd

(~/moe ディレクトリまでのパスは適宜環境に合わせて下さい。また、ライセンスファイルの詳細については各 OS 向け手順書内「第2章 管理者編 第1節 ライセンスサーバ設定」のライセンス管理システム 補足説明を参照下さい。)

■ ライセンスサービスの開始

(A). Windows の場合

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、現れるメニューから「管理者として実行」を選択して管理者権限で実行します。

② Config Services のタブに移動します。既に「MOE License」サービスがあれば次に進みます。無ければ新しく以下の情報を入力してサービスを作成します。

③ 必要な情報を入力します。

- Service Name: **MOE License**
- Path to the lmgrd.exe file: **C:¥ccg¥moe¥lm¥bin-win64¥lmgrd.exe**
- Path to the license file: **C:¥ccg¥moe¥license.dat**
- Path to the debug.log file: **C:¥ccg¥moe¥lm¥flex.log**
- Use Services チェックボックスをオンにします。

- Start Server at Power Up チェックボックスをオンにします。
Save Service ボタンをクリックして設定を保存します。

- ④ Start/Stop/Reload タブに移動します。
- ⑤ サービスのリストから「MOE License」が選択されていることを確認します。
- ⑥ Start Server ボタンでサービスを開始します。

(B). Linux の場合

ターミナルから以下のコマンドを実行します。※ コマンドはコピー&ペーストしないでください。

```
/home/ccg/moe/lm/bin/lmgrd -c /home/ccg/moe/license.dat  
-l /home/ccg/moe/lm/flex.log
```

(~/moe ディレクトリまでのパスは適宜環境に合わせて下さい。)

(C). Mac OS の場合

ターミナルから以下のコマンドを実行します。※ コマンドはコピー&ペーストしないでください。

```
/Applications/ccg/moe/lm/bin/lmgrd -c /Applications/ccg/moe/license.dat  
-l /Applications/ccg/moe/lm/flex.log
```

(~/moe ディレクトリまでのパスは適宜環境に合わせて下さい。)

(D). Linux あるいは Mac OS でライセンス管理アプリケーション「chemcomp-licadmin」を利用する場合

ターミナルから以下のコマンドを実行します。

```
sudo $MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin load
```

(\$MOE は、MOE インストールフォルダです。)

■ 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、chemblr23_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

URL: <https://www.molsis.co.jp/>
E-mail: ccg@molsis.co.jp

Phone: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

Copyright © 2022 MOLSIS Inc.