

MOE 2022.02 インストール手順書 (macOS 版)

○本編について

本編は macOS への MOE 2022.02 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4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 2022.02 インストール手順書 (macOS 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	23
第3節 RCSB Download 設定	27
第3章 管理者編	30
第1節 ライセンスサーバ設定	31
第4章 トラブルシューティング	44

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[第4章 トラブルシューティング](#)を掲載しておりますので、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、ライセンスサーバ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、ライセンスサーバの OS が異なる場合は[各種 OS ごとの「MOE 2022.02 インストール手順書」](#)をご覧ください。

※ macOS に MOE の拡張機能 (MOE/web、MOE/smp の設定) の設定を行いたい場合は、[「MOE 2022.02 インストール手順書 \(Linux 版\)」](#)を参照してください。

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管理者にお問い合わせください。

1. MOE 2022.02 のメディア、もしくは、ダウンロードしたインストーラー（以下）
 - ・ moe_2022_02_macos_installer.dmg

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。

- ① 弊社より新規にご送付したもの
- ② ライセンスサーバもしくはクライアント上で今まで使用していたもの
(弊社手順書に従ってインストールされた場合は
/Applications/ccg/moe/license.dat がライセンスファイルです。)
- ③ 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

第2章 一般ユーザ編

第1節 MOE 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 の操作をメインとした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、ライセンスサーバや MOE/web、MOE/smp などの設定を行われる方もこの章を参照して 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、MOE/web、MOE/smp の設定は「インストール手順書 (Linux 版)」を参照してください。

[1] インストールの流れ

以下の手順にそ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] 以前の MOE ディレクトリの名前の変更	更新
4. [5] MOE 2022.02 のインストール	新規・更新
5. [6] ライセンスの設定	新規・更新
6. [7] MOE 2022.02 起動確認	新規・更新
7. [8] 既存 SVL プログラムの移行	更新
8. [9] パッチ情報の確認	新規・更新
9. [10] MOE 2020.09 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 2022.02 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、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	ネットワーク環境の確認

チェック 1 マシン構成の確認

動作要件である Intel CPU を搭載した macOS 10.14 (Mojave) 以上、あるいは Apple Silicon (M1) を搭載した macOS 11 (Big Sur) 以上であることを確認します。

※それ以前のバージョンでも動作する可能性がありますが、正式にはサポートしていません。

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

[Macintosh HD > 情報を見る] でディスクの空き容量を確認します。



○この手順書では、「Macintosh HD」に MOE をインストールします。

「Macintosh HD」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。

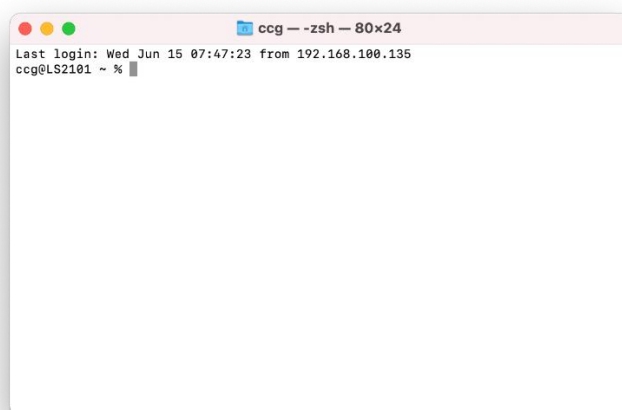
インストール方法	空き容量
MOE 最小構成 (プロジェクトデータベースなし macOS 上で稼働させるファイルのみインストール)	736 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム (macOS 上で稼働させるファイルのみインストール)	10.7 GB 以上
MOE 本体のみ フルインストール	10.7 GB 以上
<推奨> MOE + 母核置換用リンカーデータベース	12.5 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース	18 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース + Lead-like 化合物配座解析データベース + ChEMBL データベース	20 GB 以上

チェック 3 ネットワーク環境の確認

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

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

<<手順 1>> ターミナルの起動



[Macintosh HD > アプリケーション > ユーティリティ > ターミナル] から、ターミナルを起動します。

《手順 2》 PING コマンドによるライセンスサーバとの通信確認

○この手順書ではライセンスサーバのホスト名(マシン名)を「moeserver」とします。
ターミナルで以下のコマンドを実行します(\$ より右を入力します。)

```
$ ping -c 5 moeserver
```

正常にライセンスサーバを認識できていれば下記のようなメッセージが表示されます。

```
$ ping -c 5 moeserver
PING moeserver (192.168.10.10): 56 data bytes
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=0 ttl=64 time=0.079 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=1 ttl=64 time=0.117 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=2 ttl=64 time=0.119 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=3 ttl=64 time=0.159 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=4 ttl=64 time=0.161 ms

--- moeserver ping statistics ---
5 packets transmitted, 5 packets received, 0.0% packet loss
round-trip min/avg/max/stddev = 0.079/0.127/0.161/0.030 ms
```

もし正しく認識できていない場合は、

```
$ ping -c 5 moeserker
ping: cannot resolve moeserver: Unknown host
```

などと応答されます。

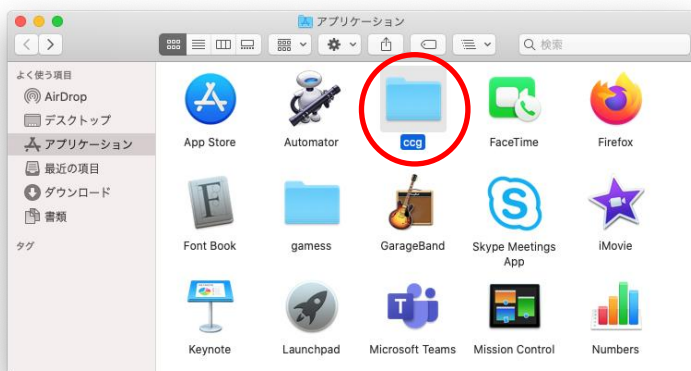
もし、この方法でマシンが正しく認識できない場合は、「[第4章 トラブルシューティング](#)
[\[1\]MOE ライセンスサーバが認識できない](#)」を参照して下さい。

※ 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**

インストールするマシンに初めて MOE をインストールする場合は、インストールを始める前にインストール環境の設定を行います。

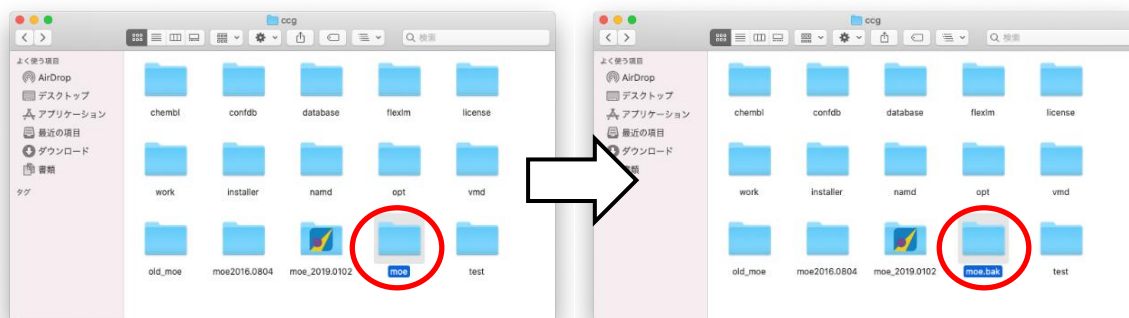
「Macintosh HD」以外に MOE をインストールする場合は、インストールするドライブで下記作業を行います。



[Macintosh HD > アプリケーション]の直下に「ccg」ディレクトリを作成します。

[4] 以前の MOE ディレクトリの名前の変更 **更新**

以前の MOE をインストールされていた方は、以前の MOE のディレクトリの名前を「moe」から「moe.bak」等に変更します。



[5] MOE 2022.02 のインストール **新規・更新**

MOE 2022.02 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

データファイルを自動的にダウンロードする[オンラインインストール](#)と、データファイルをダウンロードサイトから入手する[オフラインインストール](#)が用意されています。DVD に収録されたデータファイルを用いる場合は、[オフラインインストール](#)に準じます。

【重要】 オフラインインストール

以下の手順でインストール前にデータファイル (moe_2022_02_installer_datafile.dat) をご用意ください。

(I) ダウンロードサイトから得たデータファイルを用いる場合は、データファイルは、MOE のダウンロードサイト中で、“Switch to Offline Installation” を選び、“Download Data File for All Platforms” からダウンロードしてください。



(II) DVD に収録されているデータファイルを用いる場合は、複数ファイルに分かれているため、事前にファイルの結合が必要です。操作手順は説明書「データファイルの準備」でご確認ください。

オフラインインストールで、データファイルを事前に用意してインストールされる場合、macOS 用インストーラーとデータファイル（以下）をローカルのハードディスクに保存します。

- ・ moe_2022_02_macos_installer.dmg
- ・ moe_2022_02_installer_datafile.dat

※データファイル moe_2022_02_installer_datafile.dat は、デスクトップやダウンロードフォルダにある場合、インストーラーからアクセスできない可能性があるため、**[Macintosh HD] > アプリケーション > ccg** 等に配置することを推奨します。

※データファイルは、プログラムのインストール中にダウンロードすることもできます。

※インストーラーは使用されずに MOE をアーカイブ (moe_2022_02_archive.tgz、moe_2022_02_archive.zip または moe_2022_02_archive.dmg) からインストールされる場合は、「[第3章 \[3\]アーカイブからの MOE のインストール](#)」をご参照ください。

オンラインインストールをされる場合は、次の手順に進みます。

<<手順 2>> ファイルの解凍

「moe_2022_02_macos_installer.dmg」をダブルクリックします。

もし以下のようなメッセージが表示された場合は、GateKeeper の設定を行ってからインストールを行ってください。

“moe_2022_02_macos_installer” は壊れているため開けません。ゴミ箱に入れる必要がありません。

[回避方法]

[システム環境設定] => [セキュリティとプライバシー] => [一般タブ] を選択
ダウンロードしたアプリケーションの実行許可を「すべてのアプリケーションを許可」に変更。必要であれば MOE のインストール後、Gatekeeper の設定を元に戻します。

<<手順 3>> インストーラーの実行

moe_2022_02_macos_installer をダブルクリックします。インストーラーが起動します。もし以下のようなメッセージが表示された場合は、「開く」を押します。

“moe_2022_02_macos_installer” はインターネットからダウンロードされたアプリケーションです。開いてもよろしいですか？



「Japanese - 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。

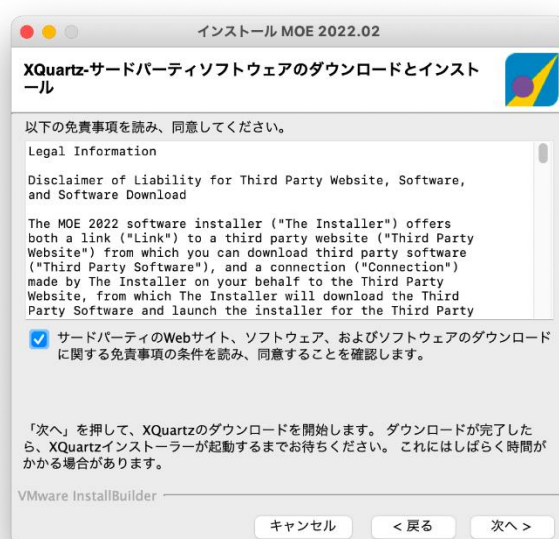


X11 ウィンドウシステムがインストールされていない場合、このような画面が表示されます。「XQuartz をダウンロードして XQuartz インストーラーを起動」にチェックを入れて「次へ」を押します。表示されている URL 先から XQuartz のインストーラーをダウンロードし、別途インストールすることもできます。

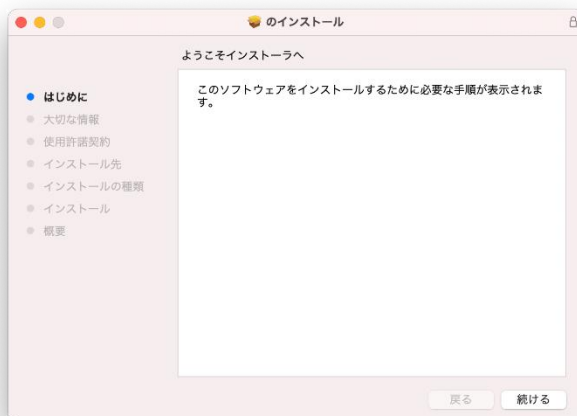
[重要] XQuartz のバージョン

XQuartz 2.8.0 をインストールしてください。XQuartz 2.8.1 では、テキストレンダリングのパフォーマンスのバグが発生したため、使用しないでください。

「XQuartz をダウンロードして XQuartz インストーラーを起動」にチェックを入れて次へ進むと、XQuartz 2.8.0 がインストールされるようになります。



XQuartz のダウンロードとインストールを行うために、「サードパーティの Web サイト、ソフトウェア、およびソフトウェアのダウンロードに関する免責事項の条件を読み、同意することを確認します。」にチェックを入れて「次へ」を押します。



XQuartz のインストーラーがダウンロードされ、自動的にインストーラーが起動しますので、画面にしたがって XQuartz をインストールします。xQuartz のインストール後、macOS を再起動してから、再度 MOE のインストーラーを起動して MOE のインストールを進めてください。



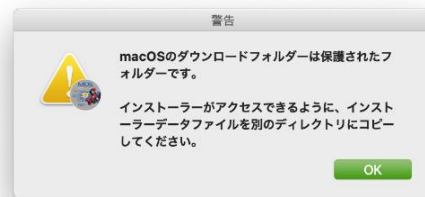
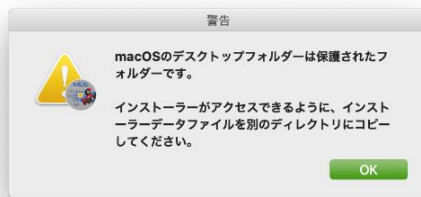
X11 ウィンドウシステムがインストールされている場合、使用許諾契約 (Legal Notice) が表示されます。MOE のライセンス契約は、別途書面にて締結させていただいておりますので、ここでは、「はい、このライセンス契約の条件に同意します」を選択して、「次へ」を押します。



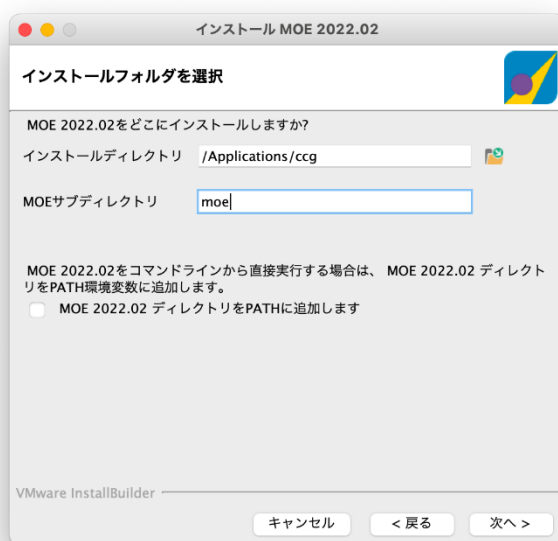
インストールするコンポーネントを指定します。容量等に問題がなければ**すべてにチェックを入れてインストールすることを推奨**します。「次へ」を押します。



オンラインインストールの場合は、「データファイルのダウンロード」を選択します。オフラインインストールの場合は、「データファイル」を選択し、データファイル (moe_2022_02_installer_datafile.dat) の場所を指定します。オンラインインストールの場合は、ダウンロードされるデータファイルのファイルサイズが約 7GB 以上あることにご注意ください。選択後、「次へ」を押します。



データファイルがデスクトップやダウンロードフォルダにある場合、上記のようなメッセージが表示されることがあります。このメッセージが表示された場合、データファイルを[Macintosh HD > アプリケーション > ccg] 等に配置した後にデータファイルの場所を指定し直してください。



MOE 2022.02 のインストール先を指定します。インストールディレクトリは、先に作成した「/Applications/ccg」を指定してください。MOE サブディレクトリは、「moe」に変更してください。パネル下部にある「MOE 2022.02 ディレクトリをPATHに追加します」は特に必要がなければ「オフ」のまま、「次へ」を押してください。



すでに moe のディレクトリがある場合、上記のメッセージが表示されることがあります。

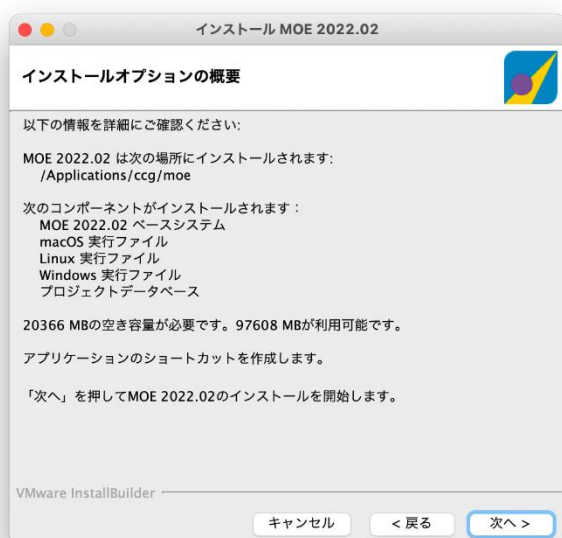
このメッセージが表示された場合、「OK」を押して閉じた後、[\[4\] 以前の MOE ディレクトリの名前の変更](#)を参照して、以前の MOE ディレクトリの名前を「moe.bak」等に変更してください。



起動用のショートカット（エイリアス）を作成する場合は、その位置を選択してください。エイリアスは MOE 2022.02 のインストール後でも作成できます。「次へ」を押します。



構成オプションを指定します。これらは MOE 2022.02 のインストール後でも設定できます。「次へ」を押します。



確認画面が開きます。問題なければ「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 5 分から 30 分ほどで終了します。データファイルのダウンロードを選択した場合、始めにデータファイルのダウンロードが行われます。

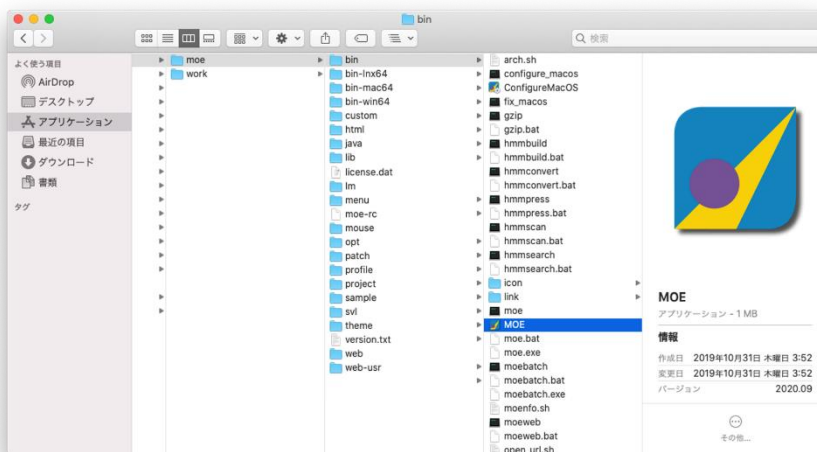


「終了」を押してください。
以上の手順でインストールは完了です。

<<手順 4>> エイリアスのマニュアル作成

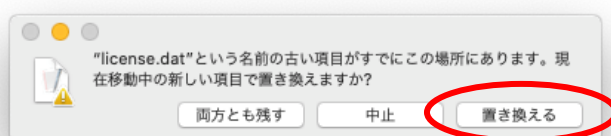
インストーラーで指定した位置以外にもエイリアスを作成したい場合や、削除したエイリアスを再作成したい場合は、次の手順で作成します。

インストールした MOE ディレクトリを開きます。



[Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe > bin > MOE] のアイコンをデスクトップや Dock バーなどエイリアスを作成したい場所にドラッグ&ドロップします。

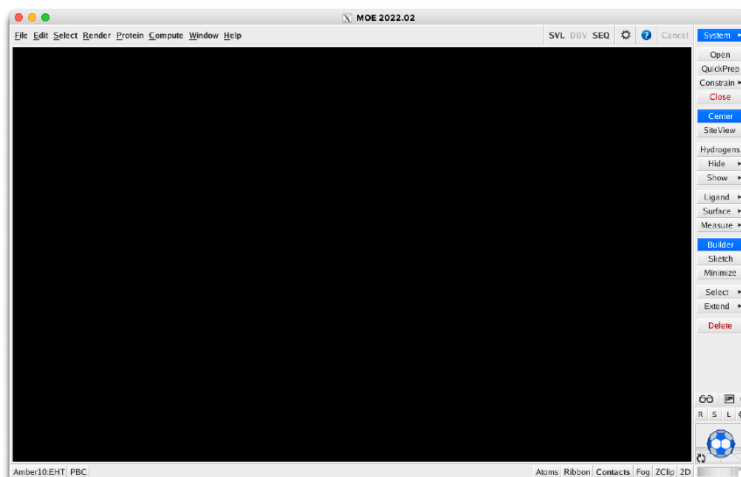
[6] ライセンスの設定 **新規・更新**



MOE をインストールした [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe] 下にはダミーのライセンスファイル「license.dat」が一緒にインストールされています。これまでお使いの MOE のライセンスファイルまたは、ライセンスサーバ上にあるライセンスファイルを上書きしてください。構成オプションの設定で「license.dat のインストール」の設定を行った場合はこの操作は不要です。

[7] MOE 2022.02 起動確認 新規・更新

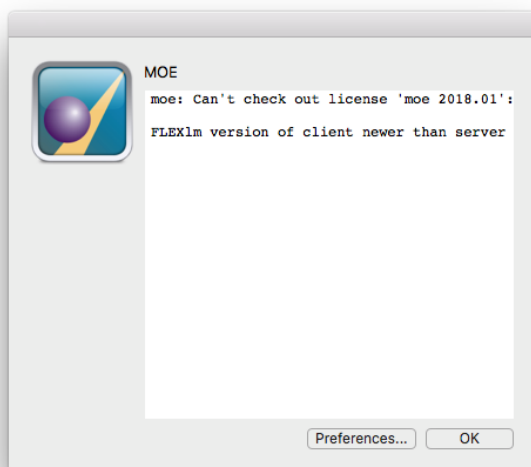
MOE のエイリアスをダブルクリックして、MOE を起動させます。



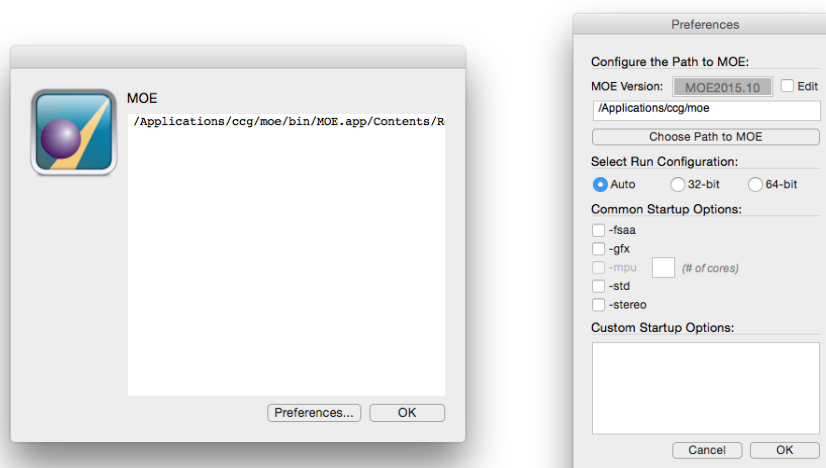
正常に起動すると上図のウィンドウが表示されます。

起動を確認後、インストーラーのファイルは削除しても構いません。

※以下のエラーが表示された場合は、古い MOE のライセンス管理デーモンが使用されています。
管理者に MOE のライセンス管理デーモンの更新を依頼してください。

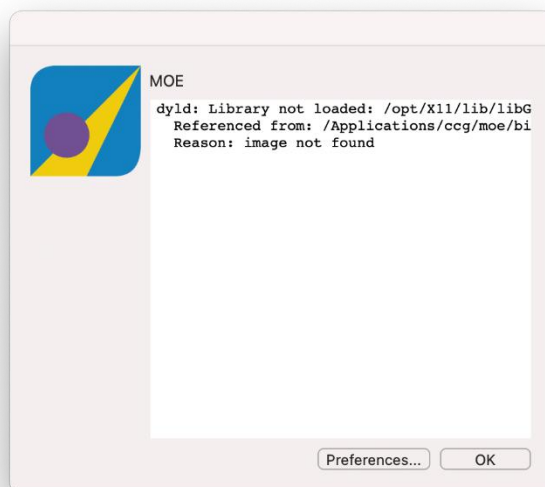


※MOE 起動時に以下のようなメッセージ（左図）が現れた場合は、Preference（右図）から設定します。



「 /Applications/ccg/moe 」を直接記入、または、**Choose Path to MOE** から指定します。設定後「OK」を押します。もう一度 MOE を起動します。設定後もエラーが出力される場合は PC を再起動してください。

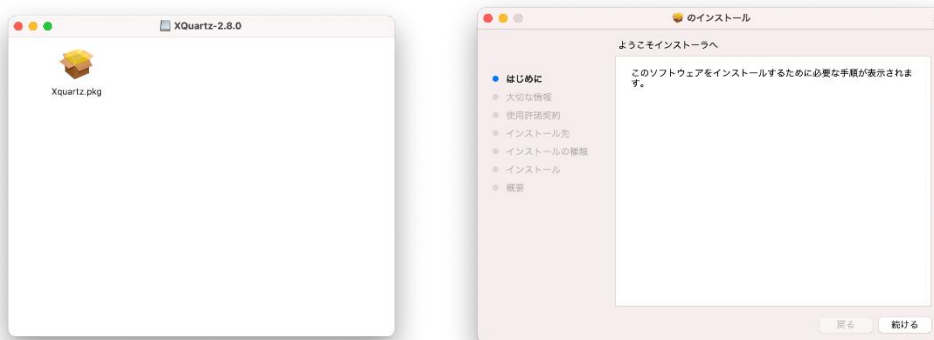
※MOE 起動時に X11 のインストールについて通知メッセージが現れた場合は、XQuartz のインストールを行ってください。



Apple 社のサイト (<https://www.xquartz.org/>) よりダウンロードした dmg 形式ファイルを解凍し、得られる pkg 形式ファイルをダブルクリックすると xQuartz のインストールが行われます。xQuartz のインストール後、**macOS を再起動してから** MOE の起動をお試しください。

[重要] XQuartz のバージョン

XQuartz 2.8.0 をインストールしてください。XQuartz 2.8.1 では、テキストレンダリングのパフォーマンスのバグが発生したため、使用しないでください。



その他、しばらくたっても MOE が起動しないようでしたら「[第 4 章 トラブルシューティング \[2\]MOE が起動しない](#)」を参照して下さい。

[8] 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、あらかじめ名前を変更した「moe.bak」フォルダから、カスタマイズした SVL プログラム群を \$MOE/custom/svl に ([/Applications/ccg/moe.bak/custom/svl] 内の *.svl および run フォルダを [/Applications/ccg/moe/custom/svl] 内に) 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。

[9] パッチ情報の確認 **新規・更新**

MOE のインストール CD 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 2022.02 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 2022.02 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 2022.02 の更新を行ってください。

[10] MOE 2020.09 のアンインストール **更新**

MOE 2022.02 が正常に動作することを確認した後、MOE 2020.09 が不要な場合はディレクトリ (例 moe.bak) ごと削除して下さい。

以上で MOE 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	約 1.9GB
Lead-like 化合物配座解析データベース	leadlike_conf_001~008.mdb	約 5.1GB
ChEMBL フラグメントデータベース	chembl_r23_frag.mdb	約 2.1GB
ChEMBL 低分子データベース	chembl_r23_150.mdb	63.6MB

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 2020.09 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方法【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

「Macintosh HD > 情報を見る」でディスクの空き容量を確認します。



○この手順書では、「Macintosh HD」に MOE をインストールします。

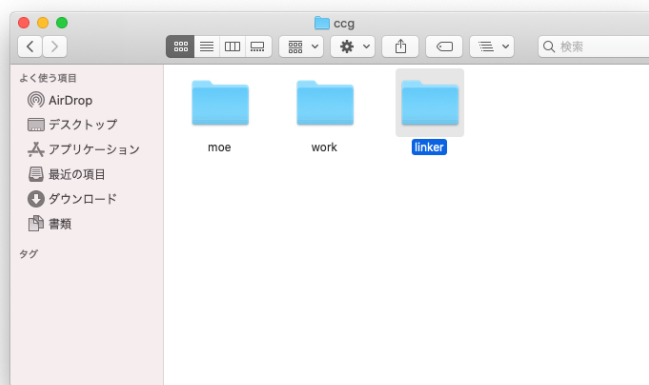
「Macintosh HD」以外に MOE をインストールする場合は、インストールするドライブの空き容量を確認します

※全てのデータベースをインストールするには約 18GB の空き容量が必要です。

[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 2》 linker フォルダの作成 新規

ファイルを保存する場所として linker ディレクトリ [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > linker] を作成します。



《手順 3》 linker_2010_10.mdb ファイルのインストール 新規

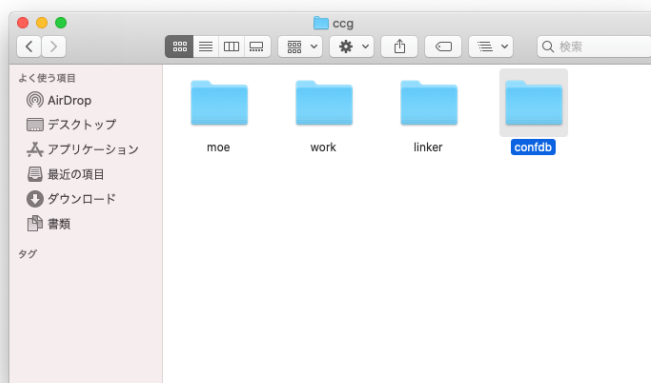
ダウンロードして取得した、もしくは MOE Databases DVD-ROM 内の linker_2010_10.mdb.gz ファイルを、linker フォルダにコピーし、解凍ツールで解凍します。解凍後、gz ファイルを削除してください。

以上で母核置換用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のインストール環境の設定 [新規](#)

ファイルを保存する場所として confdb ディレクトリ [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > confdb] を作成します。



《手順 2》 配座解析データベースのコピー [新規](#)

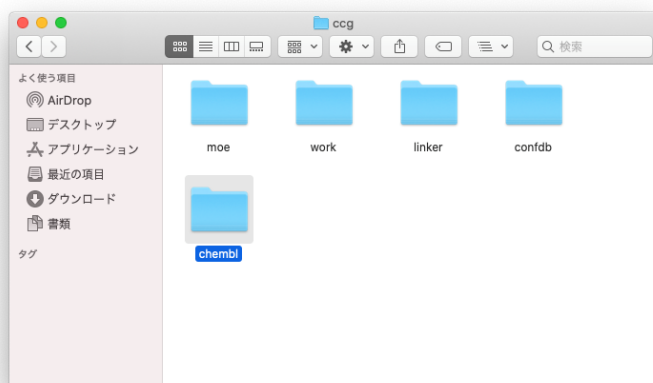
ダウンロードして取得した、もしくは MOE Databases DVD-ROM 内の leadlike_conf.tgz ファイルを、confdb フォルダにコピーし、解凍ツールで解凍します。leadlike_conf_001.mdb ~ 008.mdb の 8 個のファイルが作成されます。解凍後、tgz ファイルを削除してください。

以上で Lead-like 化合物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](#)

ファイルを保存する場所として chembl ディレクトリ [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > chembl] を作成します。



《手順 2》 chemblr23_frgs.mdb.gz のインストール [新規](#)

ダウンロードして取得した、もしくは MOE Databases DVD-ROM 内の chemblr23_frgs.mdb.gz ファイルを、chembl フォルダにコピーし、解凍ツールで解凍します。解凍後、gz ファイルは削除してください。

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）フラグメントデータベースのインストール

《手順 1》 ChEMBL 低分子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](#)

ファイルを保存する場所として chembl ディレクトリ [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > chembl] を作成します。

《手順 2》 chemblr23_150.mdb.gz のインストール [新規](#)

ダウンロードして取得した、もしくは MOE Databases DVD-ROM 内の chemblr23_150.mdb.gz ファイルを、chembl フォルダにコピーし、解凍ツールで解凍します。解凍後、gz ファイルは削除してください。

以上で ChEMBL 低分子フラグメント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

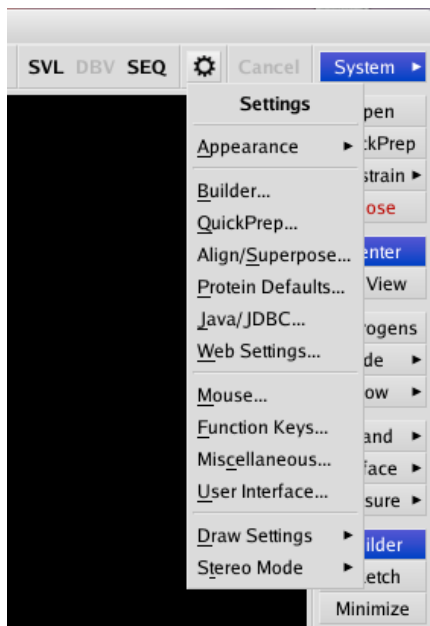
RCSB Download とは RCSB Protein Data Bank の Web サイトより MOE を経由して直接 PDB ファイルをダウンロードする機能です。ネットワーク環境によってはセキュリティ対策のためにプロキシサーバが設置されている可能性があります。このような環境で RCSB Download 機能を使用する場合は下記の手順で設定を行います。

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

[1] RCSB Download 設定

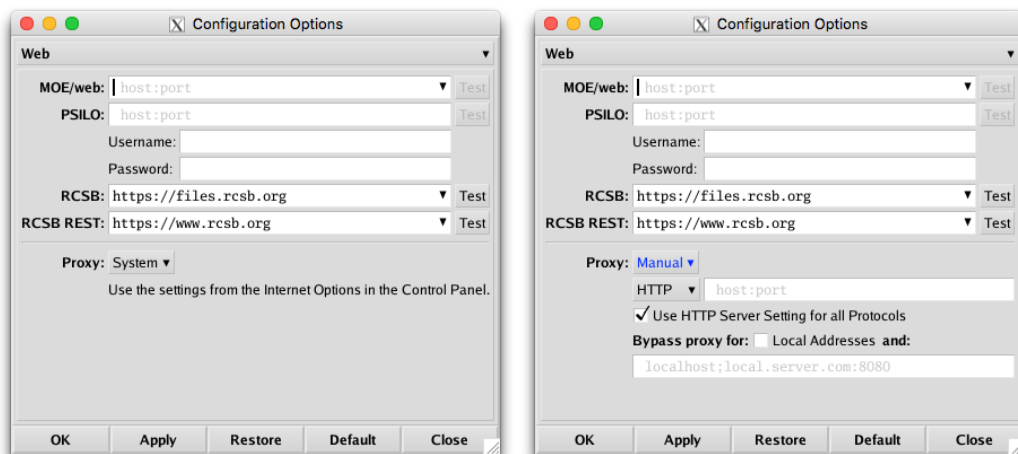
≪手順 1≫ Proxy Settings の起動

MOE を起動し  | **Web Settings** を選択します。



≪手順 2≫ Proxy Settings の設定

Use: System Proxy settings を選びます。環境変数で定義されている Proxy 設定を参照し自動設定します。もしこれで正常に設定ができない場合は Manual proxy configuration を選び、手動で入力します。



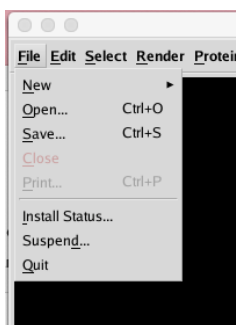
Proxy: System

Proxy: Manual

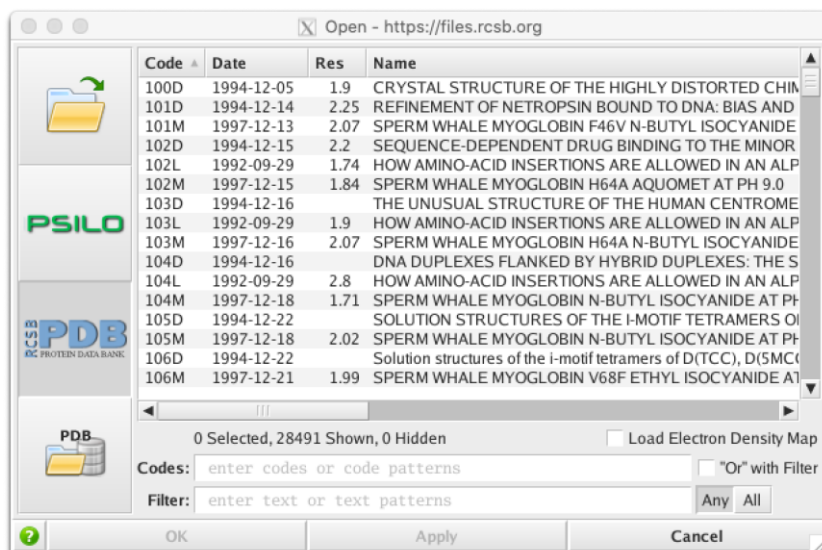
- ※ Manual proxy configuration には指定されているホスト名やポート番号を指定してください。詳細については MOE のインストールディレクトリ (/Applications/ccg/moe) の `html/appendix/settings.htm` をご参照ください。
- ※ ネットワーク環境の詳細については、ネットワーク管理者にお問い合わせください。

《手順 3》 Open パネルを開く

MOE | File | Open を起動します。



《手順 4》 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。



正常に接続が完了すると上図のウィンドウのように PDB リストが表示されます。
PDB のリストをダブルクリックするとダウンロード可能です。

以上で RCSB Download 設定は、完了です。

第3章 管理者編

第1節 ライセンスサーバ設定

第1節 ライセンスサーバ設定

MOE を使用するためには、弊社に登録した MOE ライセンスサーバで MOE のライセンス使用状態を管理するためのライセンス管理デーモンを設定する必要があります。ライセンス管理デーモンを設定することで、MOE 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 MOE を使用することが可能になります。MOE のライセンス管理は、Flexera 社の FlexNet Publisher (バージョン 11.18.1) を使用しています。

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

※ 詳細は、MOE のインストールディレクトリの `html/install/license_install.htm` をご参照ください。

※ MOE 2022.02 のライセンス管理デーモン (Imgrd と chemcompd) はバージョン 11.18.1 に更新されました。MOE 2022.02 のご使用にあたり、ライセンス管理デーモンをバージョン 11.18.1 に更新する必要があります。

[1] ライセンスサーバ設定の流れ

ライセンスサーバ設定の内容は、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設定を行ってください。

【ライセンスサーバの新規設定】

対象者 MOE を新規導入された方、または MOE のライセンスサーバを変更された方。

1. [\[2\] ライセンスサーバ環境の確認](#)
2. [\[4\] MOE 2022.02 のインストール](#)
3. [\[5\] ライセンスファイルの編集とインストール](#)
4. [\[6\] ライセンス管理デーモンの起動](#)
5. [\[7\] MOE 2022.02 起動確認](#)
6. [\[8\] 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 2022.02 にバージョンアップされる方。

1. [\[2\] ライセンスサーバ環境の確認](#)
2. [\[3\] ライセンス管理デーモンの停止](#)
3. [\[4\] MOE 2022.02 のインストール](#)
4. [\[5\] ライセンスファイルの編集とインストール](#)
5. [\[6\] ライセンス管理デーモンの起動](#)
6. [\[7\] MOE 2022.02 起動確認](#)
7. [\[8\] 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. [\[2\]ライセンスサーバ環境の確認](#)
2. [\[3\]ライセンス管理デーモンの停止](#)
3. [\[5\]ライセンスファイルの編集とインストール](#)
4. [\[6\]ライセンス管理デーモンの起動](#)
5. [\[7\]MOE 2022.02 起動確認](#)

【ライセンス管理デーモンの削除】

対象者 ライセンスサーバの変更によりライセンス管理デーモンを削除される方。MOE の使用を終了される方。

1. [\[2\]ライセンスサーバ環境の確認](#)
2. [\[3\]ライセンス管理デーモンの停止](#)

[2] ライセンスサーバ環境の確認 [ライセンスサーバの新規設定](#)・[MOE のバージョンアップ](#)・[ライセンスファイルの更新](#)・[ライセンス管理デーモンの削除](#)

ライセンスサーバの環境が、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	ネットワーク環境の確認
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 2022.02 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。この手順書では、「Macintosh HD」に MOE をインストールします。[Macintosh HD > 情報を見る]でディスク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 最小構成 (プロジェクトデータベースなし macOS 上で稼働させるファイルのみインストール)	736 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム (macOS 上で稼働させるファイルのみインストール)	10.7 GB 以上
MOE 本体のみ フルインストール	10.7 GB 以上
<推奨> MOE + 母核置換用リンカーデータベース	12.5 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	18 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	20 GB 以上

※ ライセンスサーバ上でも MOE を使用する場合は<推奨>の構成をお勧めします。

※ ライセンスサーバ上で MOE を使用しない場合は、ライセンス管理デーモンのみのインストール (20 MB 程度) も可能です。ライセンス管理デーモン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_2022_license_manager_11.18.1.tgz (8 MB)
- ・ moe_2022_license_manager_11.18.1.zip (8 MB)

[Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe > lm]となるように「lm」ディレクトリを作成し、「lm」内で上記の tgz ファイルまたは zip ファイルを展開してください。

チェック 3 ユーザ権限の確認

手動でのライセンス管理デーモンの起動にはスーパーユーザ (root) は必要ありません。
ライセンスサーバ管理スクリプトを使用して設定される際は、管理者ユーザでログインする必要があります。

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。

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。

チェック 6 ライセンス管理システムの起動状況の確認

ターミナルから次のコマンドで確認します。

```
$ /Applications/ccg/moe/lm/bin/lmutil lmstat -a -c /Applications/ccg/moe/license.dat
```

【ご注意】 MOE 2020.09 以降から、lmutil のディレクトリパスが変更されています。

(ライセンス管理システム起動中の表示例)

```
lmutil - Copyright (c) 1989-2019 Flexera. All Rights Reserved.  
Flexible License Manager status on Wed 3/13/2019 08:51  
  
License server status: 7788@MOESERVER  
    License file(s) on MOESERVER: /Applications/ccg/moe/license.dat:  
  
MOESERVER: license server UP (MASTER) v11.16.0  
  
Vendor daemon status (on MOESERVER):  
  
    chemcompd: UP v11.16.0  
Feature usage info:  
  
Users of moe: (Total of 6 licenses issued; Total of 0 licenses in use)
```

もし、ライセンス管理システムが動いていない場合は下記のようなメッセージが表示されます。

```
lmgrd is not running: Cannot connect to license server system.  
(-15,570:36 "Operation now in progress")
```

[3] ライセンス管理デーモンの停止 **MOE のバージョンアップ・ライセンスファイルの更新・ ライセンス管理デーモンの削除**

現在、稼動しているライセンス管理デーモンを停止させます。

以下のコマンドはターミナルもしくはX11上のターミナルから実行してください。

下記 \$ より右を入力します。コマンドは1行で入力してください。

(※コマンドは、本手順書からコピー&ペーストで入力せず、手入力してください。)

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

[ご注意] MOE 2020.09以降から、lmutilのディレクトリパスが変更されています。

MOE 2019.01以前のバージョンを使用されている場合は以下のコマンドを入力してください。

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

正常にコマンドを入力できていれば確認のメッセージが表示されるので、**y** を押してライセンス管理デーモンを停止します。

[重要] 従来のライセンスデーモンの自動起動スクリプトを設定されていて、かつ、このサーバで今後 MOE を使用されない場合は、[「\[9\] ライセンス管理システム 補足説明 の <<補足 5>> 自動起動スクリプトの削除](#)」を参照して操作してください。

[4] MOE 2022.02 のインストール **ライセンスサーバの新規設定・MOE のバージョンアップ**

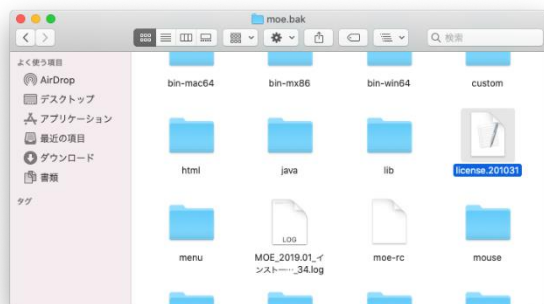
[\[第1章 第1節 MOE インストール\]](#)を参考にして MOE をインストールして下さい。

この手順書では、「Macintosh HD」に MOE をインストールします。

ただし、「[第1章 第1節 \[6\] ライセンスの設定](#)」以降の作業は、必要ありません。

[5] 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 (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。

[ご注意] MOE 2022.02 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。

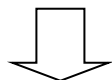
《手順 2》 ライセンスファイルの作成・編集

弊社よりお送りしたライセンスファイル license.dat を [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe] にコピーし、テキストエディタで下記のように編集します。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、その情報をテキストエディタにコピー&ペーストして下記の編集を行い、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。ライセンスサーバに利用する場合は、テキストエディタを使用してライセンス情報を編集してください。

```
SERVER MOESERVER ABABD042C585 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/bin/chemcompd
FEATURE moe chemcompd 2021.09 31-dec-2020 6 SIGN="019E 30CC 125C 32ED ¥
4B66 4D24 A640 BB48 EA0A 2F39 C6F1 000E 1E81 9446 722F 2523 ¥
6A38 4470 5CC3 26A2 D35E"
```

編集



(1 行目の下線部はサーバマシンの IP アドレスです)

```
SERVER 192.168.5.15 ABABD042C585 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd /Applications/ccg/moe/lm/bin-mac64/chemcompd
FEATURE moe chemcompd 2021.09 31-dec-2020 6 SIGN="019E 30CC 125C 32ED ¥
4B66 4D24 A640 BB48 EA0A 2F39 C6F1 000E 1E81 9446 722F 2523 ¥
6A38 4470 5CC3 26A2 D35E"
```

[1 行目] SERVER マシン名の変更

macOS ではドメインを設定していない場合、実際のマシン名には `.local` が付加された名前が適用されています。(例: 表示名 MOESERVER → 実際のマシン名 MOESERVER.local)
この場合、ライセンスサーバの実行や他のマシンからの参照を行えないため、ライセンスファイルのマシン名部分を IP アドレスに変更する必要があります。ドメインを設定している場合はマシン名そのままでも構いません。

[2 行目] DAEMON サーバ位置の変更

MOE のライセンスサーバ `chemcompd` のディレクトリパスを指定します。

[ご注意] MOE 2020.09 以降から、`chemcompd` のディレクトリパスが変更されていることにご注意ください。

※ ライセンスファイルの詳細は「[\[9\] ライセンス管理システム 補足説明](#)」を参照して下さい。

《手順 3》 ライセンスファイルの保存

編集した MOE ライセンスファイル [Macintosh HD > アプリケーション > `ccg` > `moe` > `license.dat`] を保存します。

[6] ライセンス管理デーモンの起動

[ライセンスサーバの新規設定](#)・[MOE のバージョンアップ](#)・[ライセンスファイルの更新](#)

【方法 1】 `$MOE/lm/bin/lmgrd` から直接起動する方法

ライセンス管理デーモンを起動します。以下のコマンドはターミナルもしくは X11 上のターミナルから実行してください。下記 `$` より右を入力します。コマンドは 1 行で入力してください。

(※コマンドは、本手順書からコピー&ペーストで入力せず、手入力してください。)

[ご注意] MOE 2020.09 以降から、`lmgrd` のディレクトリパスが変更されています。

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

ライセンスデーモンの自動起動設定については、「[\[9\] ライセンス管理システム 補足説明 の 《補足 3》 ライセンス管理デーモンの自動起動設定](#)」を参照してください。

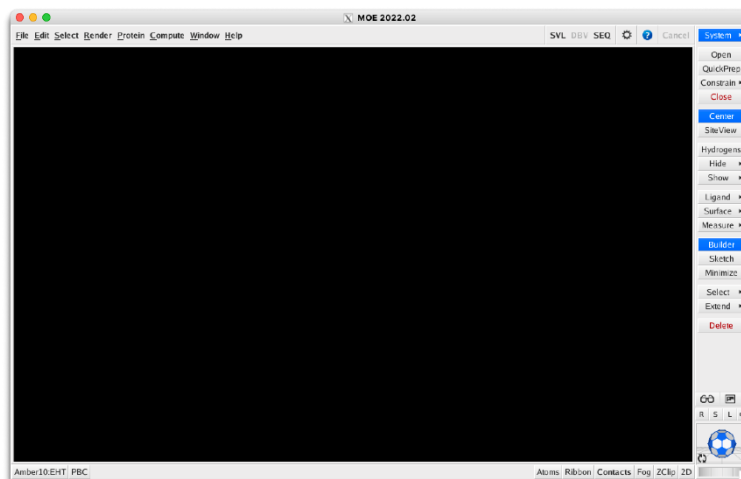
【方法 2】 ライセンスサーバ管理スクリプト「`chemcomp-licadmin`」による方法

この方法は、ライセンス管理デーモンの起動と自動起動設定を同時に行う方法です。

手順は、「[\[9\] ライセンス管理システム 補足説明 の 《補足 3》 ライセンス管理デーモンの自動起動設定](#)」を参照してください。

[7] MOE 2022.02 起動確認 **ライセンスサーバの新規設定**・**MOE のバージョンアップ**・**ライセンスファイルの更新**

moe エイリアスをダブルクリックして、MOE を起動します。



正常に起動すると上図のウィンドウが表示されます。**MOE | Help | License Info** から、ライセンス情報（マシン名 (Server)、トークン数 (Tokens)、有効期間 (Expires)) をご確認ください。

もししばらくたっても MOE が起動しないようでしたら

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

[8] パッチ情報の確認 **ライセンスサーバの新規設定**・**MOE のバージョンアップ**

MOE のインストール CD 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 2022.02 を最新版に更新してください。

弊社 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 2022.02 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 2022.02 の更新を行ってください。

以上でライセンスサーバの設定は、完了です。

[9] ライセンス管理システム 補足説明

MOE ライセンスサーバの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下さい。

《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。MOE のライセンス管理は、Flexera 社の FlexNet Publisher を利用しています。

《補足 2》 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なっています。

```
SERVER MOESERVER ABABD042C585 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd /Applications/ccg/moe/lm/bin-mac64/chemcompd
FEATURE moe chemcompd 2021.09 31-dec-2020 6 SIGN="019E 30CC 125C 32ED ¥
4B66 4D24 A640 BB48 EA0A 2F39 C6F1 000E 1E81 9446 722F 2523 ¥
6A38 4470 5CC3 26A2 D35E"
```

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) ライセンスサーバの IP アドレスでも代用可能です。

\$MOE/lm/bin/lmutil lmhostid hostname コマンドで取得される
ホスト名 (HOSTNAME) でも代用可能です。

id : \$MOE/lm/bin/lmutil lmhostid コマンドで取得される番号です。

これは、ライセンスサーバの LAN カードの MAC アドレスです。

ポート番号 : FlexNet 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 /Applications/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てください。

DAEMON chemcompd /Applications/ccg/moe/lm/bin/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、行ごとに異なります。

さらに詳細な内容は、以下のリンクを参照して下さい。

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

《補足 3》 ライセンス管理デーモンの自動起動設定

ライセンス管理デーモンの自動起動設定は、ライセンスサーバ管理スクリプト「chemcomp-licadmin」を使用して行います。

ご注意：従来の自動起動スクリプトは、MOE 2022.02 には含まれておりません。

[手順 1] 設定ファイル (chemcomp-licadmin.service.cfg) の編集

[Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe > lm > chemcomp-licadmin.service.cfg]
をテキストエディタで下記のように編集します。

編集前

```
(17, 18 行目)
# MOE_LMGRD_LIC_FILE=<path to the license file>/license.dat
# MOE_LMGRD_LOG_FILE=<path to the log file>/flex.log
```

編集後

```
MOE_LMGRD_LIC_FILE=/Applications/ccg/moe/license.dat
MOE_LMGRD_LOG_FILE=/Applications/ccg/moe/lm/flex.log
```

MOE_LMGRD_LIC_FILE には、ライセンスファイルのディレクトリパスを指定します。

MOE_LMGRD_LOG_FILE には、ライセンスログファイルのディレクトリパスを指定します。

ご注意：文頭のコメントアウト（#）も削除します。

[手順 2] コマンドの実行

ターミナルに次のコマンドを入力します。

```
$ sudo /Applications/ccg/moe/lm/bin/chemcomp-licadmin load
```

起動できた場合、「Loading chemcomp-licadmin ... OK」と表示されます。

[手順 3] MOE の起動確認

エイリアスから MOE を実行してください。起動できれば作業終了です。

コンピュータを再起動後、もう一度 MOE が起動するかどうかを確認してください。

デーモンを停止する場合は、次のコマンドを入力します。

```
$ sudo /Applications/ccg/moe/lm/bin/chemcomp-licadmin unload
```

正常に停止した場合、「Unloading chemcomp-licadmin ... OK」と表示されます。

《補足 4》 ライセンスサーバ管理スクリプト「chemcomp-licadmin」の主なコマンド chemcomp-licadmin を利用することで、これまで面倒であったライセンス管理システム操作を簡単に行うことができます。\$MOE は実際の MOE インストールフォルダに読み替えてください。

ライセンス管理システムの起動と自動起動の有効	sudo \$MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin load
ライセンス管理システムの停止と自動起動の無効	sudo \$MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin unload
ライセンス管理システムのステータス確認	sudo \$MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin status

《補足 5》 自動起動スクリプトの削除

従来のライセンス管理デーモンの自動起動スクリプトを設定されていて、かつ、このサーバで今後 MOE を使用されない場合は、以下の操作により自動起動スクリプトを削除します。

〔手順 1〕 自動起動スクリプトの登録確認

以下のコマンドを実行してください。\$ から右のコマンドを実行します。

```
$ launchctl list
```

リストの中に以下の行が表示されていれば自動起動スクリプトが設定されています。

```
com.chemcomp.FlexLM
```

〔手順 2〕 自動起動スクリプトの設定解除

以下のコマンドを入力します。

```
$ launchctl unload -w /System/Library/LaunchDaemons/com.chemcomp.flexlm.plist
```

〔手順 3〕 自動起動スクリプトの削除

以下のコマンドを入力します。

```
$ sudo rm /System/Library/LaunchDaemons/com.chemcomp.flexlm.plist
```

※注意※

macOS 10.12 (Sierra)等OSのバージョンによっては「/System/Library/LaunchDaemons/」を書き換えられない設定になっていることがあります。

1. リカバリーモードで起動 (command + R を押しながら起動)
2. 画面情報のメニューからユーティリティ > ターミナル
3. ターミナルで「csrutil disable」とコマンド入力後、マシンの再起動。
4. 手順 1 と手順 2 の操作を行い、マシンの停止 (OS の終了)
5. リカバリーモードで起動 (command + R を押しながら起動)
6. ターミナルで「csrutil enable」とコマンド入力後、マシンの再起動。

第4章 トラブルシューティング

- [1] MOE ライセンスサーバが認識できない
- [2] MOE が起動しない
- [3] アーカイブからの MOE のインストール

[1] MOE ライセンスサーバが認識できない (エラー番号 -96)

クライアントマシンが MOE ライセンスサーバ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 (後述の「 [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 ライセンスサーバを認識する方法は、2 つあります。

1. DNS サーバに MOE ライセンスサーバを登録する。
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。
詳細はシステム管理者にお問い合わせください。

1. DNS サーバに MOE ライセンスサーバを登録

ネットワーク管理者に、MOE ライセンスサーバ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に MOE ライセンスサーバ情報を登録

クライアントマシンに MOE ライセンスサーバ情報を追加登録します。

《手順 1》 [アプリケーション > ユーティリティ > ターミナル] を起動する

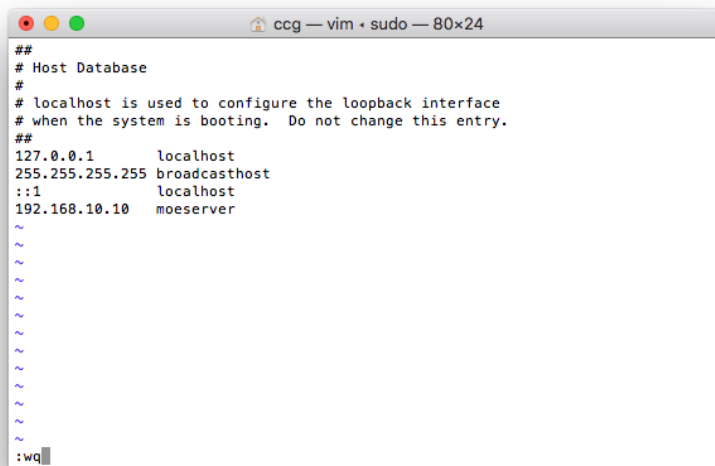
《手順 2》 管理者権限で/private/etc/hosts を vi などの適当なテキストエディタで開き、以下の記述を追加して、保存する

```
192.168.10.10 moeserver
```

ここでは、MOE のライセンスサービスの情報は、マシン名 : moeserver、IP アドレス : 192.168.10.10 とします。

例えば、vi を使用する場合は、以下のコマンドを実行して編集できます。

```
$ sudo vi /private/etc/hosts
```



```
ccg — vim · sudo — 80x24
##
# Host Database
#
# localhost is used to configure the loopback interface
# when the system is booting. Do not change this entry.
##
127.0.0.1        localhost
255.255.255.255 broadcasthost
::1             localhost
192.168.10.10   moeserver
~
~
~
~
~
~
~
~
~
~
~
:wq
```

《手順 3》 PING コマンドによるライセンスサーバとの通信確認

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

ターミナルで以下のコマンドを実行します。

```
$ ping -c 5 moeserver
```

正常にライセンスサーバを認識できていれば下記のようなメッセージが表示されます。

```
$ ping -c 5 moeserver
PING moeserver (192.168.10.10): 56 data bytes
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=0 ttl=64 time=0.079 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=1 ttl=64 time=0.117 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=2 ttl=64 time=0.119 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=3 ttl=64 time=0.159 ms
64 bytes from 192.168.10.10: icmp_seq=4 ttl=64 time=0.161 ms

--- moeserver ping statistics ---
 5 packets transmitted, 5 packets received, 0.0% packet loss
round-trip min/avg/max/stddev = 0.079/0.127/0.161/0.030 ms
```

もし正しく認識できていない場合は、

```
$ ping -c 5 moesercer
ping: cannot resolve moeserver: Unknown host
```

などと応答されます。

※ セキュリティ上、ファイアウォールなどでサーバが 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。

※ サーバ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。

※ ping での応答があり、MOE が同じエラーメッセージで起動しない場合は、ファイアウォールで通信を遮断している可能性があります。その場合は、システム環境設定→セキュリティとプライバシー→ファイアウォールのタブで Imgrd と chemcompd の通信を許可してください。

[2] MOE が起動しない

もし、MOE のエイリアスをクリックしても MOE が起動しない場合は、ターミナルで下記コマンドを実行してください（太字で表示した部分をタイプ後、Enter ボタンを押す）。

```
$ /Applications/ccg/moe/bin-mac64/moebatch
```

実行したコマンドの直後に、MOE のエラーメッセージが表示されます。

```
moe: Can't check out license 'MOE 2022.02' (-14)
```

上記のようなエラーメッセージが表示された場合、**ライセンスサーバに問題**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
-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管理デーモンを使用して、MOE2022.02 を起動させようとしています。ライセンスサーバの MOE を MOE2022.02 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 ライセンスサーバが認識できない 」を参照して下さい。
-15	MOE ライセンスサーバに接続できません。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設定 」を参照して下さい。
-18	ライセンスサーバ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「 ライセンスサーバ設定 」部分をご覧ください。

-20	現在のライセンスが MOE 2022.02 に対応していません。 <u>サーバ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「ライセンスサーバ設定」部分をご覧ください。
-83	MOE ライセンスサーバの MOE がバージョンアップされていません。MOE ライセンスサーバの MOE をバージョンアップして下さい。
-88	コンピュータ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。ファイアウォールの設定（システム環境設定 > セキュリティとプライバシー > ファイアウォール）から lmgrd と chemcompd のインバウンドの通信を許可してください。macOS ファイアウォールの詳細については以下です。 https://support.apple.com/ja-jp/HT201642
-114	ライセンスファイルがライセンス管理デーモン（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 2022.02 用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、MOE ダウンロードページ、または、以下のリンクの License Administration Guide を参照して下さい。

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

※ 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中のライセンスログファイル（ライセンスサーバが Windows であれば C:\ccg\moe\lm\flex.log、Unix/Linux であれば /home/ccg/moe/lm/flex.log、macOS であれば /Applications/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] アーカイブからの MOE のインストール

インストーラーから MOE をインストールできない場合は、別途アーカイブファイル (moe_2022_02_archive.tgz, moe_2022_02_archive.zip もしくは moe_2022_02_archive.dmg) からインストールしてください。以下の方法でインストールを行います。

moe_2022_02_archive.tgz もしくは moe_2022_02_archive.zip の場合

《手順 1》 アーカイブファイルのコピー

弊社から案内した Web サイト、もしくは DVD より、アーカイブファイルを適当なフォルダにコピーします。既存の moe フォルダは別名に変更しておきます。

《手順 2》 隔離 (quarantine) 属性のビットの削除

以下のコマンドで隔離属性のビットを削除します。

moe2022_02_archive.tgz の場合、

```
$ sudo xattr -d com.apple.quarantine moe_2022_02_archive.tgz
```

moe2022_02_archive.zip の場合、

```
$ sudo xattr -d com.apple.quarantine moe_2022_02_archive.zip
```

《手順 3》 アーカイブの解凍

以下のコマンドでアーカイブファイルを解凍します。

moe2022_02_archive.tgz の場合、

```
$ tar zxvf moe_2022_02_archive.tgz
```

moe2022_02_archive.zip の場合、

```
$ unzip moe_2022_02_archive.zip
```

《手順 4》 フォルダ名の変更

解凍により得られた moe2022 フォルダを moe フォルダに変更します。

```
$ mv moe2022 moe
```

ライセンスの設定等は第1章、第2章の操作をご覧ください。

mo_2022_02_archive.dmg の場合

《手順 1》 アーカイブファイルのコピー

弊社から案内した Web サイト、もしくは DVD より、アーカイブファイルを適当なフォルダにコピーします。既存の moe フォルダは別名に変更しておきます。

《手順 2》 アーカイブファイルを開く

mo_2022_02_archive.dmg をダブルクリックしてアーカイブファイルを開きます。

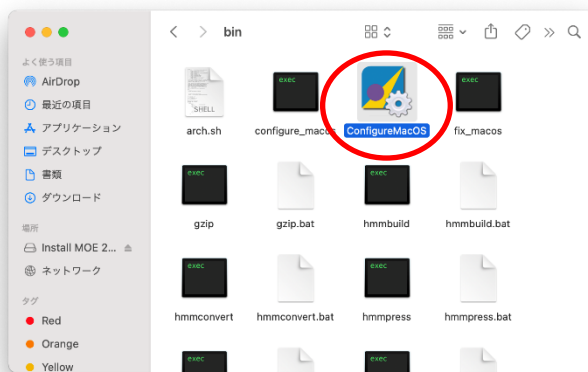
《手順 3》 moe2022 フォルダの移動

MOE をインストールするフォルダ [Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe]へ moe2022 フォルダをドラッグ&ドロップします。移動後、moe2022 フォルダを moe フォルダに変更します。

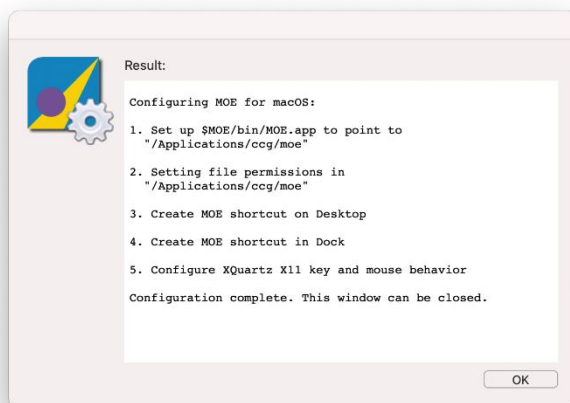


《手順 4》 MOE の設定

[Macintosh HD > アプリケーション > ccg > moe > bin]へ移動し、ConfigureMacOS をダブルクリックします。



MOE のショートカット（エイリアス）の作成などが行われ、設定が完了すると以下のパネルが表示されます。



「OK」を押します。

ライセンスの設定等は第1章、第2章の操作をご覧ください。

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 200X.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(9:30~17:00(土日祝日を除く))

E-Mail: ccg@molsis.co.jp

TEL: 03-3553-8030

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

Phone: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

Copyright © 2022 MOLSIS Inc.