

MOE 2024.06 バージョンアップ手順 (一般ユーザー用)

本紙は旧バージョン MOE を MOE 2024.06 にアップデートする手順について解説しています。

■ インストール方法の選択

MOE 2024.06 のインストール方法は、「(A)ライセンスサーバからの MOE 2024.06 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 2024.06 プログラムファイルのコピー

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. 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、元の moe フォルダが存在した場所です。
3. 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)。

(B) インストーラを使ったインストール

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 2024.06 Software DVD から、OS に応じたインストーラとデータファイル (moe_2024_06_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_2024_06_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_2024_06_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_2024_06_linux_installer.bin	以下のコマンドを入力します。 sh moe_2024_06_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。
 - * 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。
5. 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)。

■ オプションデータベースについて

ダウンロードサイト (<https://www.chemcomp.com/download/>) に掲載、または Database DVD に収録されているファイルから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。なお、配座解析データベース、リンカーデータベースの内容は、前バージョンと同一です。

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: ccg@molsis.co.jp

Copyright © 2024 MOLSIS Inc.