

MOE 2024.06

インストール手順書 (Linux 版)

○本編について

本編は、Linux 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(Linux版)

目次

第0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1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	20
第3節 RCSB Download 設定	24
第2章 管理者編	27
第1節 ライセンスサーバ設定	28
第2節 MOE/web 設定	41
第3節 MOE/smp 設定	54
第3章 トラブルシューティング	71

第0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1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や MOE/web、MOE/smp などの他の使用モードの設定については第2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3章）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 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管理者にお問い合わせください。

1. MOE 2024.06 のメディア、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

第 1 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「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] MOE 2024.06 のインストール	新規・更新
3. [4] シェルの設定	新規
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] 更新前の MOE 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、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 4	Java のバージョンの確認

チェック 1 マシン構成の確認

MOE を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

下記コマンドをタイプして、ディスクの空き容量を確認します。

```
[ccg@server]$ df -k
Filesystem          1k-blocks      Used  Available  Use%  Mounted on
/dev/sda5            8262036    1886952   5955388   25%  /
/dev/sda2             69995        3747     62634     6%  /boot
/dev/sda6            25576624   9856444  14420928   41%  /home
/dev/sdc1            35267256  23647148   9828624   71%  /work
```

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 Linux 上で稼働させるファイルのみインストール)	824 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム (Linux 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	28.5 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	33.7 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 フラグメントデータベース	35.9 GB 以上

各種データベースのインストール方法は、「第 2 節 各種データベースのインストール」を参照して下さい。

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が、通信可能であるか確認します。

《手順 1》 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「server」とします。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします（\$ より右を入力します）。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server (ping -c 5 ホスト名)
```

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応答があります。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=1 ttl=64 time=1.79 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=2 ttl=64 time=1.17 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=3 ttl=64 time=1.34 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=4 ttl=64 time=1.14 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=5 ttl=64 time=1.44 ms

--- server ping statistics ---
5 packets transmitted, 5 received, 0% packet loss, time 4005ms
rtt min/avg/max/mdev = 1.142/1.380/1.797/0.239 ms
```

もし正しく認識できていない場合は、

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
ping: server: Temporary failure in name resolution
```

などと応答されます。

ping によりライセンスサーバから応答がない場合は、[「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。

※ 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。

チェック 4 JAVA のバージョンの確認

MOE 2024.06 は Java 8 以降が必要です。これより古いバージョンの Java をお使いの場合は、Java のアップデートを行ってください。

[3] 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。

○この手順書では、DVD-ROM ドライブ [/mnt/cdrom] から、ハードディスク [/home/ccg] に MOE をインストールします。

≪手順 1≫ インストールの準備

- (1) 弊社からご案内した Web サイトからダウンロードしてインストールする場合
インストーラー (moe_2024_06_linux_installer.bin) をご利用ください。
- (2) インストール DVD からインストールする場合
インストーラーを任意のディレクトリにコピーしてご利用ください。インストーラーが動作しない場合は、アーカイブ (moe2024_06_archive.tgz) の解凍によってインストールしてください。
アーカイブからのインストールの詳細は「第 3 章 [8] アーカイブからの MOE のインストール」をご参照ください。
- (3) データファイルの配置
moe2024_06_installer_datafile.dat をインストーラーと同じディレクトリに配置します。インストーラーの場合、インストール時にダウンロードすることもできます。

≪手順 2≫ インストールの実行

シェルウィンドウを開き、下記のようにコマンドを入力してください。
ここでは 64bit OS 上にインストールすることとします。

```
[ccg@server]$ sh /home/ccg/moe2024_06_installer_linux64.bin
```



プルダウンメニューから日本語を選択し、OK をクリックします。

※ ***.bin ファイルは実行権限が無い場合、インストーラーが起動しません。

このとき、Java の設定によっては graphical installers are not supported by the VM というメッセージが表示され、インストーラーパネルが立ち上がらない可能性があります。その時は、アー

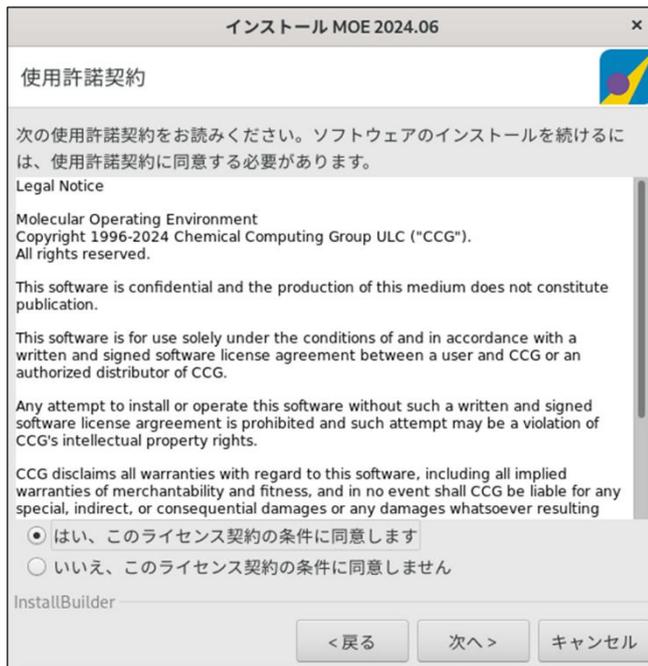
カイク moe2024_06_archive.tgz を解凍してインストールしてください。アーカイブからのインストールの詳細は「第3章 [8] アーカイブからの MOE のインストール」をご参照ください。

※ インストーラーの起動にはマシンによっては数分程度時間がかかる場合があります。

もしシェルウィンドウから実行してもエラーが出力されインストールパネルが開かない場合は、
「第3章 トラブルシューティング - [6]インストールパネルが開かない」を参照してください。



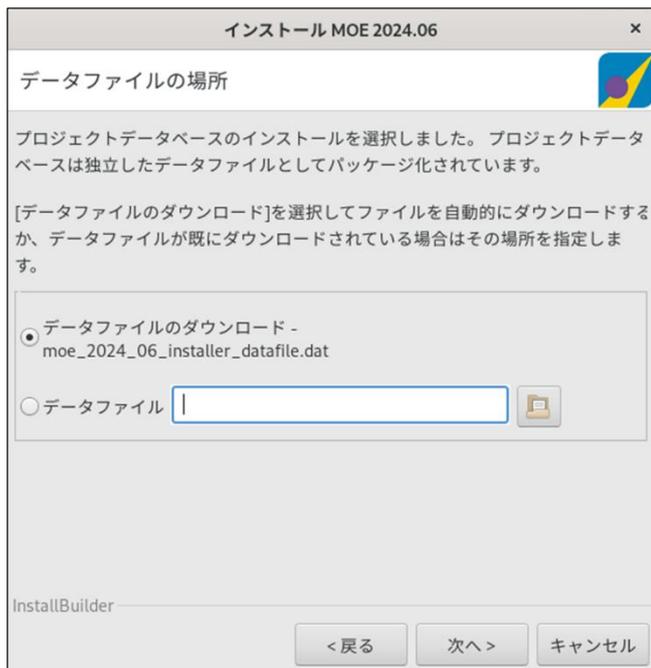
特に問題ない場合、次のパネルが現れインストールが始まります。
開始画面が表示されます。「次へ」を押します。



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、「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。



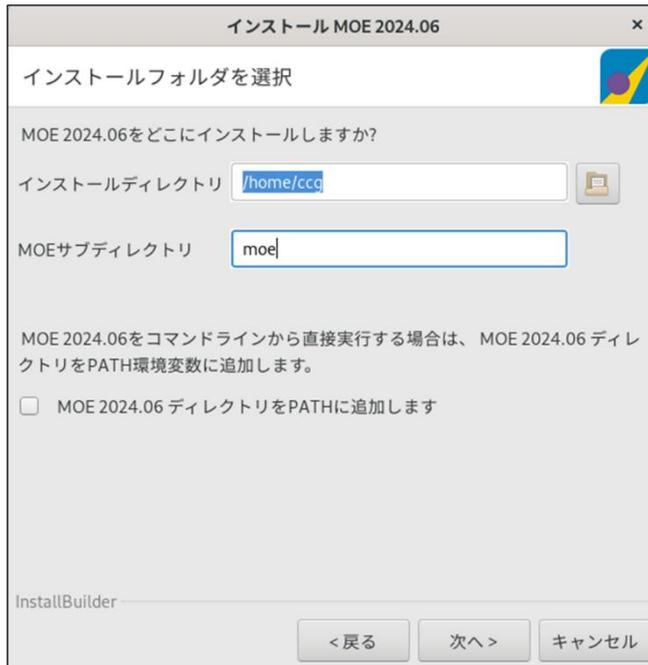
Windows や macOS でも使用される場合は、Windows 用実行ファイルや macOS 実行ファイルにそれぞれチェックします。プロジェクトデータベースはタンパク質ファミリーデータベースで、13 GB 以上の容量が必要になります。もし、不要な場合はチェックを外します。「次へ」を押します。



「データファイル」を選択し、右端のファイルアイコンからデータファイル「moe2024_06_installer_datafile.dat」を指定します。データファイルがない場合は、「データファイルのダウンロード」を指定することで、インストール時にダウンロードできます。「次へ」を押します。

「データファイルのダウンロード」を指定した場合は、以下のパネルからデータファイルを保存できます。ファイルサイズが 9.3 GB あるので、ご注意ください。

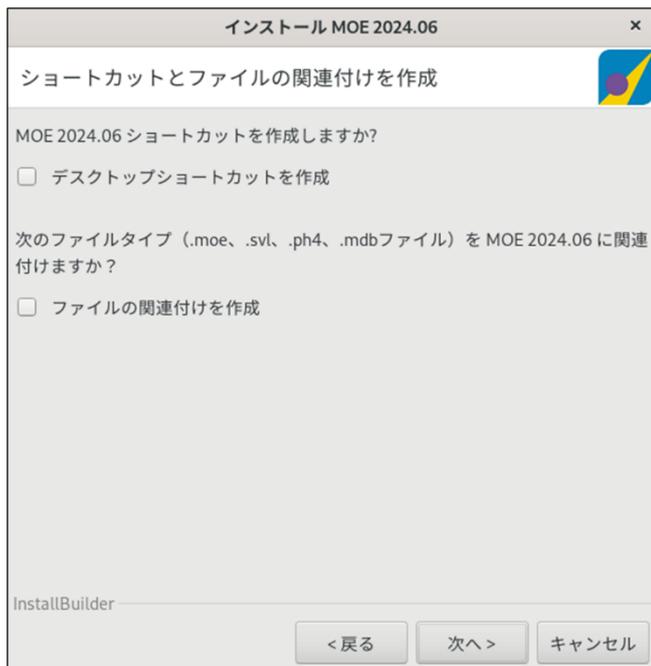




MOE 2024.06 のインストール先を指定します。ここでは「/home/ccg」を指定しています。MOE 2024.06 のインストールディレクトリは、問題がなければ「moe」を指定してください。パネル下部にある「MOE 2024.06 ディレクトリを PATH に追加します」は PATH に MOE を追加します。必要がなければ「オフ」のまま、「次へ」を押してください。

※ この後の操作手順は、「MOE 2024.06 ディレクトリを PATH に追加します」を「オフ」設定で行ったものとして解説しています。「MOE 2024.06 ディレクトリを PATH に追加します」を選択すると現在お使いのシェルの環境設定ファイルに MOE を実行するためのパスが追加されます。

※ すでに同名のディレクトリ (/home/ccg/moe) がある場合は警告パネルが表示されます。旧バージョンの moe ディレクトリは moe_202202 のように名前を変更してください。



必要に応じて、「**デスクトップショートカットを作成**」や「**ファイルの関連付けを作成**」をチェックします。を押します。



「**license.dat のインストール**」に使用しているライセンスファイル (license.dat) のパスを指定します。その他、必要に応じて、「**MOE/web サーバの URL**」や「**Java 実行ファイル**」を指定して、「**次へ**」を押します。



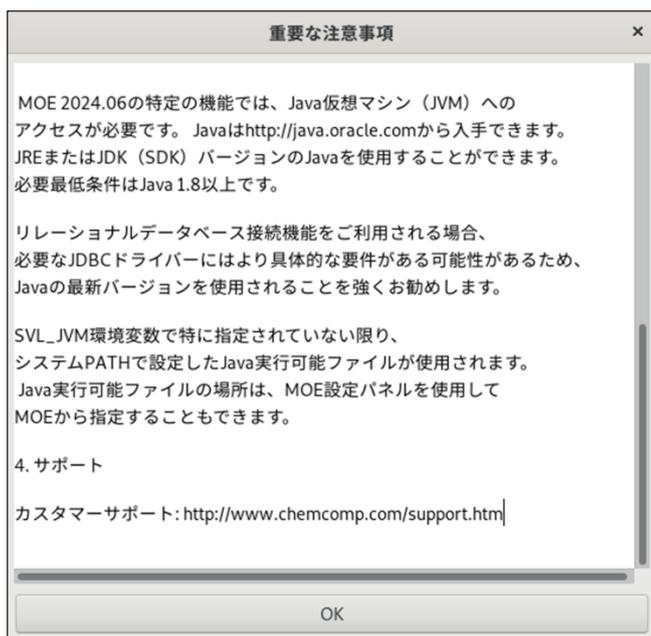
確認画面が開きます。問題なければ「次へ」を押してインストールを開始してください。



インストールは、数分で終了します。



「終了」を押してください。インストール終了後、重要な注意事項が表示されます。



確認したら閉じます。

※ショートカットが歯車の表示になっている場合は、右クリック→プロパティ→アクセス権→実行：プログラムとして実行できることをチェックします。OSによっては、右クリック→起動を許可する、のような操作が必要になります。

[4] シェルの設定 新規・更新

≪手順 1≫ alias の設定

MOE を使用する各ユーザのシェルの環境設定ファイルに環境変数 (MOE) と moe 起動用の alias を追加します。つまり、これを設定することにより、ターミナルで「moe」または「moebatch」とコマンドを入力することで、MOE や MOE/bin/moe を起動することができます。

※ alias の定義方法は、シェルごとに異なります。

<sh, bash シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル [.bashrc] に下記内容を追加します。

```
#### MOE ####
export MOE=/home/ccg/moe
alias moe=$MOE/bin/moe
alias moebatch=$MOE/bin/moebatch
```

<csh, tcsh シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル [.cshrc] に下記内容を追加します。

```
#### MOE ####
setenv MOE /home/ccg/moe
alias moe $MOE/bin/moe
alias moebatch $MOE/bin/moebatch
```

MOE にバンドルされた OpenMOPAC を実行するためには glibc のバージョン 2.14 以上が必要となります。

下記に相当するバージョンが各ディストリビューションにおける推奨の最低バージョンです。

RHEL/CentOS 7、Ubuntu: 12.04 LTS precise、Debian: 8.0 jessie、Fedora: 16 verne、
OpenSUS Linux EnterpriseE: 12.1

下記のバージョン以下でも MOE は動作しますが、今後のリリースでサポートされなくなる可能性がありますので、ご注意ください。

RHEL/CentOS 6、Ubuntu: 8.04 LTS hardy、Debian: 5.0 lenny、Fedora: 8 werewolf、
OpenSUS Linux EnterpriseE: 11.0

glibc のバージョンは下記のコマンドで確認可能です。

```
$ ls -l /lib/libc-*
```

「Error while loading shared libraries: libGL.so.1」のエラーが出る場合、

お使いの環境にてグラフィックスドライバの 32bit 互換ライブラリが導入されていない

可能性があります。

《手順 2》 シェルの環境設定ファイルの反映 **【新規】**

《手順 5》で作成したシェルの環境設定ファイルを反映させます。

※ シェルの環境設定ファイルの反映方法は、シェルごとに異なります。

<sh, bash シェル>

```
[ccg@server]$ source .bashrc
```

<csh, tcsh シェル>

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ source .cshrc
```

[5] ライセンスの設定 **新規・更新**

注意：この作業はインストーラーで「license.dat のインストール」でライセンスファイルを指定した場合は省略できます。

これまでお使いの MOE のライセンスファイル[/home/ccg/moe_202202/license.dat]または、ライセンスサーバ上にあるライセンスファイル[license.dat]をインストールした MOE のオリジナルファイル[/home/ccg/moe/license.dat]に上書きします。

例えば、既存のライセンスファイルをコピーするには、シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

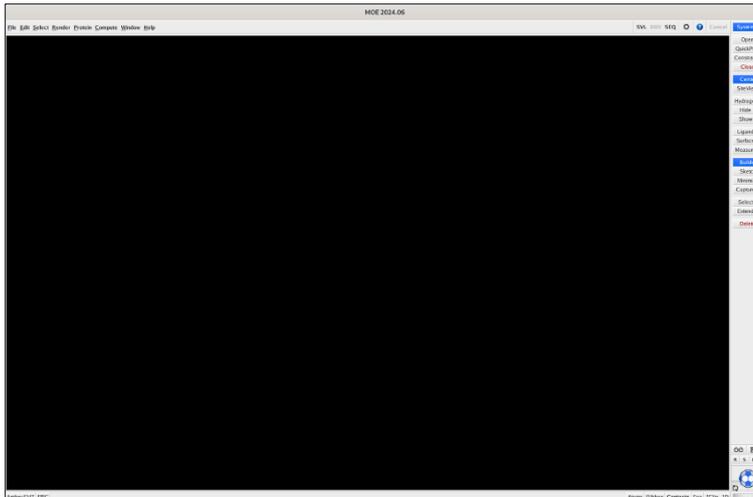
```
[ccg@server]$ cd /home/ccg/moe  
[ccg@server]$ cp /home/ccg/moe_202202/license.dat ./
```

[6] MOE 2024.06 起動確認 **新規・更新**

シェルウィンドウ内で下記のようにタイプして MOE を起動させます。

```
[ccg@server]$ moe
```

ショートカットを作成した方は、再ログイン後ショートカットをダブルクリックしてください。



正常に起動すると MOE のウィンドウが表示されます。

```
[ccg@server]$ moe
moe: Can't check out license 'moe 2024.06': (-14)
```

もし、上図のようなメッセージが表示されたら、「第3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。

((-14)の部分の数字は、エラーの原因によって変化します。)

Permission Denied のエラーが出力された場合は、インストールした MOE のディレクトリに実行権限が付加されていない可能性があります。その場合は、「第3章 トラブルシューティング [7] Permission Denied のエラーが出力される」を参照して下さい。

[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の「moe_202202」からカスタマイズした SVL プログラム群（例えば、[/home/ccg/moe_202202/custom/svl/]内の molsis.svl）を[/home/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。

```
[ccg@server]$ mv /home/ccg/moe_202202/custom/svl/molsis.svl
/home/ccg/moe/custom/svl/
```

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 MOE の最新パッチ情報を提供しております。

URL: https://www.molsis.co.jp/lifescience/moe/?taxonomy=product_support

上記の URL から 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。

[9] 更新前の MOE のアンインストール 更新

MOE 2024.06 が正常に動作することが確認された後、必要に応じて更新前の MOE [/home/ccg/moe_202202] をディレクトリごと削除して下さい。

削除する場合 シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ rm -rf /home/ccg/moe_202202
```

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	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_fragments.mdb	2.1 GB
ChEMBL 低分子データベース	chemblr23_150.mdb	64 MB

これらの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不要です。

- [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

[1] ディスクの空き容量の確認

下記コマンドをタイプして、ディスクの空き容量を確認します。

```
[ccg@server]$ df -k
Filesystem          1k-blocks      Used   Available   Use%  Mounted on
/dev/sda5            8262036    1886952    5955388    25%  /
/dev/sda2             69995        3747      62634     6%   /boot
/dev/sda6            25576624    9856444    14420928   41%  /home
/dev/sdc1            35267256    23647148    9828624    71%  /work
```

※全てのデータベースをインストールするには約 9.3 GB 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 1≫ リンカー ディレクトリの作成 **新規**

linker ディレクトリ[/home/ccg/linker]を作成します。

```
[ccg@server]$ mkdir /home/ccg/linker
```

≪手順 2≫ linker_2010_10.mdb.gz 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 に入っている linker_2010_10.mdb.gz ファイルを、linker フォルダにコピーします。

≪手順 3≫ ファイルの解凍 **新規**

```
[ccg@server]$ cd /home/ccg/linker
[ccg@server]$ gunzip linker_2010_10.mdb.gz
```

解凍後、linker_2010_10.mdb.gz を削除してください。

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[/home/ccg/confdb]を作成します。

```
[ccg@server]$ mkdir /home/ccg/confdb
```

- ≪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ます。

- ≪手順 3≫ 配座解析データベースの解凍 **新規・更新**

```
[ccg@server]$ cd /home/ccg/confdb  
[ccg@server]$ tar zxvf leadlike_conf.tgz
```

※ 圧縮ファイルのコピー、解凍は マシンに非常に負荷がかかり、時間もかかります ご注意ください。

※ もしファイル解凍中にエラーが出力された場合、使用中の OS では解凍できない可能性があります。その場合は、Windows など他の OS で解凍しておいてファイルをコピーしてください。

以上で配座解析データベース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 ディレクトリの作成 **新規**
chembl ディレクトリ [/home/ccg/chembl] を作成します。

```
[ccg@server]$ mkdir /home/ccg/chembl
```

- ≪手順 2≫ chemblr23_frag.mdb.gz 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 に入っている chemblr23_fragments.mdb.gz ファイルを、chembl フォルダにコピーします。

- ≪手順 3≫ ファイルの解凍 **新規**

```
[ccg@server]$ cd /home/ccg/chembl  
[ccg@server]$ gunzip chemblr23_fragments.mdb.gz
```

解凍後、chemblr23_fragments.mdb.gz を削除してください。

[5] ChEMBL フラグメントデータベースのインストール

≪手順 1≫ chembl ディレクトリの作成 **新規**

chembl ディレクトリ[/home/ccg/chembl]を作成します。

```
[ccg@server]$ mkdir /home/ccg/chembl
```

≪手順 2≫ chemblr23_150.mdb.gz 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 に入っている chemblr23_150.mdb.gz ファイルを、chembl フォルダにコピーします。

≪手順 3≫ ファイルの解凍 **新規**

```
[ccg@server]$ cd /home/ccg/chembl  
[ccg@server]$ gunzip chemblr23_150.mdb.gz
```

解凍後、chemblr23_150.mdb.gz を削除してください。

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。

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場合はあらかじめ下記の手順にて設定を行ってください。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。このような環境ではプロキシサーバの設定を行う必要があります。

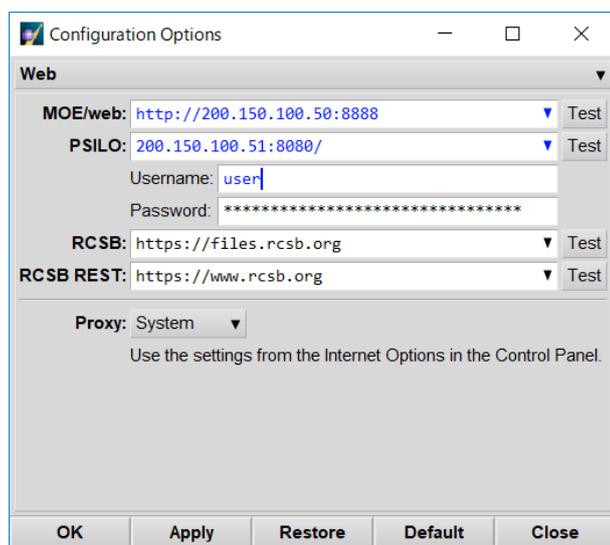
※ プロキシサーバの詳細は、システム管理者にお問い合わせください。

[1] Proxy 設定

MOEヘッダーの「」を押し、Configuration Optionsパネル/Web Settingsを起動。

対象者 マシンですでに使用しているプロキシサーバの設定を流用される方

Proxy: をSystemに指定する。



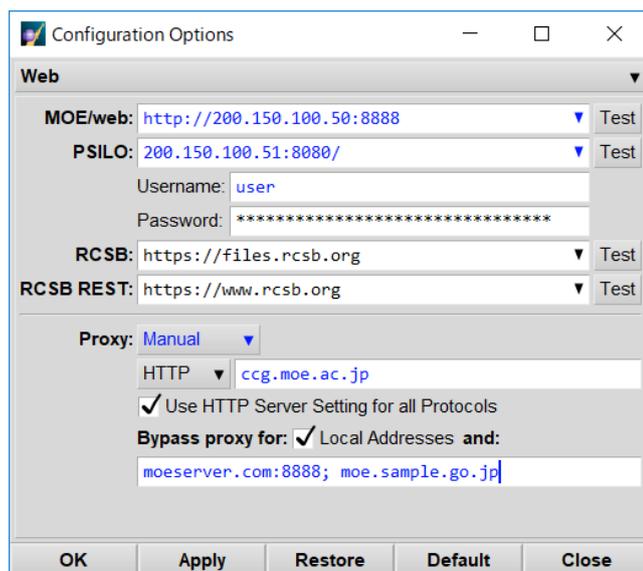
対象者 新たにプロキシサーバの設定をされる方

Proxy: をManualに指定する。

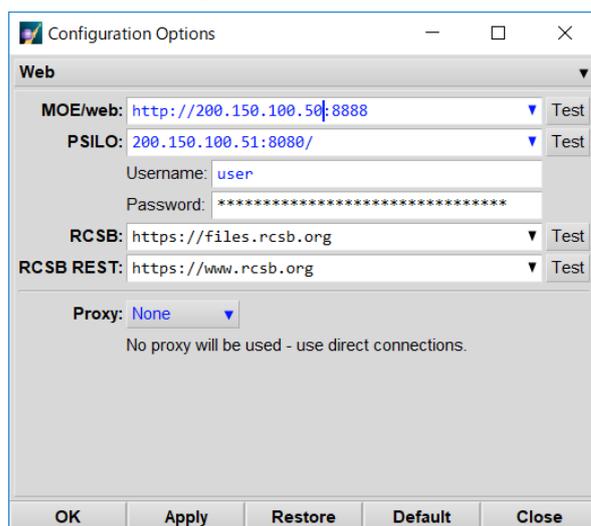
HTTP: には、プロキシサーバのアドレスとポート番号を指定します。

「Bypass proxy for:」にはプロキシを適用しないサイトを指定します。

複数のサイトを指定する場合は、セミコロン(;)区切りで指定します。



対象者 プロキシサーバの設定が不要な方 プロキシなし
Proxy: を「None」に設定します。



※ 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。

[2] MOE の終了とログアウト

《手順 1》 MOE を終了

MOE | File | Quit より MOE を終了させます。

《手順 2》 ユーザのログアウト

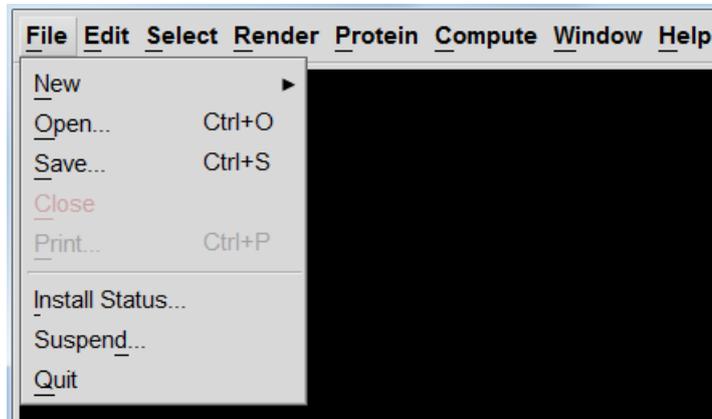
インストールユーザをログアウトし、同ユーザ名で再ログインします。可能であればマシンを再起動してください。

[3] PDB ファイルのダウンロード確認

正しく設定されたか確認する為に、RCSB Download 機能を使用します。

《手順 1》 MOE の起動

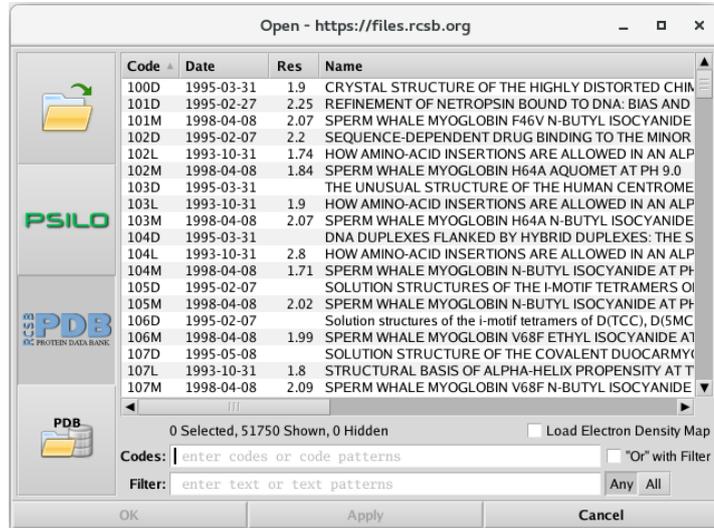
MOE を起動します。Open パネルを開く



「MOE | File | Open」を選択して、「Open」パネルを開きます。

《手順 2》 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。

以上で RCSB Download 設定は完了です。

第2章 管理者編

第1節 ライセンスサーバ設定

第2節 M0E/web 設定

第3節 M0E/smp 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サービスを設定する必要があります。このライセンスサービスを設定が完了すると、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使用することが可能です。

MOE 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。

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 のインストールフォルダの `html/install/license_install.htm` をご参照ください。

※ MOE のライセンスシステムで使用している FlexNet が 11. 18. 1 にバージョンアップされています。古いバージョンの MOE のライセンスシステムを使用されている場合は、必ず更新してください。

※ 更新したライセンスサーバでは、旧バージョンの MOE も継続して使用できます。

[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 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 2024.06 のインストール
3. [5] ライセンスファイルの編集
4. [6] ライセンスデーモンの起動
5. [7] MOE 2024.06 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 2024.06 にバージョンアップされる方。

1. [2] ライセンスサーバ環境の確認
2. [3] ライセンスデーモンの停止
3. [4] MOE 2024.06 のインストール
4. [5] ライセンスファイルの編集

5. [6] ライセンスデーモンの起動
6. [7] M0E 2024.06 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] ライセンスデーモンの停止
3. [5] ライセンスファイルの編集
4. [6] ライセンスデーモンの起動
5. [7] M0E 2024.06 起動確認

【ライセンスサービスの削除】

対象者 ライセンスサーバの変更によりライセンスサービスを削除される方。M0E 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] ライセンスデーモンの停止
3. [9] ライセンスサービスの削除

[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・M0E 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	マシン構成および OS 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	ネットワーク機能の確認
チェック 5	M0E の稼働停止

チェック 1 マシン構成および OS 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。
OS については、以下の方法で glibc のバージョンが 2.14 以降であるかを確認します。
glibc のバージョンは、例えば CentOS や Ubuntu では次のコマンドで調査できます。

```
[ccg@server]$ /lib64/libc-*.so (CentOS)
[ccg@server]$ /lib/x86_64-linux-gnu/libc.so.* (Ubuntu)
```

各ディストリビューションの最低バージョンは以下の通りです。
RHEL/CentOS 7、Ubuntu: 12.04 LTS precise、Debian: 8.0 jessie、Fedora: 16 verne、OpenSUS
Linux EnterpriseE: 12.1

チェック 2 ディスクの空き容量の確認

下記コマンドをタイプして、ディスクの空き容量を確認します。

```
[ccg@server]$ df -k
Filesystem      1k-blocks      Used    Available    Use%    Mounted on
/dev/sda5        8262036    1886952    5955388     25%    /
/dev/sda2         69995       3747      62634       6%    /boot
/dev/sda6       25576624    9856444    14420928    41%    /home
/dev/sdc1       35267256    23647148    9828624     71%    /work
```

○この手順書では、[/home/ccg/moe]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 Linux 上で稼働させるファイルのみインストール)	824 MB 以上
MOE 本体のみ シングルプラットフォーム (Linux 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	28.5 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	33.7 GB 以上
MOE + 母核置換用リンカーデータベース +	35.9 GB 以上

Lead-like 化合物配座解析データベース +
ChEMBL フラグメントデータベース

- ※ 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。
- ※ ライセンスシステム (FlexNet) 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 MB)

展開すると次のフォルダが現れます。

bin、bin-armm、bin-lnx64、bin-win64、bin-mac64

「moe/lm」というフォルダを作成し、これらのフォルダを格納します。

チェック 3 ユーザ権限の確認

ライセンスサーバの設定には一部 root 権限が必要となる場合があります。

あわせて自動起動を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 ネットワーク機能の確認

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。

ライセンスサービスでは、標準で 7788 番 (lmgrd) と 7790 番 (chemcompd) のポートで通信します。ライセンスサーバのポートが通信可能かどうかは、クライアントの OS コマンドラインから ftp コマンドを使用して以下のように例えば 7788 番を確認できます。

```
[ccg@server]$ ftp
ftp> open servername 7788
Connected to servername
```

servername にはライセンスサーバのホスト名または IP アドレスを指定します。もし、connect: Connection time out となった場合は、指定のポートが通信できない可能性があります。ファイアウォールのポートの開放方法については、ネットワーク管理者または各ディストリビューションのサポートサイトやマニュアルをご参照ください。

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・ ライセンスサービスの削除

現在、稼動しているライセンスデーモンを停止させます。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。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デーモンを停止します。

例

```
[ccg@server]$ /home/ccg/moe/lm/bin/lmutil lmdown -c /home/ccg/moe/license.dat
```

ライセンス管理システムアプリケーション「chemcomp-licadmin」による方法

既に MOE 2024.06 をインストールされている場合、自動起動ライセンスデーモンは以下の操作で削除できます。

\$MOE/lm/chemcomp-licadmin.service.cfg を環境に合わせて、例えば、以下のように変更します。

```
MOE_LMGRD_LIC_FILE=/home/ccg/moe/license.dat
```

```
MOE_LMGRD_LOG_FILE=/home/ccg/moe/lm/flex.log
```

```
MOE_LMGRD_USER=ccg
```

```
MOE_LMGRD_GROUP=ccg
```

※ccg はユーザ名とグループ名です。環境に合わせて変えてください。

管理者権限で次のコマンドを実行します。

```
$MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin unload
```

停止できた場合、「Unloading chemcomp-licadmin ... OK」と表示されます。

詳細は\$MOE/html/install/license_install.htm をご確認ください。

[4] MOE 2024.06 のインストール MOE のバージョンアップ・ライセンスファイルの更新

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

○この手順書では、MOE は[/home/ccg/moe/]にインストールします。

ただし、「第1章 MOE インストール [5] 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 **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**

ライセンスファイル[license.dat]を編集します。

≪手順 1≫ MOE ライセンスファイルを開く

テキストエディタで MOE ライセンスファイル[/home/ccg/moe/license.dat]を開きます。

≪手順 2≫ ライセンスファイルの上書き

弊社より電子メールにて送付した MOE 正規ライセンスを既存の MOE ライセンスに上書きします。

＜上書き後の MOE ライセンスファイルの内容 例＞

```
SERVER server 3CECEF43C3AA 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/lm/bin/chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2024.09 30-sep-2024 128 TS_OK SIGN="03F3 CBCC ¥
      8F7B 5AF5 43CC 51CE AFD8 32DB 2AD5 BD69 6D03 2038 637A 1BD1 ¥
      B605 5B26 0C96 32B5 F247 8942 6244"
```

※DAEMON行の chemcompdのファイルパスはMOE2020から変更されていますのでご注意ください。

《手順 3》 ライセンスファイルの編集

コピーした MOE ライセンスファイル[/home/ccg/moe/license.dat] を実行環境に合わせて編集します。2行目の「\$MOE/lm/bin/chemcompd」の部分を絶対パスに変更します。

＜変更前＞

```
SERVER server 3CECEF43C3AA 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/lm/bin/chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2024.09 30-sep-2024 128 TS_OK SIGN="03F3 CBCC ¥
      8F7B 5AF5 43CC 51CE AFD8 32DB 2AD5 BD69 6D03 2038 637A 1BD1 ¥
      B605 5B26 0C96 32B5 F247 8942 6244"
```

＜変更後＞

```
SERVER server 3CECEF43C3AA 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd /home/ccg/moe/lm/bin/chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2024.09 30-sep-2024 128 TS_OK SIGN="03F3 CBCC ¥
      8F7B 5AF5 43CC 51CE AFD8 32DB 2AD5 BD69 6D03 2038 637A 1BD1 ¥
      B605 5B26 0C96 32B5 F247 8942 6244"
```

※ ライセンスファイルの詳細は、「[9] 補足説明」を参照して下さい。

※ すでにライセンスサーバが正常に稼働しており、更新作業場合は、FEATURE 行以降を新しい内容に置き換えてください。

《手順 4》 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[/home/ccg/moe/license.dat] を保存します。

[6] ライセンスデーモンの起動 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

ライセンスデーモンを起動します。方法 1、2 いずれかで起動します。

(方法 1) `$MOE/lm/bin/lmgrd` から直接起動する方法

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。(※下記コマンドをコピー&ペーストしないでください)

```
[ccg@server]$ /home/ccg/moe/lm/bin/lmgrd -c /home/ccg/moe/license.dat  
-l /home/ccg/moe/lm/flex.log
```

※file or directory not found というメッセージが出た場合は、Linux Standard Base Core (lsb) がインストールされていない可能性があります。以下のコマンドを実行して再度お試しください。

Ubuntu/Debian: `sudo apt-get install lsb-core`

CentOS/RHEL: `sudo yum install redhat-lsb`

(方法 2) ライセンス管理システムアプリケーション「chemcomp-licadmin」による方法 (推奨)

`$MOE/lm/chemcomp-licadmin.service.cfg` を以下のように変更します。

```
MOE_LMGRD_LIC_FILE=/home/ccg/moe/license.dat
```

```
MOE_LMGRD_LOG_FILE=/home/ccg/moe/lm/flex.log
```

```
MOE_LMGRD_USER=ccg
```

```
MOE_LMGRD_GROUP=ccg
```

※ccg はユーザ名とグループ名です。環境に合わせて変えてください。

管理者権限で次のコマンドを実行します。

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

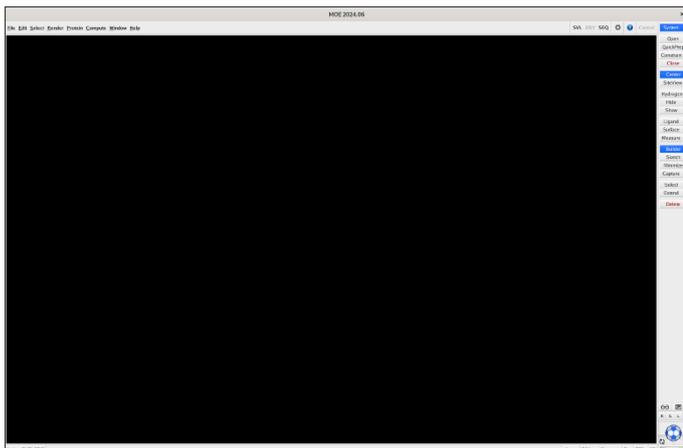
起動できた場合、「Loading chemcomp-licadmin ... OK」と表示されます。

これにより、マシン再起動時に自動的にライセンスデーモンが起動するように設定されます。

詳細は`$MOE/html/install/license_install.htm` をご確認ください。

[7] MOE 2024.06 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 を起動します。



正常に起動すると MOE ウィンドウが表示されます。

```
[ccg@server]$ moe
moe: Can't check out license 'moe 2024.06': (-14)
```

もし、上図のようなメッセージが表示されたら、「**第3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。

((-14)の部分の数字は、エラーの原因によって変化します。)

以上でライセンスデーモンの設定は完了です。

[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 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。

URL: <https://www.molsis.co.jp/lifescience/moe/support/svl/>

上記の URL から 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。

[9] 既存のライセンス自動起動サービスの削除 **ライセンスサービスの削除**

サービスを停止した上で、起動スクリプトから削除します。

```
[root@server]# $MOE/lm/bin/chemcomp-licadmin unload -s $MOE/license.dat
Unloading chemcomp-licadmin ... OK
```

FAILED またはエラーが表示された場合は \$MOE/html/install/license_install.htm をご確認ください。

以上でライセンスサーバの設定は完了です。

[10] 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。そのため、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。このライセンス管理には、Flexera 社の FlexNet Publisher 11.18.1 を採用しています。

《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になっています。

```
SERVER server 3CECEF43C3AA 7788
USE_SERVER
DAEMON chemcompd $MOE/lm/bin/chemcompd PORT=7790
FEATURE moe chemcompd 2024.09 30-sep-2024 128 TS_OK SIGN="03F3 CBCC ¥
      8F7B 5AF5 43CC 51CE AFD8 32DB 2AD5 BD69 6D03 2038 637A 1BD1 ¥
      B605 5B26 0C96 32B5 F247 8942 6244"
```

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。

id : \$MOE/bin-linux/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 1行目に記載のサーバマシンで使用するライセンスファイルの3行目以降を流用する。つまり、ライセンス更新時に1行目に変更がなければクライアントのライセンスファイルは古いままでMOEが動作します。

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 : 3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 /home/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=[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 /home/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。

3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 : 2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、下記リンクのAdministration Guide (fnp_LicAdmin.pdf) を参照して下さい。
http://www.chemcomp.com/manuals/fnp_LicAdmin.pdf

認証情報（ユーザー名、パスワード）には MOE インストーラーダウンロード時のものを使用してください。

《補足 3》 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には、現在の MOE のライセンス使用状況を追跡できるようになっています。

シェルウィンドウで下記 FLEXlm コマンドをタイプします。

○この手順書では、[/home/ccg/moe]に MOE がインストールされています。

```
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmutil lmstat -a -c $MOE/license.dat
```

次のようなメッセージが出力されます。

```
lmutil - Copyright (c) 1989-2021 Flexera. All Rights Reserved.
Flexible License Manager status on Thu 8/26/2024 00:03
License server status: 7788@10.0.0.10
  License file(s) on 10.0.0.10: /home/ccg/moe/license.dat:
  10.0.0.10: license server UP (MASTER) v11.18.1
Vendor daemon status (on 10.0.0.10):
  chemcompd: UP v11.18.1
Feature usage info:
Users of moe: (Total of 30 licenses issued; Total of 9 licenses in use)
  "moe" v2024.10, vendor: chemcompd, expiry: 30-sep-2024
floating license
  user1 pc1 /dev/pts/6 (v2024.06) (pc1/7788 102), start Wed 11/11 09:07, 3 licenses
  user2 pc2 /dev/pts/8 (v2024.06) (pc2/7788 103), start Wed 11/11 09:19
```

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
user1	pc1	MOE/GUI	3
user2	pc2	MOE/batch	1

※ MOE/GUIを起動した場合、3トークン必要なので、MOEを使用している行の右端に「3 licenses」と表記されます。この例の場合、pc1からuser1がMOE/GUIを、pc2からuser2がMOE/batchを同時に使用しています。

《補足 4》 ライセンスデーモンの再起動方法

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 のライセンスデーモンを再起動する必要があります。

MOE のライセンスデーモン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 を実行します。

(方法 1) lmreread コマンドの実行

FLEXlm コマンドによるライセンスファイルの再読み込み
シェルウィンドウで下記コマンドをタイプします。

```
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmutil lmreread -c $MOE/license.dat
```

(方法 2) MOE ライセンスデーモンの再起動

MOE ライセンスデーモンの停止後、再起動します。
シェルウィンドウで下記コマンドをタイプします。

```
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmutil lmdown -c $MOE/license.dat  
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmgrd -c $MOE/license.dat -l $MOE/lm/flex.log
```

[1 1] アーキテクチャーの確認

次のようにコマンドを打ち込むと CPU のアーキテクチャーを確認できます。

```
[root@server]# getconf LONG_BIT  
64
```

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。

[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 サーバ環境の確認
2. [3] MOE 2024.06 のインストール
3. [4] ディレクトリ権限の設定
4. [5] MOE/web 起動テスト
5. [6] MOE/web 起動確認
6. [7] MOE/web オプション設定
7. [8] MOE/web 自動起動設定

[2] MOE/web サーバ環境の確認

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

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

下記コマンドをタイプして、ディスクの空き容量を確認します。

```
[ccg@server]$ df -k
Filesystem      1k-blocks      Used  Available  Use%  Mounted on
/dev/sda5        8262036    1886952    5955388    25%  /
/dev/sda2         69995        3747      62634      6%  /boot
/dev/sda6       25576624    9856444   14420928    41%  /home
/dev/sdc1       35267256   23647148    9828624    71%  /work
```

○この手順書では、[/home/ccg/moe]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/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 ネットワークの確認

MOE は、ライセンスサーバがライセンスの使用状況の監視、管理を行っています。
計算を行う Web サーバからライセンスサーバに通信可能かどうかを予め確認します。

《手順 1》 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「server」とします。
シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server (ping -c 5 ホスト名)
```

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応答があります。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=1 ttl=64 time=1.79 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=2 ttl=64 time=1.17 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=3 ttl=64 time=1.34 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=4 ttl=64 time=1.14 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=5 ttl=64 time=1.44 ms

--- server ping statistics ---
5 packets transmitted, 5 received, 0% packet loss, time 4005ms
rtt min/avg/max/mdev = 1.142/1.380/1.797/0.239 ms
```

もし、正しく認識できていない場合は、

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.
From server (192.168.1.10) icmp_seq=1 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=2 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=3 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=4 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=5 Destination Host Unreachable

--- server ping statistics ---
5 packets transmitted, 0 received, +5 errors, 100% packet loss, time 4077ms
```

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、「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ので、その際はサーバ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 サーバの機能が正しく動作しない可能性があります。

ライセンスサービスでは、標準で 7788 番 (lmgrd) と 7790 番 (chemcompd) のポートで通信します。ライセンスサーバのポートが通信可能かどうかは、クライアントの OS コマンドラインから ftp コマンドを使用して以下のように例えば 7788 番を確認できます。

```
[ccg@server]$ ftp
ftp> open servername 7788
Connected to servername
```

servername にはライセンスサーバのホスト名または IP アドレスを指定します。もし、connect: Connection time out となった場合は、指定のポートが通信できない可能性があります。ファイアウォールのポートの開放方法については、ネットワーク管理者または各ディストリビューションのサポートサイトやマニュアルをご参照ください。

チェック 4 JAVA のバージョンの確認

MOE 2024.06 は Java 8 以降が必要です。これより古いバージョンの Java をお使いの場合は、Java のアップデートを行ってください。

[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 を [/home/ccg/moe/] にインストールします。

MOE が MOE/web サーバ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] ディレクトリ権限の設定

MOE/web 計算結果を格納する web-usr ディレクトリ [/home/ccg/moe/web-usr] に書き込み権を付加します。シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ chmod 777 /home/ccg/moe/web-usr
```

[5] MOE/web 起動テスト

MOE/web サービスの起動を起動します。

[操作手順] コマンドラインによる MOE/web サービスの起動
シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ /home/ccg/moe/bin/moeweb
```

正常に稼働すれば次のような応答があります。

```
-- MOE/web Server (2024.06)
-- Copyright (c) 2009-2024 Chemical Computing Group, ULC.
-- All rights reserved.
--
-- Build: 24.03.07.16
--
-- Summary:
--   serverName: 12003
--   serverHost: 12003
--   serverIP: 127.0.1.1
--   nhosts: 1
--   HTTP port: 8888
--
-- MOE/web command line arguments:
--   -root /home/ccg/moe2024.06
--   -arch lnx64
--
-- Effective configuration:
--   -webMaxHosts 1
--   -cors *
--   -webHttpPort8888
--   -root /home/ccg/moe2024.06
--   -arch lnx64
--   -stdc
--   -boot /home/ccg/moe2024.06/lib/boot_web.svl
--   -tmp /tmp
--   -home /home/ccg
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/homsrch
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/cle
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/sfcheck
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/dbbw
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/molprop
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/moesaic
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/sareport
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/sdfilter
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/abfrag
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/sketcher
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/moeproj
--   -app /home/ccg/moe2024.06/web/srvmon
--   -webDir /home/ccg/moefiles/moeweb
--   -webCache /home/ccg/moefiles/moeweb/cache
--   -webCacheExpiry 7.0
--   -webCacheLimit 1000
--   -webPerm /home/ccg/moefiles/moeweb/perm
--   -webPermExpiry 365.0
--   -webPermLimit 1000
--   -log -
--   -charset UTF-8
```

サービスを止める際は、Ctrl + C キーで止めます。

[6] 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。

[方法 1] 【MOE/web サーバ上でテスト】

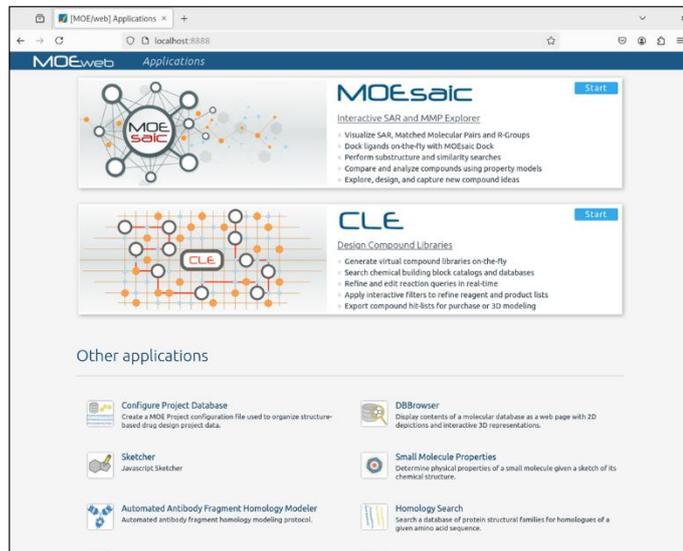
≪手順 1≫ Web ブラウザの起動

Web ブラウザ (例: Mozilla Firefox) を起動します。

《手順 2》 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。

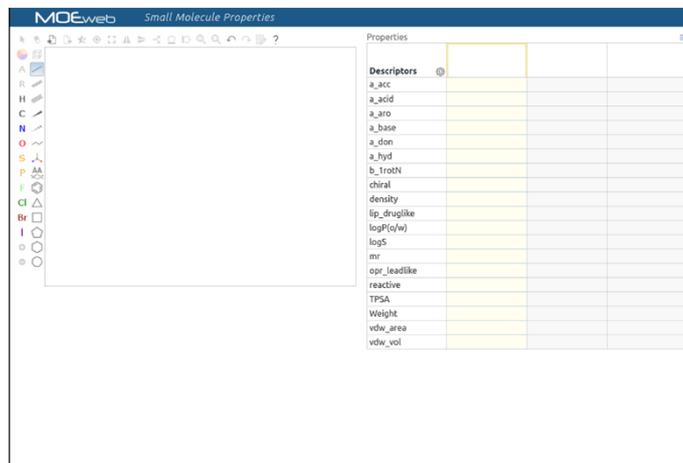
<http://localhost:8888/>



正常に MOE/web サービスが起動していれば、上記のような MOE/web のトップページが表示されます。

《手順 3》 Small Molecule Properties ページに移動

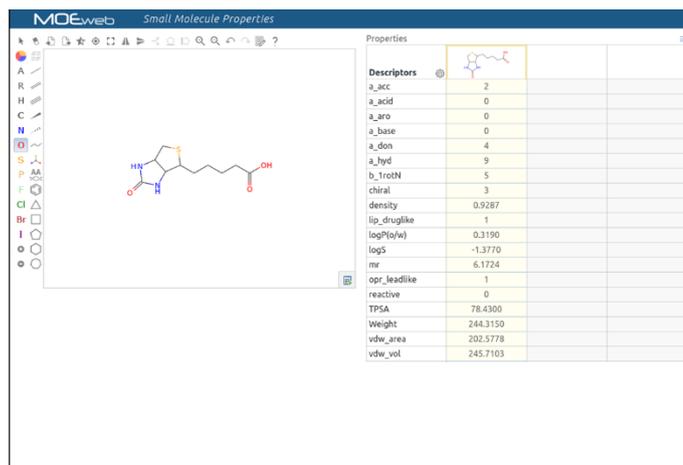
Other applications の Small Molecule Properties をクリックします。



上記のようなページが表示されます。

《手順 4》 アプリケーションの動作テスト

表示される分子構造のスケッチツールに適当な分子構造を描画します。



正常に動作すると分子構造と各種特性が表示されます。

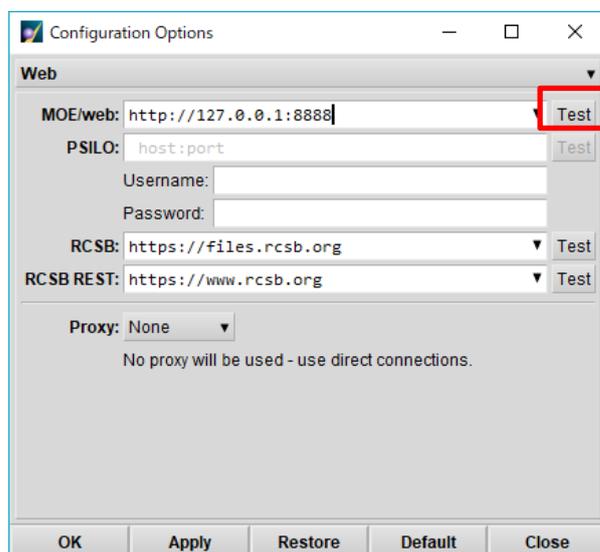
【クライアントマシン上でテスト】

サーバマシン上で行った《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://\(MOE/webを設定したホスト名\):8888/](http://(MOE/webを設定したホスト名):8888/)」です。

【方法2】【MOE/GUIからのテスト】

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

MOE/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 5≫ MOE/web サービスの終了

moeweb を起動したシェル上で **Ctrl キー + C キー** を同時に押して MOE/web サービスを停止します。

【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) -host (IP アドレス) -port (ポート番号)
```

例) `/home/ccg/moe/bin/moeweb -tmp /home/ccg -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。

※ MOE/web の実行には Java Runtime Environment 1.6 以降が必要です。

※ moeweb 実行時に「`java.net.BindException: 許可がありません`」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を終了してから実行してください。

[7] 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。詳細は以下のコマンドで確認できます。

```
moeweb -help
```

【MOE/web サーバの各種オプション】

- webMaxHosts # MOE/web に利用する最大のライセンス数を # 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)。デフォルト 10 秒。
- host ホスト名 サーバのホスト名または 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。

[8] MOE/web 自動起動設定 (systemd (CentOS 7 以降標準))

1 台のマシン上の MOE/web を共同で利用する場合など、マシン起動時に MOE/web サービス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。ここでは systemd (CentOS 7 以降標準) による手順を記します。SystemV (CentOS 6 以前標準) はその後の補足で記します。

≪手順 1≫ MOE/web 自動起動スクリプトを作成する(systemd (CentOS 7 以降))

テキストエディタで MOE/web 自動起動スクリプトを作成します。以下は Linux 用スクリプト例です。また、この手順ではスクリプトファイル名を moewebd として作成します。

```
#!/bin/bash
#
# chkconfig: 2345 99 10
# description: MOE/web
# processname: moewebd
# pidfile: /var/run/moewebd.pid

# source function library
. /etc/rc.d/init.d/functions

USER=ccg

export MOE=/home/ccg/moe
export MOE_ARCH=linux64

moewebd="\$MOE/bin/moeweb -webMinHosts 0 -log $MOE/moewebd.log&"
#echo $moewebd

start() {
    echo -n "$Starting moewebd: "
    daemon --user $USER $moewebd
    RETVAL=$?
    echo
    return $RETVAL
}

stop() {
    echo -n "$Stopping moewebd: "
    moewebd_pid=`ps aux|grep moewebd.log|head -1|awk '{print $2}'`
    #killproc $moewebd_pid
    kill -9 $moewebd_pid
    RETVAL=$?
    echo
}

case "$1" in
    start)
        start
        ;;
    stop)
        stop
        ;;
    restart)
        stop
        start
        ;;
esac

exit $RETVAL
```

《手順 2》 MOE/web 自動起動スクリプトの編集

MOE/web 自動起動スクリプトの下線部をマシン環境、MOE/web オプションに合わせて編集します。

変更箇所

USER	MOE/webを起動するユーザ ※スーパーユーザ(root)以外のユーザを指定して下さい
MOE	moeのルートディレクトリ
moewebd	MOE/web起動コマンド

《手順 3》 MOE/web 自動起動スクリプトのコピー

スクリプトの保存場所を指定します。

```
[root@server]# mkdir /home/ccg/init  
[root@server]# cp moewebd /home/ccg/init/
```

《手順 4》 MOE/web 自動起動スクリプトに実行権を付加

MOE/web 自動起動スクリプトに実行権を付加します

```
[root@server]# chmod +x /home/ccg/init/moewebd
```

《手順 5》 サービス登録のためのユニット設定ファイルの作成

ファイル名は、moewebd.service とします。

```
(/etc/systemd/system/moewebd.service の内容)  
[Unit]  
Description=MOE/web  
After=network.target  
  
[Service]  
Type=simple  
ExecStart=/home/ccg/init/moewebd start  
ExecStop=/home/ccg/init/moewebd stop  
RemainAfterExit=yes  
  
[Install]  
WantedBy=multi-user.target
```

《手順 6》 サービスへの登録

ユニット設定ファイル[moewebd.service]をサービス登録します。

```
[root@server]# systemctl daemon-reload  
[root@server]# systemctl enable moewebd.service
```

《手順 7》 MOE/web の起動

MOE/web自動起動スクリプト[moewebd]を使用してMOE/webを起動します。

```
[root@server]# systemctl start moewebd.service
```

[9] 補足：MOE/web 自動起動設定 (SystemV (GentOS 6 以前標準))

systemd の場合と同様に MOE/web 自動起動スクリプト moewebd を作成して、以下の手順に従って設定します。

《手順 1》 スーパーユーザに変更

現在のユーザ(ccg)からスーパーユーザ(root)に変更します。
シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ su  
Password:
```

《手順 2》 MOE/web 自動起動スクリプトのコピー

編集したファイルを下記の場所にコピーします。

```
[root@server]# cp moewebd /etc/rc.d/init.d/moewebd
```

《手順 3》 MOE/web 自動起動スクリプトに実行権を付加

MOE/web自動起動スクリプトに実行権を付加します。

```
[root@server]# chmod +x /etc/rc.d/init.d/moewebd
```

《手順 4》 サービスへの登録

MOE/web自動起動スクリプト[moewebd]をサービス登録します。

```
[root@server]# /sbin/chkconfig --add moewebd  
[root@server]# /sbin/chkconfig moewebd on
```

《手順 5》 MOE/web の起動

MOE/web自動起動スクリプト[moewebd]を使用してMOE/webを起動します。

```
[root@server]# /etc/rc.d/init.d/moewebd start
```

《手順 6》 スーパーユーザからのログアウト

スーパーユーザ (root) からログアウトして一般ユーザ (ccg) に戻ります。

```
[root@server]# exit
```

第3節 MOE/smp 設定

MOE/smp は、MOE のアプリケーションを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、Dock、Conformation Import、Flexible Alignment、PDB Search、Homology Model、QuaSAR Model-Evaluate、Database Paritial Charge、Database SCF Calculation 等があります。

MOE/smp は、MOE がサポートしているすべての OS を混在させたヘテロクラスタを作成することも可能ですが、同一の OS 上でクラスタを構成した方が安定して稼働します。

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 [6] 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/cluster (MOE/smp)」を参照して下さい。

[1] MOE/smp 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 [OS: CentOS 6.3 64ビット] (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	/home/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] smpconfig ファイルの設定
4. [5] 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 4	MOE/smp の実行ユーザの確認
チェック 5	ファイアウォールの設定の有無
チェック 6	rexecd デーモンのインストールの有無

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

下記コマンドをタイプして、ディスクの空き容量を確認します。

```
[ccg@server]$ df -k
```

Filesystem	1k-blocks	Used	Available	Use%	Mounted on
/dev/sda5	8262036	1886952	5955388	25%	/
/dev/sda2	69995	3747	62634	6%	/boot
/dev/sda6	25576624	9856444	14420928	41%	/home
/dev/sdc1	35267256	23647148	9828624	71%	/work

○この手順書では、[/home/ccg/moe]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 の実行ユーザの確認

MOE/smp を実行するマシン全部に 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 4 ネットワークの確認

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。
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》 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 **server** とします。
シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server (ping -c 5 ホスト名)
```

もし、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応答があります。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=1 ttl=64 time=1.79 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=2 ttl=64 time=1.17 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=3 ttl=64 time=1.34 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=4 ttl=64 time=1.14 ms
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=5 ttl=64 time=1.44 ms

--- server ping statistics ---
5 packets transmitted, 5 received, 0% packet loss, time 4005ms
rtt min/avg/max/mdev = 1.142/1.380/1.797/0.239 ms
```

もし正しく認識できていない場合は、

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.
From server (192.168.1.10) icmp_seq=1 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=2 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=3 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=4 Destination Host Unreachable
From server (192.168.1.10) icmp_seq=5 Destination Host Unreachable

--- server ping statistics ---
5 packets transmitted, 0 received, +5 errors, 100% packet loss, time 4077ms
```

などと応答されます。

≪手順 2≫ PING コマンドによる各マシン間の通信確認

≪手順 1≫と同様の作業を MOE/smp を構成する各マシン間で行います。

もし、この方法でマシンが正しく認識できない場合は、「[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。

チェック 5 ファイアウォールの設定の有無

最近の OS の多くは、ファイアウォール機能が設定されています。設定によっては、MOE/smp モードでの**構成マシン同士の通信が遮断される**可能性があります。構成するマシンに「**ファイアウォールが設定されているかどうか**」を確認し、「無効」に設定します。

≪手順 1≫ 「セキュリティレベルの設定」パネルの起動

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ system-config-securitylevel
```

「セキュリティレベルの設定」パネルが起動します。

- ※ この機能を使用するには、**root 権限が必要な**為、途中で **root のパスワードの入力**が必要です。
- ※ お使いの OS によってはコマンドが異なる可能性があります。その場合は、GUI もしくは各 OS のセキュリティ変更コマンドを使用してください。

≪手順 2≫ セキュリティレベルの確認

「セキュリティレベルの設定」パネルのセキュリティレベルが、「**ファイアウォールなし**」になっていることを確認します。

CentOS 7 のファイアウォールの設定は「`firewall-cmd`」コマンドで行います。詳細は、CentOS 7 関連書籍等をご参照ください。

チェック 6 REXECD デーモンのインストールの有無 (SYSTEMD, CENTOS 7 以降)

MOE/smp は、構成するマシン間でのデータの相互通信に rexecd または sshd デーモンを使用します。本手順書では rexecd による動作について説明しています。sshd での動作については MOE マニュアル (\$MOE/html/install/smp_inst.htm) や補足をご参照ください。

ここで使用する *rsh*、*rexecd* 等は標準でインストールされていないのが一般的ですので必要に応じて、入手してください。

まず、systemd (CentOS 7 以降) の手順を記します。SystemV (CentOS 6 以前) の場合は、補足をご参照ください。

《手順 1》 rexecd のインストールの有無

MOE/smp を構成するマシンで rexecd デーモンを起動させるためには、*rsh*、*rsh-server*、*xinit* がインストールされている必要があります。もし、これらがインストールされていない場合は、ここでインストールを行って下さい。Linux の場合、*rsh*、*rsh-server*、*xinit* のインストールの有無は、下記方法で確認できます。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ rpm -q rsh
rsh-0.17-5
[ccg@server]$ rpm -q rsh-server
rsh-server-0.17-5
[ccg@server]$ rpm -q xinetd
xinetd-2.3.4-0.8
```

もし、*rsh*、*rsh-server*、*xinit* がインストールされていればそれぞれ上記のような応答があります。

※ *rsh*、*rsh-server*、*xinit* の詳細なインストール方法に関しては、各 Linux ディストリビューション向け資料を別途参照して下さい。

《手順 2》 *rsh*、*rsh-server*、*xinit* のインストール (※入手していない場合)

```
[root@server]# yum -y install epel-release
[root@server]# yum -y install rsh rsh-server xinetd
```

《手順 3》 サービスの再起動

```
[root@server]# systemctl restart rsh.socket
[root@server]# systemctl restart rlogin.socket
[root@server]# systemctl restart rexec.socket
[root@server]# systemctl restart xinetd.service
```

《手順 4》 マシン起動時のサービスの自動起動設定

```
[root@server]# systemctl enable rsh.socket
[root@server]# systemctl enable rlogin.socket
[root@server]# systemctl enable rexec.socket
[root@server]# systemctl enable xinetd.service
```

《手順 5》 Firewall の停止

```
[root@server]# systemctl stop firewalld
```

《手順 6》 rexec コマンドを使用した稼動確認

rexec コマンドを使用して自分自身のマシン名を問い合わせることで、rexecd が正常に稼動しているか、確認します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ rexec cluster1 -l moe hostname
(rexec ホスト名 -l ユーザ名 コマンド)
Password (cluster1:):
cluster1      (←ホスト名が出力されます)

[ccg@server]$
```

ここでは、

マシン名 : cluster1

ユーザ名 : moe

コマンド : hostname (マシン名を出力するコマンド)

を使用して rexecd デーモンが稼動しているかどうか確認します。

正常に稼動していれば、応答の結果、マシン名が表示されます。

※ rexecd のバージョンによって **-b** のオプションが必要な場合があります。上記のコマンドで、正しくホスト名が表示されない場合は、代わりに下記コマンドを入力してください。

```
[ccg@server]$ rexec -b cluster1 -l moe hostname
```

チェック 6 REXECD デーモンのインストールの有無 (SYSTEMV, CENTOS 6 以前)

《手順 7》 rexecd のインストールの有無

前に記した CentOS 7 以降の手順と同じです。

《手順 8》 rexecd デーモンのサービス状態の確認

rexeed デーモンは、インストールされていてもサービスが開始されていない場合、rexeed デーモンは使用できません。rexeed デーモンのサービス状態は、下記コマンドで確認できます。

```
[ccg@server]$ /sbin/chkconfig --list | grep rexec  
rexeed: on
```

ここで、「rexeed: on」になっていれば、rexeed デーモンのサービスは開始されています。

《手順 9》 rexecd デーモンのサービスの開始

《手順 2》で「rexeed: off」と応答された場合は、下記方法にてサービスを開始します。

〔手順 1〕 スーパーユーザに変更

現在のユーザ(ccg)からスーパーユーザ(root)に変更します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ su  
Password:
```

〔手順 2〕 rexecd デーモンのサービスの開始

rexeed デーモンのサービスを開始します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[root@server]# /sbin/chkconfig rexec on
```

〔手順 3〕 スーパーユーザからのログアウト

スーパーユーザ(root)からログアウトして一般ユーザ(ccg)に戻ります。

```
[root@server]# exit  
exit  
[ccg@server]$
```

≪手順 10≫ rexec コマンドを使用した稼動確認
操作は前に記した CentOS 7 以降と同様です。

[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/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。

○この手順書では、MOE は[/home/ccg/moe/]にインストールしているとします。

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 は正常に動きません。

[4] 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。MOE/smp 設定後、マシンの追加、削除などマシン構成を変更する際には、この MOE/smp 設定ファイルの内容を変更してください。

※ 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] とします。

≪手順 1≫ smp ディレクトリの作成

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、MOE/smp を実行するユーザのホームディレクトリの直下に **smp ディレクトリ** [/home/ccg/smp/] を作成します。
シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ mkdir /home/ccg/smp
```

《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/batch を起動後、コマンド入力部分で下記コマンドをタイプします。

```
[ccg@server]$ moebatch
moe> 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。

```
moe> mpu_password ''
'pjjakahadmbnchhfcldlndkflhojbnfmkigodopebpemdnb'
```

《手順 3》 MOE/smp 設定 (smpconfig) ファイルの作成

エディタを起動し、MOE/smp 設定 (smpconfig) テキストファイルを作成します。

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

このファイルには、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) : pjjakahadmbnchhfcldlndkflhojbnfmkigodopebpemdnb

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 [/home/ccg/smp/smpconfig] として保存します。

- ※ MOE/smp 設定 [smpconfig] ファイルの詳細は、「[6] 補足説明」を参照して下さい。

[5] MOE/smp 起動確認

MOE/smp の起動確認を行います。

≪手順 1≫ alias の設定

MOE/smp は、下記コマンドで実行します。

```
[ccg@server]$ moebatch -mpu "/home/ccg/smp/smpconfig"
                    -mpulog "/home/ccg/smp/smp.log"
```

MOE/smp の起動が簡単に実行できるように MOE/smp 起動用の alias (moesmp) を作成します。MOE/smp を実行するユーザのシェルの環境設定ファイルの中に alias を作成します。上の smp.log は MOE/smp のログファイルです。ログファイル名とパスは自由に設定してください。

※ 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。

※ alias の定義方法は、シェルごとに異なります。

※ 旧バージョンの MOE とインストールフォルダを変更された際には、*shrc ファイル内のパス設定をご確認ください。

<sh, bash シェル>

MOE/smp を実行するユーザのホームディレクトリにある .bashrc ファイルに下記内容を追加します。

```
#### MOE ####
export MOE=/home/ccg/moe
alias moe=$MOE/bin/moe
alias moebatch=$MOE/bin/moebatch
alias moesmp=' $MOE/bin/moebatch -mpu /home/ccg/smp/smpconfig
              -mpulog /home/ccg/smp/smp.log'
```

<csh, tcsh シェル>

MOE/smp を実行するユーザのホームディレクトリにある .cshrc ファイルに下記内容を追加します。

```
#### MOE ####
setenv MOE /home/ccg/moe
alias moe $MOE/bin/moe
alias moebatch $MOE/bin/moebatch
alias moesmp ' $MOE/bin/moebatch -mpu /home/ccg/smp/smpconfig
              -mpulog /home/ccg/smp/smp.log'
```

上記の設定では、

smpconfig ファイル : /home/ccg/smp/smpconfig

MOE/smp ログファイル : /home/ccg/smp/smp.log

を使用しています。

《手順 2》 シェルの環境設定ファイルの反映

《手順 1》で作成したシェルの環境設定ファイルを反映させます。

※ シェルの環境設定ファイルの反映方法は、シェルごとに異なります。

<sh, bash シェル>

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ . .bashrc
```

もしくは

```
[ccg@server]$ source .bashrc
```

<csh, tcsh シェル>

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ source .cshrc
```

《手順 3》 MOE/smp の起動

MOE/smp を起動します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ moesmp
```

《手順 4》 MOE/smp の起動確認

起動した MOE/smp 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_HOSTCOUNT  
3
```

すると MOE/smp を構成している GPU 数が表示されます。

以上で、MOE/smp の設定は完了です。

[6] MOE/smp 補足説明

MOE/smp の設定の変更を行う場合に、参考にして下さい。

《補足 1》 smpconfig ファイルの内容

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

必要 MOE ライセンス数 : 3 トークン

```
$mpu-user moe
$mpu-password pjjakahadmbnchhfcldndkflhojbnfmkigodopebpemdnb
$mpu-rexec $MOE/bin/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。計算投入マシンにおいて作成すること。

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。

※ 「-mpu -」 のスペースの位置は重要です。上の表記のまま記述してください。

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。

下記のコマンドで moe あるいは moebatch を起動すると、1 台のマシン内に指定数の MOE プロセスが実行されます。このとき、1 つのプロセスがルートノードとなり、残りのプロセスが MOE/smp の子ノードとして稼働します。

```
[ccg@server]$ $MOE/bin/moe -mpu 2    (-mpu CPU 数)
```

あるいは

```
[ccg@server]$ $MOE/bin/moebatch -mpu 2    (-mpu CPU 数)
```

※ CPU 数を超える値を指定することも可能ですが、CPU 効率が悪くなるため処理速度が低下します。CPU 数以下の値を指定するようにしてください。

[7] 補足 : ssh を使用した MOE/smp の設定

上記では複数ノードの通信に rexec 使用しましたが、ここでは、多くの OS で標準インストールされている ssh を使用した MOE/smp の設定を紹介します。

[はじめに]

MOE/smp を使用するためには以下の設定が必要です。

1. マスターノードからスレイブノードにパスワード無しの ssh によるログイン設定
2. 同じユーザ名を使用し、同じ場所に MOE をインストール
3. 各ノードはホスト名で通信できるように名前解決できるようにします (例 /etc/hosts ファイルに記入等)。
4. ホームディレクトリの権限 (ここでは /home/ccg を指す) として、g と o に書き込み権限 (w を付加してはならない、最大の権限でも 755 までとします)。
5. MOE/smp の通信には 10000-65535 のポートがランダムに使用されます。この範囲のポートを開放します、あるいは、ファイアウォールを OFF にします

[環境]

設定手順は以下の環境を想定したものになっています。

OS: CentOS 7.x

ユーザ名: ccg

MOE インストールディレクトリ: /home/ccg/moe

ここではマスターノードとスレイブノード(x 2)のホスト名を、それぞれ master、slaveA、slaveB とします。

[設定手順]

1. ssh の設定

以下、パスワード無し ssh を初めて設定する場合の手順です。

(その他の手順については、ssh パスワードなし ログイン などのキーワードで検索しヒットするページ等を参照してください。)

① master にログインし、ホームに .ssh ディレクトリを作成。 .ssh ディレクトリの権限は 700 とする。

```
$ cd /home/ccg
$ mkdir .ssh
$ chmod 700 .ssh
```

- ② ssh ディレクトリに移動して、id_dsa(秘密鍵)と id_dsa.pub(公開鍵)を作成。

```
$ cd .ssh
$ ssh-keygen -t rsa
```

- ③ 公開鍵のコピーを作成。名前は authorized_keys とする。権限は 600 とする。

```
$ cp id_rsa.pub authorized_keys
$ chmod 600 authorized_keys
```

- ④ 各スレイブノードでも/home/ccg 下に .ssh ディレクトリを作成。権限はマスターと同様に 700 とする。マスターノードの公開鍵をスレイブノードの .ssh ディレクトリ下に転送する。

```
$ scp authorized_keys slaveA:/home/ccg/.ssh/
$ scp authorized_keys slaveB:/home/ccg/.ssh/
```

- ⑤ マスターノードとスレイブノードで、公開鍵認証を許可する。

```
# vi /etc/ssh/sshd_config
```

```
PubkeyAuthentication yes
```

に変更する。コメントアウトされていたらコメントを削除する。

- ⑦ 各ノードで ssh デーモンの再起動

```
# systemctl restart sshd
```

- ⑧ マスターノードからパスワード無しで ssh によるログインができるか確認する。

```
$ ssh localhost
ログインできたらログアウト
$ ssh slaveA
ログインできたらログアウト
$ ssh slaveB
ログインできたらログアウト
```

2. マスターノードから ssh で moebatch が実行できるかを確認する。

```
$ ssh localhost "home/ccg/moe/bin/moebatch test"
```

成功すると以下のように表示される。

```
MOE 2024.06 appears OK
$MOE = /home/ccg/moe
```

各スレイブに対しても同様の結果が返ってくることを確認する。

```
$ ssh slaveA "home/ccg/moe/bin/ moebatch test"
$ ssh slaveB "home/ccg/moe/bin/ moebatch test"
```

3. マスターノードに smp ディレクトリを作成し、smp ディレクトリに移動する。

```
$ mkdir smp
$ cd smp
```

4. vi 等で smpconfig.txt を作成する。

```
$ vi smpconfig.txt
```

ファイルの内容は以下。ホスト名は IP アドレスでも良い。ここに起動させる moebatch の数だけ行を追加すること。最後の行には \$eof を記載。

```
localhost ssh master `home/ccg/moe/bin/moebatch -mpu -`
localhost ssh slaveA `home/ccg/moe/bin/moebatch -mpu -`
localhost ssh slaveB `home/ccg/moe/bin/moebatch -mpu -`
$eof
```

5. 10000-65535 のポートの開放（※開放していない場合のみ）

master, slaveA, slaveB で以下の操作をします。

```
# firewall-cmd --add-port=10000-65535/tcp --zone=public -permanent
# firewall-cmd -reload
```

または以下のコマンドでファイアウォールを無効にします。

```
# systemctl stop firewalld
```

6. マスターノード上で MOE/smp を起動する。

```
$ /home/ccg/moe/bin/moebatch -mpu smpconfig.txt -mpulog smp.log
```

問題なく起動した場合、

```
moe>
```

と moebatch のプロンプターが表示される。以下のコマンドを入力して MOE/smp の並列化の数を確認する。

```
moe> MPU_HOSTCOUNT  
3
```

問題が生じた場合は、smp.log を確認する。もしマスターの操作を MOE/GUI にする場合は、起動コマンドを

```
$ /home/ccg/moe/bin/moe -mpu smpconfig.txt -mpulog smp.log
```

に変更する。ただしマスターは MOE/GUI を使用するため、トークン数は master:3, slaveA:1, slaveB:1 の合計 5 トークンとなることに注意。(moebatch を使用する場合は、master:1, slaveA:1, slaveB:1 の合計 3 トークン)

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
- [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てしまった
- [4] Linux で MOE メニューが表示されない
- [5] JAVA が動かない
- [6] インストールパネルが開かない
- [7] Permission Denied のエラーが出力される
- [8] 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 (同章の「 [2]MOE が起動できない参照」)。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。

1. DNS サーバに MOE ライセンスサーバ名を登録する。
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。
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 ライセンスサーバ名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 ライセンスサーバを登録

クライアントマシンの hosts ファイル[/etc/hosts]にライセンスサーバ情報を追加登録します。

《手順 1》 スーパーユーザに変更

現在のユーザ(ccg)からスーパーユーザ(root)に変更します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@client]$ su  
Password:
```

《手順 2》 [/etc/hosts]を開く

スーパーユーザの状態では /etc/hosts ファイルをテキストエディタで開きます。

《手順 3》 [/etc/hosts]の編集

hosts ファイル[/etc/hosts]に MOE ライセンスサーバ情報を追加します。

```
192.168.1.10 server
```

○手順書では、MOE ライセンスサーバを「IP アドレス:192.168.1.10, マシン名 : server」とします。

hosts ファイルは以下のように記述されていますので、MOE/smp サーバのホスト名を追加して上書き保存します。

```
# Do not remove the following line, or various programs  
# that require network functionality will fail.  
127.0.0.1    client localhost.localdomain  localhost  
192.168.1.10  server
```

MOE/smp サーバのホスト名を追加

《手順 4》 スーパーユーザからのログアウト

スーパーユーザ(root)からログアウトして一般ユーザ(ccg)に戻ります。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[root@client]# exit  
exit  
[ccg@client]$
```

《手順 5》 ping コマンドによるライセンスサーバとの通信確認

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@ client]$ ping -c 5 server (ping -c 5 ホスト名)
```

もし、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応答があります。

```
[ccg@server]$ ping -c 5 server  
PING server (192.168.1.10) 56(84) bytes of data.  
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=1 ttl=64 time=1.79 ms  
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=2 ttl=64 time=1.17 ms  
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=3 ttl=64 time=1.34 ms  
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=4 ttl=64 time=1.14 ms  
64 bytes from server (192.168.1.10): icmp_seq=5 ttl=64 time=1.44 ms  
  
--- server ping statistics ---  
5 packets transmitted, 5 received, 0% packet loss, time 4005ms  
rtt min/avg/max/mdev = 1.142/1.380/1.797/0.239 ms
```

※ 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。

※ hosts ファイルにより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。

[2] MOE が起動しない

```
[ccg@server]$ moe
moe: Can't check out license 'moe 2024.06': (-14)
```

もし、上記のようなメッセージが表示され 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、エラー原因の分類を示します。下記の一覧表をご参照ください。

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 を直ちに終了させるか、他の MOE が終了するまで待ちます。
-7	MOE2020 とそれより古いライセンスサービスを使用して、MOE2024 を起動させようとしています。ライセンスサーバの MOE を MOE2024 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」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」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 2024.06 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、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。
-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、License Administration Guide

(fnp_LicAdmin.pdf)の「20 Error Codes」項を参照して下さい。

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

(認証情報 (ユーザー名、パスワード) には MOE インストーラダウンロード時のものを使用してください。)

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 (ライセンスサーバの\$MOE/lm/flex.log) を添付して、弊社サポート窓口 cgc@molsis.co.jp までご連絡下さい。

[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てしまった

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 のライセンスデーモンを再起動する必要があります。

MOE 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。

方法 1. `lmreread` コマンドを実行する。

方法 2. MOE ライセンスデーモンを再起動する。

方法 1 `lmreread` コマンドの実行

FLEXlm コマンドによるライセンスファイルの再読み込み
シェルウィンドウで下記コマンドをタイプします。

```
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmutil lmreread -c $MOE/license.dat
```

方法 2 MOE ライセンスデーモンの再起動

MOE ライセンスデーモンの停止後、再起動します。
シェルウィンドウで下記コマンドをタイプします。

```
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmutil lmdown -c $MOE/license.dat  
[ccg@server]$ $MOE/lm/bin/lmgrd -c $MOE/license.dat -l $MOE/lm/flex.log
```

[4] Linux で MOE メニューが表示されない

Linux 上で MOE ウィンドウのメニューが表示されない場合は、OS のフォント設定の問題ですので、OS の FontPath の設定を変更して下さい。

Linux で MOE メニューを表示させる方法は、2 つあります。

方法 1. X11 の設定ファイルに FontPath の情報を追加 (全ユーザーに対して有効)

方法 2. MOE の alias に Font Path の情報を追加 (設定したユーザーのみ有効)

方法 1 X11 の設定ファイルに FontPath の情報を追加

《手順 1》 スーパーユーザーに変更

現在のユーザー(ccg)からスーパーユーザー(root)に変更します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ su
Password:
```

《手順 2》 [/etc/X11]ディレクトリに移動

[/etc/X11]ディレクトリのファイルリストを取得します。

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[root@server]$ ls
XF86Config
XF86Config-4
[root@server]#
```

XF86Config または xorg.conf のいずれかが存在することを確認します。

《手順 3》 X11 の設定ファイルを開く

スーパーユーザーの状態です/etc/X11/XF86Config または /etc/X11/xorg.conf]をテキストエディタで開きます。

《手順 4》 X11 の設定ファイルを開く

[/etc/X11/XF86Config または /etc/X11/xorg.conf]ファイルの Section "Files"部分に FontPath の一覧が表示されている部分の「先頭」に下記一行を追加します。

```
Section "Files"

    RgbPath      "/usr/X11R6/lib/X11/rgb"

    FontPath    "/usr/X11R6/lib/X11/fonts/75dpi"
    FontPath     "unix/:7100"

EndSection
```

- ※ 既にこの行が記述されている場合は、この行が先頭に来るように順番を変更して下さい。
- ※ <手順 3> でファイルリストの中に [/etc/X11/XF86Config-4] が存在する場合は、[/etc/X11/XF86Config-4] にも FontPath を追加してください。

<手順 5> マシン再起動
マシンを再起動します。

方法2 MOE の alias に Font Path の情報を追加

<手順 1> alias の設定変更

MOE を使用する各ユーザのシェルの環境設定ファイルに環境変数 (MOE) と moe 起動用の alias を追加します。

※ alias の定義方法は、シェルごとに異なります。

<sh, bash シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル [.bashrc] に下記内容に変更します。

```
##### MOE #####
export MOE=/home/ccg/moe
alias moe="xset +fp /usr/X11R6/lib/X11/fonts/75dpi/ && $MOE/bin/moe"
alias moebatch=$MOE/bin/moebatch
```

<csh, tcsh シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル [.cshrc] に下記内容に変更します。

```
##### MOE #####  
setenv MOE /home/ccg/moe  
alias moe "xset +fp /usr/X11R6/lib/X11/fonts/75dpi/ &&  
$MOE/bin/moe"  
alias moebatch $MOE /bin/moebatch
```

≪手順 2≫ シェルの環境設定ファイルの反映

≪手順 1≫で作成したシェルの環境設定ファイルを反映させます。

※ シェルの環境設定ファイルの反映方法は、シェルごとに異なります。

<sh, bash シェル>

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ . .bashrc
```

もしくは

```
[ccg@server]$ source .bashrc
```

<csh, tcsh シェル>

シェルウィンドウ内で、下記のようにタイプします。

```
[ccg@server]$ source .cshrc
```

[5] JAVA が動かない

《手順 1》 Java のインストールディレクトリの確認方法
下記のコマンドを入力します。

```
[ccg@server]$ which java
/usr/bin/java
```

上記の結果がかえてきた場合は、パスの設定が必要です。

```
[ccg@server]$ cd /usr/java
[ccg@server]$ ls
jdk-18.0.1.1
```

この手順では上記のバージョンの Java SE Development Kit がインストールされています。この例では jdk-18.0.1.1 が java のインストールディレクトリです。

《手順 2》 シェルの設定
シェルの設定ファイルに下記の項目を追加してください。

<sh, bash シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル[.bashrc]に下記内容を追加します。

```
### JAVA Setting ###
export JAVA_HOME=/usr/java/jdk-18.0.1.1
export PATH="$JAVA_HOME/bin:${PATH}"
```

<csh, tcsh シェル>

各ユーザのホームディレクトリの直下にある環境設定ファイル[.cshrc]に下記内容を追加します。

```
### JAVA Setting ###  
setenv JAVA_HOME /usr/java/jdk-18.0.1.1  
setenv PATH "$JAVA_HOME/bin:${PATH}"
```

《手順 3》 ログアウト

ユーザをログアウトし、再ログインします。

《手順 4》 パスの確認

下記のコマンドで、java の実行ファイルのパスを再確認します。

```
[ccg@server]$ which java  
/usr/java/jdk-18.0.1.1/bin/java
```

上記のパスに変更されていれば設定完了です。

[6] インストールパネルが開かない

他のマシンや OS に一度 MOE をインストールしてから、ネットワーク経由などで対象マシンに MOE ディレクトリごとコピーしてください。コピー後、エイリアス、ライセンスの設定を行ってください。

またこのとき、コピーした MOE ディレクトリに実行権限が付加されていないため起動することができない場合は、「トラブルシューティング [7] Permission Denied のエラーが出力される」、を参照してください。

または、アーカイブ版をご利用ください。

[7] Permission Denied のエラーが出力される

MOE ディレクトリ下のファイルに実行権限 (読み込み権限) が付加されていないため、エラーが出力されている可能性があります。下記のコマンドで実行権限を付加してください。

```
[cCG@server]$ cd /home/cCG  
[cCG@server]$ chmod -R a+x ./moe
```

読み込み権限を付加されたい場合は、下記のコマンドを入力してください。

ここにあげている例以外に MOE が起動しない等のトラブルがございましたら、弊社サポート窓口までご連絡下さい。

[8] 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 をインストール出来ない場合は、別途アーカイブファイル (moe2024_06_archive.tgz) 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。

※弊社提供の DVD からインストールする場合は同梱された手順書をご参照ください。

《手順 1》 アーカイブファイルのコピー

ダウンロードした moe2024_06_archive.tgz 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。

```
[cCG@server]$ tar zxvf moe2024_06_archive.tgz
```

《手順 3》 フォルダ名の変更

moe_2024.06 フォルダを moe フォルダに変更します。

```
[ccg@server]$ mv moe_2024.06 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。

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 support@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 Phone: 03-3553-8030

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

E-mail: ccg@molsis.co.jp
