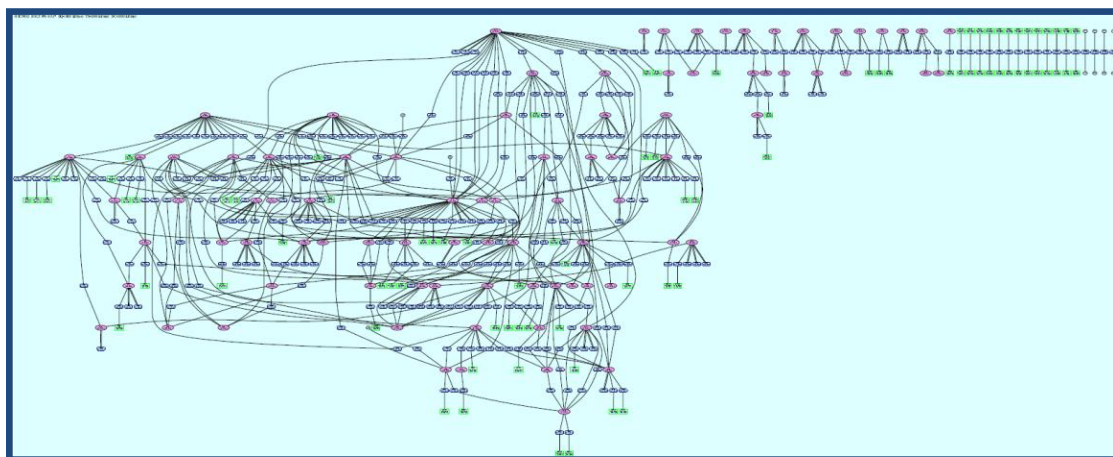
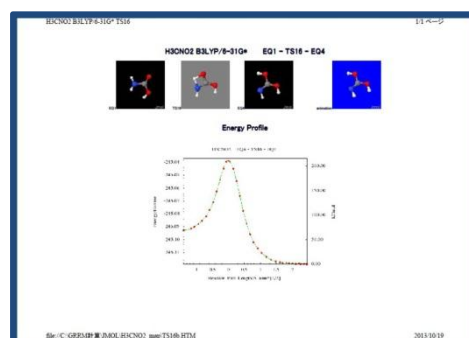
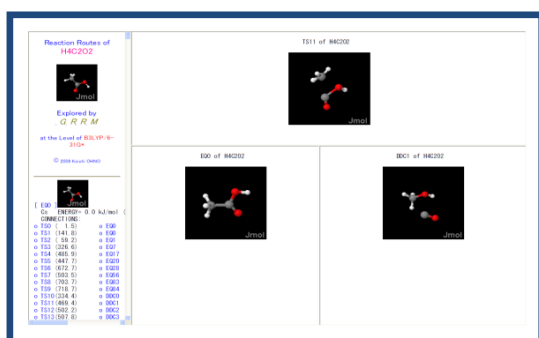


GRRM-GDSP

未知化学への挑戦

以下の各図をクリックしますと、インターネット接続環境では、それぞれの実例が、Web ブラウザ上に表示されます。



- GRRM-GDSP は、GRRM による未知の化学への挑戦を強力にサポートします。
- GRRM-GDSP は、GRRM 出力データ自動解析可視化システムです。
- GRRM-GDSP は、GRRM 出力データを自動的に解析し Web ブラウザ上に可視化します。
- GRRM-GDSP は、GRRM ユーザーのデータ解析作業の手間を大幅に軽減します。

GRRM-GDSP Contents

1.	はじめに	
2.	Web 表示自動作成システム GRRM-GDSP	
2.1	GRRM-GDSP システムのインストール	4
2.2	可視化ツールのインストール	5
2.2.1	立体表示ソフト (Jmol、Chem3D)	
2.2.2	連結グラフ作図ソフト (Graphviz)	
2.2.3	曲線グラフ作図ソフト (Gnuplot)	
2.3	Web 表示ファイルの作成 (GRRM-GDSP プログラム基本 version の実行)	7
2.3.1	表示対象ファイル群	
2.3.2	プログラムの実行	
2.4	Web ブラウザを用いた閲覧	8
2.4.1	閲覧準備	
2.4.2	ブラウザでの閲覧	
2.4.3	Web 表示の内容と閲覧方法	
2.5	出力されるファイル群	10
3.	リアルタイム可視化システム GRRMgdsp	
3.1	GRRMgdsp のインストール	12
3.2	GRRMgdsp の実行	12
3.2.1	GRRM-JOB 未実行の場合	
3.2.2	GRRM-JOB 実行中の場合	
3.2.3	GRRM-JOB 実行終了済の場合	
3.2.4	Chem3D 表示の場合	
3.2.5	GRRMgdsp の終了・再開	
3.2.6	GRRMgdsp のオプション指定	
3.3	Web 表示の閲覧	15
3.3.1	Web 表示ファイルをそのまま閲覧	
3.3.2	Web 表示ファイルをコピーして閲覧	
3.3.3	GRRMgdsp の Web 表示の閲覧	

4. Web 表示操作法	
4.1 立体画像サイズの変更	16
4.2 ブラウザ表示の活用	17
4.3 フレーム中の各画面の分割表示	18
4.3.1 全体リスト(フレーム左欄)の単独表示	
4.3.2 右側フレームの「上段」「下段左」「下段右」の単独表示	
4.4 Jmol の表示オプション	18
5. 可視化ツールの利用法	
5.1 Jmol	18
5.2 Graphviz	19
5.3 Gnuplot	20
5.4 grrMap	21
5.4.1 作業対象ファイル GDSP_out.HTM の作成または複写	
5.4.2 grrMap のインストール	
5.4.3 プログラムの実行	
5.4.4 生成したファイルの利用	
5.4.5 1点周り限定表示オプション	
5.4.6 出力画像ファイルの再作成	
5.5 TsDisp	24
5.5.1 作業対象ファイル GDSP_out.HTM の作成または複写	
5.5.2 TsDisp のインストール	
5.5.3 プログラムの実行	
5.5.4 生成するファイルとその利用	
5.5.5 TS 前後の画像表示とエネルギーMap	
5.5.6 カスタマイズ	
6. ブラウザと Java	
6.1 ブラウザ	26
6.2 Java	26

1. はじめに

コンピュータから直接出てくるデータのままで化学的内容を理解することは非常に困難ですが、立体表示ソフトで可視化するとたいへん理解しやすくなります。出力データを立体表示ソフトで可視化する作業は、計算化学プログラムを利用するユーザーが日常的に行っていることで、慣れていれば簡単にできることです。でも、GRRM の出力データを可視化して解析するときはどうでしょうか。データが数個なら個別に作業してもたいしたことはありませんが、GRRM から出てくるデータは、数百、数千、さらには、数万にも達します。

大量の出力データの中から必要な情報を素早く取り出すためには、得られたデータ全体がうまく整理されていなければなりません。通常、GRRM の出力データは、見つかった順番に記録されるため、「エネルギーの序列」や「各構造がその周囲とどう繋がっているかの連結関係」などを調べるには、データの整理が不可欠です。このようなデータ整理も含めて可視化の作業を手作業で進めると、1000個程度のデータでも、1ヶ月以上もかかってしまいます。

そこで誕生したのが、GRRM-GDSP システムです。GRRM-GDSP システムは、簡単な操作で GRRM の出力ファイルから計算結果の主要部分の Web 表示を自動的に（ほとんど瞬時に）作成します。これによって、データの解析に膨大な時間を費やさずに済み、GRRM から得られた結果を素早く活用できるようになりました。

GRRM-GDSP システムは、GRRM プログラムの実行終了後データを解析して可視化する基本 version に加えて、GRRM プログラム実行中に随時リアルタイムで探索結果を解析し可視化するリアルタイム表示プログラム GRRMgdsp が付属しています。リアルタイム表示を行うには、LAN 接続で探索中に生じたファイル群を閲覧できる環境が必要です。まずは、基本 version の GRRM-GDSP を試してから、リアルタイム表示 version の GRRMgdsp をお試しください。

この小冊子は、GRRM-GDSP システムをご利用いただくための解説書としてまとめたものです。GRRM-GDSP システムは、多数のプログラムやファイルからなり、手作業でのインストールが必要です。2章で基本 version の GRRM-GDSP について解説し、3章でリアルタイム表示ができる GRRMgdsp について解説します。4章で Web 表示の操作法について補足したのち、5章で GRRM-GDSP で用いている可視化ツールの利用法について解説します。

以下の解説にしたがって GRRM-GDSP システムをインストールし、GRRM で切り開かれる化学の新世界・未知化学へのチャレンジを、こころゆくまで お楽しみください。

なお、この「GRRM-GDSP Gaiyo」では、以下の各章の概要だけを紹介しております。各章に含まれる項目については、上の目次をご覧ください。実際の詳しい説明につきましては、GRRM-GDSP ユーザーマニュアル本体で解説されております。ここでは、その概要についてのご紹介だけになりますことをご容赦ください。

2. Web 表示自動作成システム GRRM-GDSP

GRRM-GDSP は、GRRM プログラムによる大量の探索結果を自動解析し、整理された化学情報を可視化して Web ブラウザで閲覧できるようにします。GRRM-GDSP による可視化の対象は、#GRRM 及び、その結果をさらにレベルを上げて再計算する#ReStruct や#ReEnergy で指定された GRRM-JOB の出力データです。GRRM プログラムのその他機能で生じる結果は、個別的で、情報量が少ないため、GRRM-GDSP の対象ではありません。

3. リアルタイム可視化システム GRRMgdsp

GRRM プログラムの探索の途中でも、探索結果を GRRM-GDSP システムで可視化して閲覧することは可能ですが、GRRM-GDSP の基本 version をその都度起動し Web 表示を閲覧するための作業を何度も行う必要があります。そこで、探索の途中経過の可視化を時々刻々自動的に実行するようにしたものが GRRMgdsp です。この GRRMgdsp の開発により、GRRM プログラムの実行中にリアルタイムで探索結果を Web ブラウザで閲覧できるようになりました。

GRRMgdsp では、GRRM プログラムがすでに実行されている状況でその機能を利用開始できるだけでなく、GRRM プログラムの実行開始も含めて実行することができます。

4. Web 表示操作法

GRRM-GDSP の Web 表示を効果的に利用するのに役立つテクニックを解説します。Web ブラウザには、いろいろな機能が備わっていますので、その機能をうまくつかうと、GRRM_GDSP の利用効果を飛躍的に高めることができます。

5. 可視化ツールの利用法

GRRM_GDSP では、GRRM で収集したコンテンツを可視化するために、いろいろな可視化ツールを利用します。Jmol, Graphviz, Gnuplot の概要とインストール方法を紹介し、それらを用いて GRRM_GDSP システムの機能を強化するために開発された GRRM 専用の可視化ツール grrMap と TsDisp について詳しく解説します。

6. ブラウザと Java

GRRM_GDSP システムでは、インターネット用のブラウザを利用します。また、可視化するためのツールとして用いる Jmol を動かすため Java を利用します。これらを利用する上での注意点を簡潔にまとめてあります。