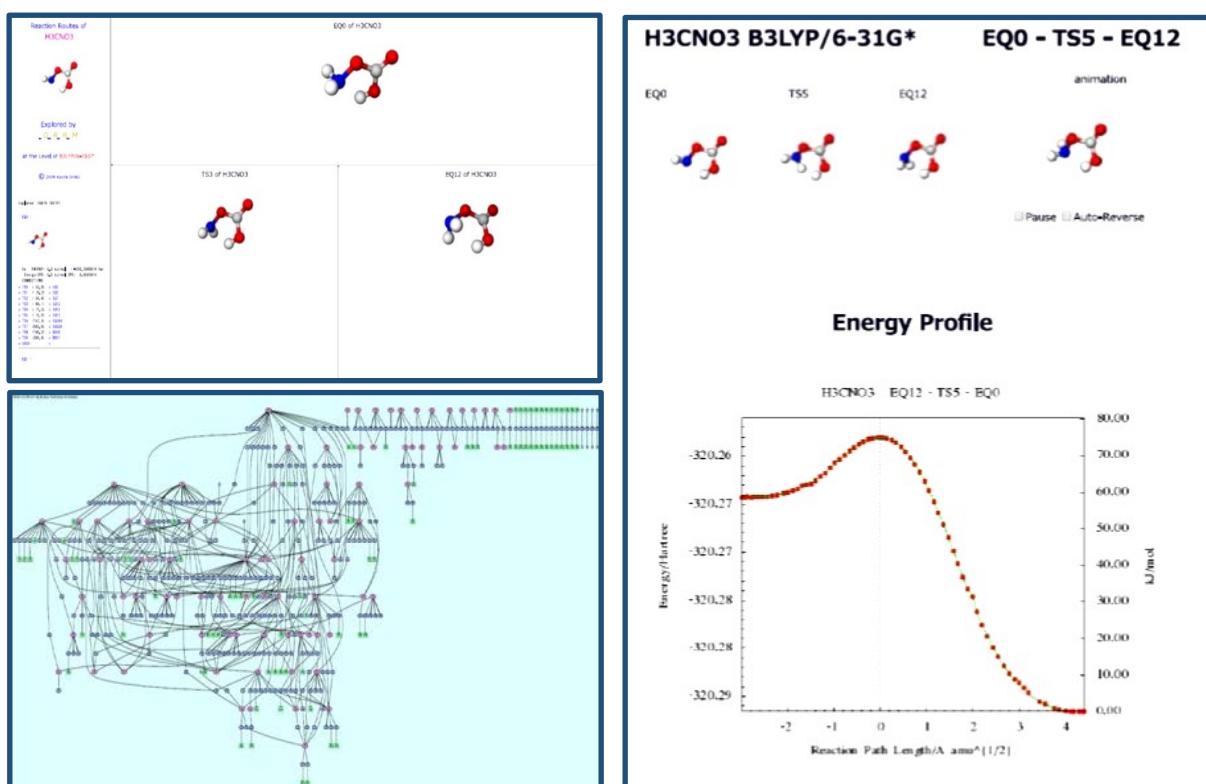


# GRRM-GDSP

未知化学への挑戦



- 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	6
2.2.1	連結グラフ作図ソフト (Graphviz)	
2.2.2	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 プログラムの実行)	6
2.3.1	表示対象ファイル群	
2.3.2	プログラムの実行	
2.3.3	Web 表示ファイルの抽出	
2.4	Web ブラウザを用いた閲覧	8
2.4.1	Web 表示ファイルの置き場所と Web 接続方法	
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	9
3.	Web 表示操作法	
3.1	立体画像サイズの変更	12
3.2	ブラウザ表示の活用	12
3.3	フレーム中の各画面の分割表示	14
3.3.1	全体リスト (フレーム左欄) の単独表示	
3.3.2	右側フレームの「上段」「下段左」「下段右」の単独表示	
3.4	立体画像の表示オプション	14
3.4.1	立体画像の表示操作	
3.4.2	立体画像中の原子の表示	
3.4.3	立体画像中の結合の表示	

## 4. 可視化ツールの利用法

<b>4.1 Graphviz</b>	15
<b>4.2 Gnuplot</b>	16
<b>4.3 grrMap</b>	16
<b>4.3.1 作業対象ファイル GDSP_out.HTM の作成または複写</b>	
<b>4.3.2 grrMap のインストール</b>	
<b>4.3.3 プログラムの実行</b>	
<b>4.3.4 生成するファイルとその利用</b>	
<b>4.3.5 1点周り限定表示オプション</b>	
<b>4.3.6 出力画像ファイルの再作成</b>	
<b>4.4 TsDisp</b>	20
<b>4.4.1 作業対象ファイル GDSP_out.HTM の作成または複写</b>	
<b>4.4.2 TsDisp のインストール</b>	
<b>4.4.3 プログラムの実行</b>	
<b>4.4.4 生成するファイルとその利用</b>	
<b>4.4.5 TS 前後の画像表示とエネルギーMap</b>	
<b>4.4.6 カスタマイズ</b>	
<b>GRRM-GDSP 著作権</b>	23

## 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に、1000個程度のデータでも、1ヶ月以上もかかることがあります。

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。

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 GRRM-GDSP について解説します。3章で Web 表示の操作法について補足し、4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、お楽しみください。

## 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 の出力データです。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 の出力データなど、#GRRM と同じ形式の出力データにも GRRM-GDSP を適用することができます。(GRRM-GDSP の改訂 version 2.05 から、SC-AFIR の出力を RePath や ReStruct で改良したファイル群に適用できるようになりました。)

### 2.1 GRRM-GDSP システムのインストール

GRRM プログラムを利用するときには、Linux/Unix 計算機に、環境変数 **GRRMroot** で定義したディレクトリ（例えば、`setenv GRRMroot /home/userDir/GRRMxx`）をつくり、そこに GRRM の実行

プログラム（GRRMp）を置いてパスを通します。このやり方は、GRRMxx（GRRM11 または GRRM14）の利用説明書に GRRM のインストール方法として詳しく説明されています。

GRRM-GDSP システムのファイルは、環境変数 **GRRMroot** で定義したディレクトリに、GDSP という名称のサブディレクトリ（例えば、/home/userDir/GRRMxx/GDSP）を作成し、その中に置きます（GRRM-GDSP システムに含まれる「LICENSE」は、分子構造表示に使用する GLmol のライセンスファイルです。）。

GRRM-GDSP システムは、以下の 15 個のファイルで構成されています。

<b>GRRM_GDSP.pl</b>	GRRM-GDSP 実行ファイル本体
<b>formDC.exe</b>	解離経路解析用補助プログラム
<b>grrMap.pl</b>	反応経路網 Map 作成プログラム
<b>TsDisp.pl</b>	TS 前後表示作成プログラム
<b>TS_enp.txt</b>	TS エネルギーMap 作成補助ファイル
<b>GDSP.HTM</b>	Web 表示起動ファイル
<b>GDSP_0.HTM</b>	Web 表示リストひな形ファイル
<b>GDSP_out.HTM</b>	Web 表示リスト初期画面ファイル
<b>XXn_0.HTM</b>	構造表示ひな形ファイル
<b>XXna_0.HTM</b>	動画表示ひな形ファイル
<b>0_0.HTM</b>	空表示ファイル
<b>anime.js</b>	動画表示ツール
<b>GLmol.js</b>	分子構造表示ツール
<b>jquery-1.7.min.js</b>	分子構造表示ツール
<b>Three49custom.js</b>	分子構造表示ツール

ファイルの permission は、実行ファイル(.pl と.exe)は実行可に、他のファイル(.txt、.HTM、.js)は読み取可にします。また、末尾が.pl のプログラムを任意の場所から起動できるようにするために、つぎの操作でリンクを作成します。

#### <リンクの作成>

```
ln -s $GRRMroot/GDSP/GRRM_GDSP.pl    $GRRMroot/GRRM_GDSP
ln -s $GRRMroot/GDSP/grrMap.pl        $GRRMroot/grrMap
ln -s $GRRMroot/GDSP/TsDisp.pl        $GRRMroot/TsDisp
```

こうすると、GRRM\_GDSP, grrMap, TsDisp をコマンドとして使えるようになります。

#### <perl プログラム>

末尾が.pl のファイルは、プログラム言語 **perl** で書かれています。ユーザーの Linux/Unix システム上で perl が使えるかどうかは、which コマンドで調べることができます。コマンドラインで、which perl を実行すると、通常、次のように表示されます。

/usr/bin/perl

この例のように、…perl が出てくれば、perl の使用が可能です。ただし、perl の直前の…の部分が /usr/bin/ でないときは、インストールした.pl プログラムをそれぞれエディタで開き、各ファイルの一行目（#!/usr/bin/perl -s）を…に合わせて（#!…perl -s に）変更する必要があります。

もしも、perl がインストールされていなかったときは、perl プログラムをインストールする必要があります。Perl の Web ページ <http://www.perl.org/> にアクセスし、perl プログラムをダウンロードして Linux/Unix 計算機にインストールしてください。

## 2.2 可視化ツールのインストール

### 2.2.1 連結グラフ作図ソフト（Graphviz）

探索された安定構造 (EQ)、遷移構造 (TS)、解離構造 (DC) などがどのようにつながっているかを図形表示するために、**Graphviz** という作図ソフトを用います。

<http://www.graphviz.org/> から Graphviz を入手し、(2.1 で GRRM-GDSP をインストールした) Linux/Unix 計算機にインストールし、任意の場所で使えるように path を設定します。最近の Linux 計算機では、Graphviz がインストール済みのことがあるので、コマンドラインに

```
whereis graphviz
```

を投入して調べてみるとよいでしょう。存在すればその path が表示され、存在しなければ not found などと表示されます。既にインストールされているなら、新たにインストールする必要はありません。

### 2.2.2 曲線グラフ作図ソフト（Gnuplot）

探索された遷移構造 TS の前後のエネルギー変化を作図するために、**Gnuplot** という作図ソフトを用います。

<http://www.gnuplot.info/> から Gnuplot を入手し、2.1 で GRRM-GDSP をインストールした Linux/Unix 計算機にインストールして、任意の場所で使えるよう path を設定します。最近の Linux 計算機では、Gnuplot がインストール済みのことがあるので、コマンドラインに

```
whereis gnuplot
```

を投入して調べてみるとよいでしょう。存在すればその path が表示され、存在しなければ not found などと表示されます。既にインストールされているなら、新たにインストールする必要はありません。

## 2.3 Web 表示ファイルの作成（GRRM-GDSP プログラムの実行）

まず、Linux/Unix 計算機中の表示対象ファイル群（GRRM プログラムの入力ファイルと出力ファイル）の所在を確認します。

つぎに、表示対象ファイル群が置かれているディレクトリにアクセスし、コマンドラインから GRRM-GDSP システムを起動（GRRM-GDSP プログラムを実行）します。

### 2.3.1 表示対象ファイル群

表示対象の GRRM 入力ファイルと GRRM 出力ファイルが、Linux/Unix サーバの 1 つのディレクトリにあることを確認します。以下のファイルが、読み取可能な状態で存在することを確認します。

### ・GRRM 入力ファイル

GRRM プログラムを起動するために用いた入力ファイル（GRRM 入力ファイル）

**\*\*\*.com**

が必要です。これは、入力データから、計算レベルや化学式情報（元素組成）を自動的に取得し、Web 表示に反映させるために用いられます。（化学式を手動で入力したいときは、実行コマンド GRRM\_GDSP の引数に **-Cname=\*\*\*\*** を追加し、\*\*\*\* の部分に表示させたい化学式を指定します。**-test=Name** をコマンド引数に付加すると化学式自動判定のテストができます。）

### ・GRRM 出力ファイル

以下のファイルが存在すれば、GRRM-GDSP による Web 表示の対象となります。

**\*\*\*\_EQ\_list.log**

**\*\*\*\_TS\_list.log**

**\*\*\*\_DC\_list.log**

**\*\*\*\_TSn.log** (\*\*\*\_TS0.log, \*\*\*\_TS1.log, \*\*\*\_TS2.log など全部)

\*\*\*の部分は、GRRM 入力ファイル \*\*\*.com の\*\*\*の部分です。\*\*\*の部分は変更可能ですが、全ファイルに共通でなければなりません。探索の途中やオプションによって、一部のファイルしか生成していない場合でも、GRRM-GDSP による Web 表示の対象となります。

### 2.3.2 プログラムの実行

Linux/Unix サーバのコマンドラインから、次のコマンドを投入します。

**GRRM\_GDSP -Cfile=\*\*\***

\*\*\*の部分は、GRRM 入力ファイル・出力ファイル（上記参照）の名称の \*\*\* の部分と同じになります。\*\*\*の部分が **grmm** になっていれば、**-Cfile=\*\*\*** を省略できます。

以上は、GRRM プログラムを用いた作業ディレクトリに存在する GRRM の入出力ファイル群を移動せずにそのまま利用することを前提にしていますので、GRRM の作業ディレクトリ中に、GRRM-GDSP の Web 表示ファイル群が生成します。

GRRM の入出力ファイルのうち、GRRM-GDSP の作業対象ファイルだけをユーザーが選んだ別なディレクトリにコピーして、そこで GRRM-GDSP のコマンドを実行すれば、その場所に Web 表示ファイルを得ることができます。GRRM-GDSP が作業対象とするファイルの数と比べて、GRRM-GDSP が output する Web 表示ファイルの数の方が、通常、圧倒的に多く、コピーや移動に手間や時間がかかるので、Web 表示ファイルの利用形態に合わせて、適切な場所で、GRRM-GDSP プログラムを実行することをお勧めします。とくに、インターネット経由で閲覧するとき、GRRM の作業ファイルがインターネット公開領域にないときは、予めインターネット公開領域にコピーしてから GRRM-GDSP を適用するとよいでしょう。

### 2.3.3 Web 表示ファイルの抽出

作業ディレクトリに多数の Web 表示用のファイル（末尾が、**.HTM**, **.js**, **.xyz**, **.png**, **.pdf** のファイル）が生成しますが、Web 表示に必要なないファイルも多数あるため、Web 表示用ファイルだけを、別のディレクトリ（たとえば、**/WEB**）に、次の操作で抽出するとよいでしょう。

**mkdir WEB**

```
cp *.HTM ./WEB
cp *.js ./WEB
cp *.xyz ./WEB
cp *.png ./WEB
cp *.pdf ./WEB
```

このように、1つのディレクトリ（この例では作業ディレクトリ内のサブディレクトリ **WEB**）に Web 表示用の全ファイルがあるので、他の場所にコピーするとき、そのディレクトリを丸ごとコピーすることができ、コピー操作が簡単になります。ディレクトリの名称は、表示対象化合物の分子式など（たとえば H2CO）、わかりやすい名称にしておくと便利です。

## 2.4 Web ブラウザを用いた閲覧

GRRM-GDSP プログラムで生成した Web 表示ファイルを閲覧する方法を以下に示します。

### 2.4.1 Web 表示ファイルの置き場所と Web 接続方法

以下の3通りの場合があります。

1) PC(パソコン)に Web 表示ファイルを置き、その PC のブラウザで見る場合

Web 表示用ファイル（.HTM ファイル等）を PC 内に置き、その PC のブラウザで開きます。

2) Linux/Unix 計算機に Web 表示ファイルを置き、計算機直結モニターのブラウザで見る場合

Web 表示用ファイル（.HTM ファイル等）を計算機内に置き、その端末のブラウザで開きます。

3) Linux/Unix 計算機に Web 表示ファイルを置き、インターネットを経由して PC で見る場合

インターネット経由で閲覧できるようにするには、インターネット接続設定がされている計算機の**/var/www/html**など、インターネット接続可能な領域に、表示内容に該当する分子式などの名称のディレクトリを作成し、その中に、Web 表示用ファイル（末尾が **.HTM**, **.js**, **.xyz**, **.png**, **.pdf** の全ファイル）を置き、外部の PC 等のブラウザからインターネット接続して閲覧します。

### 2.4.2 ブラウザでの閲覧

GLmol の画像表示に対応したブラウザを用います。**Google Chrome**, **Safari**, **Fire Fox** が対応しています。また、**Internet Explorer (IE)** は、**IE 11** 以降が対応しています。

GRRM-GDSP の Web 表示ファイルの閲覧は、そのファイルが置かれたディレクトリを指定する URL を`/.../` とすると、Web ブラウザに`/.../GDSP.HTM` を投入することで、閲覧できます。`/.../` の部分は、インターネット経由と直接計算機または PC 上のファイルの path を指定する場合（直接指定）とで異なりますが、それぞれ、以下の例のようになります。

(インターネット経由    [http://iqce.jp/SRPS/JMOL/H2CO2\\_js/GDSP.HTM](http://iqce.jp/SRPS/JMOL/H2CO2_js/GDSP.HTM)  
 (直接指定)                file:///C:/GRRM\_Calc/H2CO2\_js/GDSP.HTM

どちらも、末尾が、**GDSP.HTM** となっています。インターネットの場合は、表示対象ファイルのあるディレクトリへの URL パス `http://···/` が、直接指定の場合は、その計算機または PC 上で表示対象ファイルのあるディレクトリへのパス `file:///C:/···/` が、それぞれ、**GDSP.HTM** の前に付きます。PC の場合は、URL を打ち込む代わりに、GRRM-GDSP の Web 表示ファイルのリストを表示させ、その中に含まれる **GDSP.HTM** をクリックする（右クリックしてから、プルダウンメニューで、使用するブラウザを選ぶ）と、ブラウザが開いて閲覧できるようになります。

#### 2.4.3 Web 表示の内容と閲覧方法

画面の左上に、**Reaction Routes of** (表示対象化学式)が表示され、その下に、最安定構造の立体画像が表示されます。（立体画像は、マウスポインタでドラッグして向きを変えたり、マウスホイールを回転させて拡大縮小させたりすることができます。）

計算レベルの表示と○が表示され、その下に、探索された EQ 数と TS 数が表示されます。探索された EQ や TS など表示対象となるすべての構造のリストが、左側に並べられて表示されます。  
 [EQn] や [TSn] [DDCn] [UDCn] をクリックすると、立体構造表示画像が右側の上部に表示されます。また、左の欄では、それぞれの構造とつながっている構造の番号がリンクになっています。リンクをクリックすると、その構造データのところに飛びます。EQ の CONNECTION は、TSn (kJ 単位のエネルギー) とその先の構造へのリンク、DDC では TSn とその先の構造へのリンクがあります。リンクの前の「o」をクリックすると、立体構造の図が、右の下欄の左または右に表示されます。

- ・反応経路網全貌の表示：画面の左上の**Reaction Routes of** のすぐ下に表示されている「化学式」をクリックすると、反応経路網 Map が表示されます（Graphviz がインストールされていない環境では Map は作成されません。詳しくは、「**4.3 grrMap**」の解説をご覧ください）。

アニメーションの閲覧：[TSn] のリストから見たい番号を選び、[TSn] の右に表示されている **Animation** をクリックすると、右の上欄に TSn の前後のアニメーション(動画)が表示されます。

- ・左欄の立体構造表示数：EQ の立体構造の表示数が多いとブラウザの読み込みに時間がかかることと GLmol 画像の表示数がブラウザによって制限されているため、EQ10 までに制限されています。

- ・TS 前後情報の総合表示：各 EQ リストの下の CONNECTIONS の下にリストされている oTSn(の網掛け部分をクリックすると、各 TS 前後の構造とアニメーション、TS 前後のエネルギー Map が表示されます（エネルギー Map が作成されるためには、Web 表示を作成する計算機に gnuplot という作図ソフトがインストールされていることが必要になります。詳細は、「**4.4 TsDisp**」の解説をご覧ください。）。

## 2.5 出力されるファイル群

GRRM-GDSP プログラムを実行することによって生成するファイルについて説明しますが、2.4 に説明した方法で、GRRM-GDSP システムで可視化された情報をブラウザから閲覧できていれば、以下の記述を参照する必要はありません。状況によって、適切に可視化されていない場合など、問題がある場合には、必要に応じ、以下を参照してください。

### [ ...\_list\_2nw.log ファイル]

**GRRM** プログラムの直接出力ファイル...**list.log** の情報を解析して整理された結果が、以下の名前で **log** ファイルに出力されます（オプション指定によっては、いくつか省略されます）。

\*\*\*\_EQ\_list\_2new.log

\*\*\*\_TS\_list\_2new.log

\*\*\*\_DDC\_list\_2new.log

\*\*\*\_UDC\_list\_2new.log

### [ .xyz ファイル]

探索された構造の 3 次元座標を収録した座標データファイルとして、下記の **.xyz** ファイルが出力されます。

**EQn.xyz**

**DDCn.xyz**

**UDCn.xyz**

**TSn.xyz**

**TSna.xyz**

### [ .HTM ファイル]

**Web** 表示用の出力ファイルとして、以下のファイルが生成します。

**EQn.HTM**

**DDCn.HTM**

**UDCn.HTM**

**TSn.HTM**

**TSna.HTM**

**TSnb.HTM**

**GDSP\_out.HTM**

以上のうち、**TSna.HTM** は、**TSn** 前後のアニメーションを表示します。**TSnb.HTM** は、**TSn** 前後の静止画像に加えて、前後のアニメーション及び前後のエネルギー変化のグラフを表示します。**GDSP\_out.HTM** は、**Web** 表示の左フレームを表示するためのものです。

以上の**.HTM** ファイルは、それぞれ単独でブラウザ上に **Web** 表示させることもできます。

### [**grrm.dot**、**grrm.pdf**]

**grrMap.pl** が実行されると、まず **grrm.dot** が生成し、次にこのファイルの内容が **dot** コマンドで処理され、反応経路網を描画した **grrm.pdf** が出力されます。 **grrm.pdf** は、そのまま（もしくはコピーして）閲覧できますし、印刷することもできます。**grrm.dot** は Graphviz で描画処理するための中間ファイルですので、画像作成上の指定を（Graphviz の仕様の範囲内で）変更すると、図の体裁やファイル形式を変更できます。なお、GRRM の探索結果が非常に多くなると、pdf の内容が正しく表示されず、画面全体が真白になることがあります。このような場合は、手作業で **grrm.dot** の内容を減らすか、**grrMap.pl** のコマンド引数を指定し直して **grrMap.pl** を再実行すると、反応経路網の画像が表示できるようになります。探索結果が膨大になると、1つの pdf 画面に全体を表示できなくなる可能性があるので、エネルギーの上限値を大幅に引き下げるなどの対応が必要になります。計算機によって、**grrm.dot** が生成しているのに、**grrm.pdf** が生じていないことがあります。これは、Graphviz は機能するが、画像を記録するファイル種別として pdf が許容されていないケースです。このときは、**grrm.dot** はそのまま利用できますので、画像ファイルの指定を pdf 以外で使用可能なもの、たとえば、png に変更して、

```
dot -Tpng grrm.dot -o grrm.png
```

をコマンドラインに投入し、**grrm.png** を作成します。あるいは pdf を作成できる計算機で、

```
dot -Tpdf grrm.dot -o grrm.pdf
```

をコマンドラインに投入して、**grrm.pdf** を作り直します。

反応経路網の画像ファイルは、Map 作成プログラム **grrMap.pl** を用いて、簡単に作り直すことができます。詳細は「**4.3 grrMap**」の解説に譲りますが、**-reMap** オプションを用いた次のコマンドで、エネルギーの上限値を 400 に下げた画像ファイルが得られます。

```
grrmMap -reMap -Level=400
```

### [**TSnenp.dat**、**TSnenp.gp**、**TSnenp.png**]

GRRM-GDSP (GRRM-GDSP.pl) が実行されると、GRRM の探索結果から、各 **TSn** 前後の反応経路に沿った距離とエネルギーのデータが切り出され、**TSnenp.dat** が生成します。また、.dat ファイルを参照して TS 前後のエネルギー Map (エネルギー変化を表すグラフ) を作図するためのファイル **TSnenp.gp** が生成します。次に、**TSnenp.gp** を入力データとして **gnuplot** が起動し、各 **TSn** 前後のエネルギー Map を作図した **TSnenp.png** が output されます。**TSnenp.png** は、そのまま閲覧・印刷できます。**TSnenp.gp** は、**gnuplot** で描画処理するための中間ファイルですので、画像作成上の指定を (**gnuplot** の仕様の範囲内で) 変更すると、出力される図の体裁やファイル形式を変更することができます。

### 3. 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。

#### 3.1 立体画像サイズの変更

Web 表示の立体画像のサイズは、2.1 でインストールしたファイル群に含まれるひな形ファイルの中で、次のように px の前の網掛け部分の数字で設定されています。数字を変えれば、画像のサイズが変わります。数字を大きくすれば大きく、小さくすれば小さくなります。

```
style="width: 200px; height: 200px; background-color: black;"
```

`width` は幅が、`height` は高さが、数字の大きさに応じて変ります。変更前の状況から適宜数字を変更して、適切な大きさに調節するとよいでしょう。(設定の最後にある `background-color: black` は、画像の背景色の設定です。色指定文字列の `black` (`white`, `gray`, `blue` のこともある) を、他の色指定文字列、`white`, `gray`, `blue`, `red`, `yellow`, `green`, `purple`, `lime`, `aqua`, `gold`, `silver` やカラーコードの RGB 指定記号 `#ADEAEA` などに変更し、好みの背景色にカスタマイズすることができます。)

なお、このような立体画像の設定は、GRRM-GDSP で作成済みの Web 表示ファイル (.HTM) 対しても、`style=` の設定を変更することで個別に行うことができます。適切なサイズや背景色を決める際には、既に作成されたファイルを適宜変更して、試して見るとよいでしょう。

ひな形ファイルを変更して、GRRM-GDSP システムによる Web 表示ファイルの作成を行えば、画像のサイズを変更したファイル群が得られます。以前作成した Web 表示ファイルが不要な場合は、同じディレクトリで GRRM-GDSP の作業を行って上書きすればよいでしょう。

Web 表示ファイル (.HTM) に含まれる画像サイズを指定する数字の部分を、個々のファイルについて変更しても、それぞれ画像のサイズを変えられますが、全体を一括して変更しないと、手間がかかるだけでなく、部分的に変更すると、変更したファイルと変更していないファイルが混在し、ファイル管理上好ましくありません。つぎに示すブラウザの表示オプションを利用する」と、ファイル群はそのままで、表示のさせ方だけを変更できて便利です。

#### 3.2 ブラウザ表示の活用

ブラウザのオプション機能を用いると、GRRM-GDSP システムをさらに効果的にご利用いただけるようになります。ブラウザの種類や `version` で機能が異なりますので、詳しくは各ブラウザの説明書をご覧ください。

- ・フレーム枠の移動

マウスポインタをフレーム枠に合わせ、左クリックでドラグすると移動します。

<フレーム枠初期設定の変更>

上の方法で、フレーム枠の位置は随時変更できますが、デフォルトの設定ではブラウザの種類や解像度などにより具合が悪く、毎回フレーム枠を移動するのが面倒な場合があります。

そのような場合は、フレーム枠の初期設定を変更してください。フレームの初期設定は、Web 表示ファイルに含まれる GDSP.HTM の中にある次の 3 行にある数字で決まっています。

```
<FRAMESET Cols="250,*">
```

<FRAMESET Rows="400,\*">

<FRAMESET Cols="500,\*">

最初の Cols は、左フレームの幅、次の Rows は、右上フレームの行数、その下の Cols は右下の 2 つのフレームのうちの左側の幅を、それぞれ指定しています。これらの設定値は、GRRM-GDSP システムのプログラムや他のファイルとは関係しません。いつでも変更可能で、変更後 ブラウザを再表示すれば、変更した設定が反映されます。フレームが適切な状況になるまで、何度か変更してみるとよいでしょう。

#### ・全画面表示

Function Key 「F11」 を押すと全画面表示になり、もう一度「F11」 を押すと元に戻ります。(全画面表示への移行は、ブラウザの「設定」や「表示」の option で行うこともできますが、ブラウザの種類で、やり方は異なります。)

#### ・文字サイズの変更

Google Chrome (**GC**)では、URL 入力欄の右外の「:」をクリックして、プルダウンメニューの「設定 (S)」を選び、さらに「詳細設定を表示」をクリックして詳細設定メニューを開くと、文字のサイズの変更ができます。Internet Explorer (**IE**)では、「表示(V)」のプルダウンメニューの「文字サイズ(X)」で、文字サイズを変更できます。

#### ・ブラウザ内全体の表示サイズの変更

「Ctrl」「+」や「Ctrl」「-」(Ctrl キーを押したまま+または-キーを押す) を用いるとワンタッチで拡大縮小できて便利です。また、ブラウザの画像表示以外のところにマウスポインタを置いた状態で、Ctrl キーを押しながらマウスホイール（マウス中央上の回転ボタン）を上下にまわすことで、簡単にブラウザ内の表示全体を拡大縮小することができます。

このほか、**GC** では、設定メニューの「ズーム」でサイズの変更ができます。**IE** では、「表示(V)」のプルダウンメニューの「拡大(Z)」で、拡大・縮小(400%~50%)ができます。

#### ・文字列検索

**GC** では設定メニューの「検索 (F)」、**IE** では「編集(E)：このページの検索」を使うと、「該当文字列」にジャンプ（反転表示）します。たとえば、検索窓に C2v を入れると、左のリスト中の構造で C2v になっているところに飛びます。検索窓の横の「^、前へ」や「v、次へ」をクリックすると別の該当箇所へ飛んでくれます。

pdf が表示される場合にも、pdf の検索機能を用いると、たいへん便利です。

#### ・ブラウザ表示全体の転写

キーボードの PrtSc キー（画面プリントキー）を利用すると、ブラウザの表示内容全体を画像としてコピーし、PC 上で利用できる他のソフト（ワードファイル、パワーポイントファイル、画像処理ファイル等）に貼り付けることができます。この機能で、ブラウザ全体をコピーするには、まず全画面表示にしておく必要があります。なお、ブラウザの種類や設定状況によって、全画面コピーのやり方が違う場合があります。

### 3.3 フレーム中の各画面の分割表示

GDSP.HTM でブラウザの表示を行うと、左端のフレームに GDSP\_out.HTM の内容が表示され、リンクをクリックすると、立体画像が、右側の「上段」「下段左」「下段右」に表示されます。これら 4 種の画面を、次に示す方法で、別々のブラウザに表示すると、それぞれ拡大・縮小（や印刷）でき、また、ウインドウのサイズや配置も自由に変更できて便利です。

#### 3.3.1 全体リスト（フレーム左欄）の単独表示

（方法 A） ブラウザの URL 窓の末尾を GDSP\_out.HTM に変更して開く

（方法 B） GDSP.HTM を開いてフレーム形式の GDSP を起動した状態で、任意の CONNECTION 中の「o」の右の構造リンク（TS<sub>n</sub>、EQ<sub>n</sub> 等）のどれか一つを右クリックすると、プルダウンメニューが開くので、「新しいウインドウで開く」を選択します。新しいウインドウが開けたら、最初に開いたフレーム形式のブラウザを閉じます。こうすると、

GDSP\_out.HTM を起動した（方法 A）場合と同じ状態になります。

以上の方で「全体リスト」のウインドウが開いたら、ブラウザを細長に調節します。

#### 3.3.2 右側フレームの「上段」「下段左」「下段右」の単独表示

それぞれ以下の操作で、「新しいウインドウで開く」を選択します。

「上段」： 全体リスト中の[EQ<sub>n</sub>][TS<sub>n</sub>]等のどれか 1 つの見出しを右クリック

「下段左」： 全体リストの CONNECTION 中の左側の「o」のどれか一つを右クリック

「下段右」： 全体リストの CONNECTION 中の右側の「o」のどれか一つを右クリック

新しいウインドウが開いたら、ウインドウのサイズを適当な大きさに調節し、使いやすい位置に並べます。全体リストのリンクをクリックすると該当する窓に構造が表示されます。

### 3.4 立体画像の表示オプション

#### 3.4.1 立体画像の表示操作

- ・（表示図形の回転） マウスの左ボタンで画面をドラグすると表示物体の向きが変る。
- ・（表示内容の拡大縮小） マウスホイールの回転で表示物体のサイズが変る（表示枠は不変）
- ・（動画の表示方法の変更）

動画の下に表示されている  Pause の先頭の （チェックボックス）をクリックすると、チェックマーク  がつき、動画が停止します。もう一度チェックボックス  をクリックするとチェックマークが消えて動画が再び動き出します。

Auto-Reverse の前の  をクリックすると、動画の表示が自動逆転モードになり、反応過程の往路と復路を循環させて表示します。もう一度クリックすると、自動逆転は解除され、一方向への反応過程の進行が始点から終点まで行くと直ぐに始点に戻って繰り返されます。

#### 3.4.2 立体画像中の原子の表示

原子の色は、H○、C●、O●、N●、S●、F●、Cl●、Br●、I●、Fe●、Ca●などとなっており、未定義の場合は、Hと同じ○になります。この設定は、分子構造表示ツールのファイル **GLmol.js** の 48 行目以降で、"と"ではさまれた元素記号のアルファベットと、:0x に続く 6 衍の文字列（HTML

カラーコード、Red, Green, Blue の順に、強さが 00 から FF までの 16 進数 2 文字ずつで指定される) でなされていますので、必要に応じ原子の色指定を追加できます。たとえば、他の原子の設定の前か後に "B": 0xFFC0CB を、「,」で区切って追加すると、B が ● で表示されます。

### 3.4.3 立体画像中の結合の表示

原子間の結合は、共有結合半径の和の 1.25 倍以内の場合に表示され、それより遠い原子間には結合がないとみなされます。結合の有無の判定基準のデフォルト値 1.25 は、**GLmol.js** の 81 行目の `this.connCriteriaRatio = 1.25` で定義されているので、1.25 を別の数値に変更できます。共有結合半径の値は、**GLmol.js** の 60 行目以降に指定されていますが、必要に応じ変更することができます。

## 4. 可視化ツールの利用法

### 4.1 Graphviz

Graphviz の詳しい情報は、次の URL で得られます。

<http://www.graphviz.org/>

ここでは、その概要を簡略に説明します。

Graphviz では、dot 言語と呼ばれるグラフ描画用言語を用いて、.dot を末尾にもつテキストファイル\*\*\*.dot を作成し、それを dot コマンドで処理して、画像ファイル (png, gif, jpg, pdf など) をつくります。

(dot コマンド例) `dot -Tpng ***.dot -o ***.png`

-Txxx は、xxx (この例では png) で、作成する画像ファイルの形式を指定します。\*\*\*.dot でグラフの描画内容が指定され、その指示にしたがって、作成された画像ファイルが\*\*\*.xxx というファイル名で出力されます。

Web で検索すると、Graphviz や dot コマンドの解説をたくさん見つけることができて便利です。

Graphviz が対象とするグラフは、基本的に、線と線が交点で結ばれたものです。交点をノード (node)、線をエッジ(edge)とよびます。グラフを描くためのテキストファイル\*\*\*.dot には、ノードどうしが、どのようにエッジで結ばれているか、その関係が記述されます。また、ノードやエッジには、形、色、名称、その他、いろいろな属性を与えることができ、最終的にそれらが反映されたグラフの画像が描画されます。

Graphviz は、Linux/Unix のみならず、Windows, Mac OS で利用できます。練習用には、使い慣れた PC にインストールして試すとよいでしょう。

Graphviz で問題になることとしては、描画内容が大量になると、うまく画像ファイルができないことがあります。また、pdf ファイルでは、大きなファイルができていても、表示させようとすると内容が真っ白になることや、大量のデータの描画を行おうとするとエラーが出て描画できないこともあります。pdf ファイルを、通常の pdf リーダーで表示させようとするとうまく行かない場合でも、GC などのブラウザで開くと、問題なく閲覧できることがあります。

## 4.2 Gnuplot

Gnuplot の詳しい情報は、次の URL で得られます。

<http://www.gnuplot.info/>

ここでは、その概要を簡略に説明します。

Gnuplot は、さまざまなデータを、2次元や3次元のグラフとして描画するツールです。データとしては、とびとびの一連の数値でもよいですし、数学で使われる関数や多項式でも構いません。

Web で調べると、役に立つ情報がたくさん得られます。たとえば、日本語で解説されている以下のページなどをご参照ください。

<http://graph.pc-physics.com/>

<http://takeno.iee.niit.ac.jp/~foo/GP-jman/gp-jman.html>

また、「gnuplot の精義（第二版）」山本昌志著（カットシステム）は、たいへん詳しく具体的な説明がまとめられている参考書です。Windows, Mac OS X と Linux で、多少使い方の違う面がありますが、上記の Web ページや参考書にしたがって、いろいろ試してみれば、すぐにきれいなグラフを描くことができるようになります。

やや面倒なのは、グラフを扱う「ターミナル」の設定状況が Windows と Linux とで違いがあり、かなり機種依存があることです。PC では、フォントの利用は充実していて、すぐにいろいろ使えるのが普通ですが、Linux マシンでは、自分で好みのフォントを使えるように設定する必要のある場合がほとんどです。ギリシャ文字などの拡張文字が使えるかどうかやその設定も、Linux マシンでは簡単でないのが普通です。科学者、技術者によく普及しつつあるツールですので、利用経験のある人に教えてもらいながら、使い方を身に着けるのもよい方法です。

## 4.3 grrMap

grrMap は、GRRM の探索結果を GRRM-GDSP システムで自動解析するときの補助プログラムです。GRRM-GDSP の出力ファイルの1つである **GDSP\_out.HTM** から、反応経路網を取り出し、全反応経路網を **gif, jpg, png, pdf** などの形式で可視化する自動作図プログラムです。grrMap は、フリーの作図ツール Graphviz を利用します。Graphviz のインストールについては、2.2.2 および 4.1 を参照してください。

### 4.3.1 作業対象ファイル **GDSP\_out.HTM** の作成または複写

grrMap は、**GDSP\_out.HTM** に記されている GRRM プログラムの探索結果の情報を利用しますので、**GDSP\_out.HTM** が必要です。**GDSP\_out.HTM** は、GRRM-GDSP プログラムを実行すると得られます。

作業対象ファイル **GDSP\_out.HTM** の準備ができたら、**Graphviz** がインストールされている計算機中に **grrMap** の作業ディレクトリ（作業 dir）を新たに作成し、そこに作業対象の **GDSP\_out.HTM** をコピーします。すでに **GDSP\_out.HTM** が存在するディレクトリをそのまま用いてもよいですが、**grrMap** の実行によって、古いものは上書きされますので注意が必要です。

### 4.3.2 grrMap のインストール

GRRM-GDSP システムが 2.1 でインストールされていれば、すでに grrMap もインストール済みです。インストールされているかどうかは、次のコマンドをコマンドラインに投入してみればわかります。

#### **which grrMap**

ファイルのパスが表示されればインストール済み、**not found** がでれば、まだですので、2.1 の方法でインストールしてください。

### 4.3.3 プログラムの実行

Linux/Unix サーバのコマンドラインから、つぎのコマンドを投入します。

```
grrMap -Fig=pdf -rankdir=LR -short -Level=800
```

上の例でコマンド名の右にある**-Fig=pdf** などのコマンド引数以外にも、多数のコマンド引数が用意されており、グラフの作成の仕方をいろいろ制御することができます。以下で、各コマンド引数の意味と指定方法について解説します。

- Fig=\*\*\*** : 作成されるグラフの種類の指定。 \*\*\*に、**pdf, gif, jpg, png** などが使える。デフォルトは **pdf**。この指定にしたがって、**grrm.pdf, grrm.gif** などが出力される。
- rankdir=\*\*\*** : グラフの表示方向の指定。 \*\*\*は、**TB, BT, LR, RT** の 4 種類。 **TB** は上→下、**BT** は下→上、**LR** は左→右、**RL** は右→左。デフォルトは **LR**。
- short** : どこにも繋がらない構造（孤立構造）を省略する指定。エネルギー制限で多数出る孤立構造の表示を抑制するのに有効。デフォルトは孤立構造も表示。
- Level=\*\*\*** : 表示エネルギー上限の一括指定。 **-Level=800** とすると 800 kJ/mol 未満の構造のみ表示、800 kJ/mol 以上の構造は省略。次の個別指定は無視。デフォルトは無制限。注：画像ファイルが巨大で **error** になるときは、**Level** 等で出力量を減らす必要があります。
- EQlevel=\*\*\*** : 表示する平衡構造 EQ のエネルギーの上限の指定。 \*\*\*は **Level** と同じ。
- TSlevel=\*\*\*** : 表示する遷移構造 TS のエネルギーの上限の指定。 \*\*\*は **Level** と同じ。
- DClevel=\*\*\*** : 表示する解離構造 DC のエネルギーの上限の指定。 \*\*\*は **Level** と同じ。
- bgcolor=\*\*\*** : グラフの背景色の指定： \*\*\*に、**red, blue, navy, yellow** などの色の名称指定や #abcdef 形式 (#22FFAA など) の色指定が使える。デフォルトは **white**。
- EQcolor=\*\*\*** : 平衡構造 EQ 表示背景色の指定。色の指定方法は、グラフの背景色と同様。デフォルトは、グラフ全体の背景色と同じになる。
- TScolor=\*\*\*** : 遷移構造 TS の輪郭線表示色の指定。色指定方法はグラフの背景色と同様。
- DCcolor=\*\*\*** : 解離構造 DC の輪郭線表示色の指定。色指定方法はグラフの背景色と同様。

- ranksep=\*\*\*** : 表示の先頭から 2 段目（次とその次）までの間隔の指定。 \*\*\*に、1.0などの数値をインチ単位(1 インチ=2.54cm)で指定する。数値が大きいほど間隔が広がって見やすくなる。デフォルトは標準値で全体が均一になる。
- labelsize=\*\*\*** : グラフ名の表示サイズの指定。 \*\*\*にフォントサイズ(point 単位)で指定する。グラフの内容が、化学式と計算レベルで表示され、エネギーを制限した場合は、その条件も、デフォルトでは左上に表示される。
- labelloc=\*\*\*** : グラフ名表示位置の指定。 **t** (上 : デフォルト) または **b** (下) を指定。
- labeljust=\*\*\*** : グラフ名表示の寄せ方の指定。 **l**(左寄せ)、**r**(右寄せ)、デフォルトは中央。
- labelFont=\*\*\*** : グラフ名表示フォントの指定。 \*\*\*に **ArialBd**、**Helvetica**、**Times-Roman**などのフォント名を指定する。デフォルトは **Times-Roman**。
- nodeFont=\*\*\*** : 各構造表示フォントの指定。 グラフ名のフォント指定と同様。
- xxCut** : GRRM で構造の種類の判定がつかなかった構造 (GRRM のリスト中では??、 GRRM-GDSP では xx として分類される) を削除する指定。 short 同様=\*\*\*の指定は不要。 デフォルトでは削除しない。
- Wn=\*\*\*** : TS の強調指定。 \*\*\*で指定する数字が 3 なら、3 番目の TS までを EQ0 の近くに表示(強調)する。デフォルトでは強調しない。
- Weight=\*\*\*** : TS の強調表示の強さの指定。 \*\*\*を 5 にすると他の部分より「5倍」に強調。 Wn の指定があるときだけ有効、 Wn 指定時のデフォルトは 5 倍。
- reMap** : GRRM-GDSP の Web 表示用の反応経路網 Map を作り直すためのオプション。
  - rankdir=TB, -short のほか、背景色やフォントなど GRRM-GDSP の Web 表示用の基本設定が自動的になされるが、ファイルの種類を変える -Fig や -Level, -EQlevel, -TSlevel, -DClevel, -xxCut など表示量を調節するオプションを自由に変更できる。
- Name=xxx** : 出力ファイル名、 xxx.dot, xxx.\* (\*\*\*は、 pdf, png, jpg, gif 等) の先頭部分の xxx の指定。 デフォルトは grm。
- EQonly=\*\*\*** : \*\*\*で番号を指定した EQ\*\*\*の周りの反応経路のみをグラフ化する指定。

#### 4.3.4 生成するファイルとその利用

反応経路網が描画された grm.pdf、 grm.gif 等はそのままコピーしてご利用いただけます(-Name で指定しなければ、ファイル名の先頭はデフォルトで grm になります)。作業 dir 中に、 **grm.dot** というファイルが生じますが、これは、 Graphviz を利用してグラフを作成するための作業ファイルです。 **grm.dot** の内容を直接編集し、 Graphviz を利用してグラフを再描画することもできます。 詳しくは、 Graphviz のマニュアル等をご参照ください。

作成した「反応経路網 Map」は、出力される GRRM\_out.HTM(GRRM\_out\_0.HTM も同じ)にリンクが付き GDSP.HTM の画面先頭の「**Reaction Routes of**」をクリックすると閲覧できます。

#### 4.3.5 1点周り限定表示オプション

特定のEQ周りだけ表示した図を得たいときは、1点周り限定表示オプション**EQonly**をコマンド引数に追加します。

**grrMap -EQonly=n**

ここで、**-EQonly=n** の **n** は、その周囲を表示させたいEQの番号です。0, 1, 2, … 等の番号で指定します。

注：-EQonlyとして=nを省略すると、perlプログラムの自動処理で、n=1とみなされます。nの値が、実際に存在しないEQ番号の場合は、「EQn not found. JOB aborted!」とerrorメッセージが出されて終了します。

#### 4.3.6 出力画像ファイルの再作成

<grrMap の再投入>

GRRM-GDSPによるWeb表示用の反応経路網Mapを、表示量を変更して作り出すためのoptionとして、**-reMap**オプションが用意されています。

**grrMap -reMap -Fig=pdf -Level=800 . . . .**

-reMapを入れることで、Web表示のための標準optionの設定は自動的に行われます。再描画のための指定として、表示量を変更するオプション、-Level、-EQlevel、-EQonly や出力する画像ファイルの種類を決める-Figなどを、必要に応じて追加します。

<dotファイルの再利用>

すでに作成されたdotファイル（デフォルトでgrrm.dot）をそのまま利用して、画像ファイルの種類を変えたいときは、つぎのようにdotコマンドを利用すると便利です。

**dot -T\*\*\* grrm.dot -o grrm.\*\*\***

ここで、\*\*\*の部分は、画像ファイルの種類を指定するためのものであり、pdf, png, jpg, gifなどを指定することができます。-oのあとの**grrm.\*\*\***は出力されるファイル名の指定で、-T\*\*\*で指定した画像ファイルの種類\*\*\*と対応させる必要がありますが、「grrm」の部分は、自由に変更してくださいません。

注：GRRM-GDSPシステムで利用される反応経路網の全体図のファイル名は、grrm.\*\*\*となっていますので、GRRM-GDSPで利用する場合は、不用意に変更しないようにしましょう。

なお、grrm.dotファイルを編集すると、出力される図形ファイルを自由に変更することができます。詳しくは、GraphVizの利用マニュアルを参照してください。

## 4.4 TsDisp

**TsDisp** は、GRRM の探索結果を解析して Web 表示を作成する GRRM-GDSP システムの機能を増強する補助プログラムです。GRRM-GDSP の Web 表示の EQ 情報部分に、各 TS 関連情報をまとめて表示するリンクが追加されます。このリンクをクリックすると、つぎの（1）が上に、（2）が下に、それぞれ表示された Web 画面に移動します。

- (1) 「各 TS 前後の立体構造の静止画像とアニメーション画像の表示」
- (2) 「TS 前後のエネルギーMap(energy profile)」

### 4.4.1 作業対象ファイル **GDSP\_out.HTM** の作成または複写

TsDisp の作業には GRRM-GDSP の出力ファイルの 1 つである **GDSP\_out.HTM** が必要です。 **GDSP\_out.HTM** は、GRRM-GDSP プログラムを実行すると得られます。

### 4.4.2 TsDisp のインストール

GRRM-GDSP システムが 2.1 でインストールされていれば、すでに TsDisp もインストール済みです。インストールされているかどうかは、次のコマンドをコマンドラインに投入しみればわかります。

#### **which TsDisp**

ファイルのパスが表示されればインストール済み、**not found** がでれば、まだですので、2.1 の方法でインストールしてください。

### 4.4.3 プログラムの実行

Linux/Unix サーバのコマンドラインから、つぎのコマンドを投入します。

```
TsDisp -enp -Fig=*** -figSize=***
```

コマンド引数の **-enp**、**-Fig**、**-figSize** は、いずれも省略可能です。

**-enp** : 省略しても TsDisp は起動しますが、**-enp** をつけないと、TS 前後のエネルギーMap を記録した画像ファイル **TSnenp.png** が作業中の **dir** に存在しないときは、TS 前後のエネルギーMap の表示が Web 表示の出力ファイルに追加されません。**-enp** がついていれば、**TSnenp.png** の有無にかかわらず、TS 前後のエネルギーMap が Web 表示に追加されます。

**-Fig=\*\*\*** : TS 前後のエネルギーMap を記録した画像ファイル **TSnenp.\*\*\*** のファイル種別\*\*\* の指定で、デフォルトは **png** です。通常は **png** なので、**-Fig=\*\*\*** は、省略してかまいません。

**-figSize=\*\*\*** : TS 及び前後の構造の立体画像表示の画面のサイズを指定します。デフォルトで 200 になっています。デフォルトから変更したいとき、**-figSize=\*\*\*** の \*\*\* の部分に、大きくしたいときは 200 以上を、小さくしたいときは 200 以下の数字を入れます。

### 4.4.4 生成するファイルとその利用

- ・ **TSnb.HTM** : 各 TS の情報を 1 つの Web 画面として表示するためのファイルです。
- ・ **GDSP\_out.HTM** : EQ リスト中の TS 部分に **TSnb.HTM** を表示するリンクが追加されます。

- ・ **GDSP\_out\_0.HTM** : TsDisp の作業をやり直すときのための back up ファイルです。

TsDisp は、GRRM-GDSP の機能を増強するものですので、TsDisp の出力ファイルを GRRM-GDSP の出力ファイル群と合わせて利用します。新し **GDSP\_out.HTM** には、機能が追加されていますので、古いものを上書きして問題ありません。

#### 4.4.5 TS 前後の画像表示とエネルギーMap

GRRM-GDSP の Web 表示の左側の欄にある EQ のリスト中で、「**CONNECTIONS:**」に続いて表示されている  $\circ TS_n$ (エネルギー値)の直後の「空白とエネルギー値の前の(」 = 「(」をクリックすると、現在表示中のブラウザが新しいページに変り、 $TS_n$  の前後の構造とアニメーションが立体画像で表示された画面になります。

エネルギーMap の画像ファイル **TSnenp.png** が存在していれば、 $TS_n$  前後の画像表示の下に、 $TS_n$  前後のエネルギーMap (図中の表示は「**Energy Profile**」) が表示されます。 $TS_n$  の両側の構造は、上の画像表示と下のエネルギーMap で左右が逆になっていることがあるので注意してください。これは、上の画像表示での立体画像の順序は、どの EQ のリストであるかに依存しますが、**TSnenp.png** のファイルは順序によらず  $TS_n$  に対して 1つだけ作成されるためです。

グラフの中ほどの縦線は TS の位置を示しています。グラフの点は、GRRM 探索で IRC の追跡を行った点で、そのエネルギー値を含むスプライン補間で曲線が描かれています。

エネルギーの大きさは、エネルギーMap の左側に Hartree 単位の値が目盛ってあり、右側にエネルギーの低い方を 0 とした相対エネルギーが kJ/mol 単位で目盛ってあります。エネルギーMap の作成に用いた計算機でフォントが正しく利用できなかった場合には、図の中の文字が欠落していることがあるので注意が必要です。その場合、GRRM-GDSP によって **TSnenp.dat** と **TSnenp.gp** が生成しているはずですので、フォントが正しく利用できる環境にこれらのファイルをコピーして **gnuplot** を起動する (コマンドラインに、次のコマンドを投入する)

**gnuplot TSnenp.gp**

ことにより、フォントが正しく表示された **TSnenp.png** を作成することができます。

**TSnb.HTM** に TS エネルギーMap の表示部分が書き込まれないと、TS エネルギーMap は表示されません。TS エネルギーMap の画像ファイルが.png 以外で作成された場合にも、**TSnb.HTM** がそれに適合していないと、TS エネルギーMap が表示できないことがあります。その場合は、**TsDisp.pl** を起動し直すか手作業で、**TSnb.HTM** を作り直す必要があります。

#### 4.4.6 カスタマイズ

**TSnb.HTM** で表示される Web 画面のレイアウトや画像のサイズなどを、**TSnb.HTM** の作成前に変更したいときは、**TsDisp.pl** のソースプログラムを変更します。

### Default Setting ### および ### OUTPUT 作成用ひな形文字列 ### というコメントの下に、  
TSnb.HTM を作成するための「デフォルト設定」と「ひな形文字列の定義」があります。perl の  
知識と HTML の知識が必要ですが、注意深く調べると、TSnb.HTM の Web 表示画面をカスタマイ  
ズすることができます。

既に作成済みの個々の TSnb.HTM について、立体画像のサイズや背景色の変更は、3.1 に示した  
やり方で変更することができます。

**GRRM-GDSP著作権**

This is GRRM-GDSP produced by Koichi OHNO

---

Copyright (c) 2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2017 GRRM-GDSP all Files listed below.

All rights reserved.

List of GRRM-GDSP files

---

GRRM_GDSP.pl	GRRM-GDSP 実行ファイル本体
formDC.exe	解離経路解析用補助プログラム
grtMap.pl	反応経路網 Map 作成プログラム
TsDisp.pl	TS 前後表示作成プログラム
TS_enp.txt	TS エネルギーMap 作成補助ファイル
GDSP.HTM	Web 表示起動ファイル
GDSP_0.HTM	Web 表示リストひな形ファイル
GDSP_out.HTM	Web 表示リスト初期画面ファイル
XXn_0.HTM	構造表示ひな形ファイル
XXna_0.HTM	動画表示ひな形ファイル
0_0.HTM	空表示ファイル

---

## &lt;GRRM-GDSP プログラム利用上の制限&gt;

GRRM-GDSP は、大野公一の著作物(2009-2017)です。

2017 年 6 月 1 日以降、GRRM プログラムユーザに対し、以下の制限事項に同意される場合に限り、利用を許可します。

- ・著作者に無断で、GRRM-GDSP の上記ファイル群および GRRM-GDSP user manual を、複写、もしくは、全部または一部を修正、改変して、第 3 者に譲渡、販売、貸与、使用許諾することを禁止します。
- ・リバースエンジニアリング等による解析を禁止します。
- ・日本国内においてのみ使用することができます。
- ・著作者に無断で、GRRM-GDSP の上記ファイル群もしくはその一部を、他のソフトウェアに組み込んで利用者自身以外の使用に供することを禁止します。
- ・GRRM-GDSP の利用によってどのような損害が生じても利用者自身の責任とします。