

Windows 用 VENUS システムの手引き

物質・材料研究機構 物質研究所

泉 富士夫

E-mail: IZUMI.Fujio@nims.go.jp

1. VENUS を動かすのに要する条件

CPU: MMX Pentium 233 MHz 以上

メモリー: 64 MB 以上

ビデオメモリー: 16 MB 以上を推奨 (16 MB 未満でも動くが, 遅くなる)

ビデオカード: OpenGL 加速機構つきカードを推奨 (必須ではないが, 迅速・快適な GUI 操作とグラフィック処理には欠かせない)

オペレーティング・システム: Microsoft Windows 98/Me/NT/2000/XP (NT/2000/XP を推奨)

2. インストール

tbz (= .tar.bz2) 形式対応のアーカイバをあらかじめ入手しておく。改行コードや拡張子に関する無用のトラブルを防ぐため、必ず Windows 機上で解凍する。どのような無料アーカイバが配布されているかについては、

http://homepage.mac.com/fujioizumi/rietan/angle_dispersive/angle_dispersive.html#Archive_utilities

を参照するとよい。設定が簡単で、圧縮もでき、使い勝手のよいアーカイバとして「+Lhaca デラックス版」(<http://www.au.wakwak.com/~app/Lhaca/>) を推奨する。

配布圧縮ファイル VENUS.tbz, Examples.tbz, PRIMA.tbz を tbz 形式対応のアーカイバで解凍すると、それぞれ VENUS, Examples, PRIMA というフォルダが得られる。以下、Examples と PRIMA フォルダを VENUS フォルダ中に移したものと話を進める。

VENUS フォルダは、どこに置いても差し支えない（通常は C:\Program Files フォルダに置く）。ただし、VENUS の入出力ファイルを非常に深い階層の下に置いた結果、絶対パス+ファイル名が 256 を越してしまうと、それらのファイルの読み書きが不可能となる。仮名漢字は半角英数字 2 文字文に相当するので、実質的に長くなりがちなことに注意すること（フォルダ名は英数字だけにすることを推奨する）。

VENUS (Visualization of **E**lectron/**N**uclear densities and **S**tructures) システムは 3 本の独立なプログラム、

- 1) VEND (Visualization of **E**lectron and **N**uclear **D**ensities)
- 2) VICS (**V**isualization of **C**rystal **S**tructures)
- 3) PRIMA (**P**ractice **I**terative **M**EM **A**nalysis)

からなる。すなわち VEND は電子・核密度を、VICS は結晶構造を扱う。高速 MEM 解析プログラム PRIMA は観測構造因子から最大エントロピー法で 3 次元電子・原子核密度を計算するプログラムであり、ここでは触れない。

実行形式プログラム VEND.exe と VICS.exe は VENUS\Programs に置かれている。両プログラムとも Microsoft Visual C++ (Microsoft Visual Studio 6.0 Service Pack 5) により Windows 2000 上でコンパイル・リンクした。

全ソースプログラムとライブラリー (glut, glui, JPEG, JasPer : 実行形式ファイルに静的にリンクされる) は VENUS¥Source_code 内のフォルダ VEND, VICS, VC98 に収納されている. ソースプログラムを変更したり, 再コンパイル・リンクしたいという方々のための説明書は付属していないことをご承知願いたい. ただし, VENUS の開発を支援してくださる方々の質問や問い合わせには積極的に応じる所存である.

ユーザー環境変数 VENUS に VENUS¥Programs フォルダの絶対パスを与えれば, 種々の入力ファイル (*.vcs, *.cif, *.ins, *.pdb, *.den, *.rho など, デフォルトの拡張子つきファイル) を VICS.exe あるいは VEND.exe に直接ドラッグ&ドロップできるようになる. Open ダイアログボックスを使わずに済むので便利である.

環境変数 VENUS は, たとえば C:¥Program Files¥VENUS¥Programs¥ (VENUS フォルダを C:¥Program Files¥に置いた場合) というようにドライブ名つきで定義する. 最後の¥を絶対忘れてはならない. Windows NT/2000/XP の場合, 環境変数はシステムというコントロールパネルにおいて設定する. Windows 98/Me の場合, Windows がインストールされているドライブのルートに置かれている AUTOEXEC.BAT をエディターで開き, たとえば

```
SET VENUS=C:¥Programs Files¥VENUS¥Programs¥
```

というような行を追加する.

VENUS¥Programs フォルダ中のダイナミックリンクライブラリ glut32.dll は C:¥Windows¥system32 (Windows 98/Me/XP), C:¥WINNT¥system32 (Windows 2000) あるいは C:¥WINNT40¥system32 (Windows NT) に移してもよい. これらのフォルダに別な glut32.dll が入っていると, 障害が発生する恐れがあるので, 取り除いておくこと. なお, この最新版 glut32.dll (v3.7.6, 2001 年 11 月 8 日リリース) は次のサイトからダウンロードした:

<http://www.xmission.com/~nate/glut.html>

各種入力ファイルの例は VENUS¥Examples 以下のフォルダに多数収録されている. VEND と VICS の Open ダイアログボックスでファイルの種類 (拡張子) を所望のファイル用に設定するのを忘れないこと.

VENUS¥contrd フォルダには DV-X α 法プログラム DVSCAT の作成するバイナリーフ

ファイル f09 と f39 を電子密度，静電ポテンシャル，波動関数の三次元データを収めたテキストファイルに変換するユーティリティー `contrd` が収納されている．波動関数のスピンの向きを指定することもできる．詳しい使用法については，上記フォルダ中のテキストファイル `readme_contrd.txt` を参照されたい．`contrd` は大阪大学の水野正隆氏に作成していただいた．

手間を省くために現時点では配布を控えているが，VENUS は Linux 上でも動く．Red Hat Linux 7.3 (IBM-PC) と Vine Linux 2.5CR (Power Macintosh G4) 上での動作を確認済みである．

3. 一般的注意

3.1 ハードウェア

VEND と VICS は AGP あるいは PCI 拡張スロットに OpenGL 加速機構付きの GPU を搭載したビデオカードを装着したパソコン上で走らせることを前提としている。ソフトウェアでなくハードウェアで OpenGL API に対応しないと、3D グラフィックや GUI の動作が緩慢となると同時に、グラフィックデータファイル保存の速度が大幅に低下してしまう。高性能のビデオカードが数万円で購入できるので、ぜひ装着していただきたい。

OpenGL 加速機構のないビデオカードやビデオチップ（マザーボードに直付けされたもの）を使用している場合、VEND と VICS を走らせると、Output ウィンドウに

Video configuration: GDI Generic

というように表示される。こういう非力なビデオカードを使わざるを得ない場合、グラフィックを表示しているウィンドウをできるだけ小さくすれば、オブジェクトの動きが目立って速くなる。

たとえば、OpenGL API 対応の GPU である NVIDIA の GeForce4 460 Go を装着したノート型パソコン DynaBook G6/U22PDEW の場合、

Video Configuration: GeForce4 460 Go/AGP/SSE2

と表示される。

ビデオカードによっては、ドライバーのバグやマザーボードとの相性の悪さなどのためにオブジェクトが正常に表示されないことがある。そういう場合は、最新のドライバーがインストールされているかどうかチェックするとともに、他のマシンで VICS あるいは VEND を動かしてみてもほしい。また、Windows が最新のサービスパックで更新されているか否かもチェックしていただきたい。

残念ながら、ドライバーの OpenGL API 関係の部分にバグがあるのは珍しくない。ドライバーは OS ごとに供給されるため、特定の OS とドライバーの組み合わせだと動かないというようなこともありうる。信頼性の高いビデオカードとドライバーを販売することで定評のある会社の製品を購入することが望ましい。

3.2 ソフトウェア

Windows 機用マウスには、左右のボタンがある。以下の記述において、「(ボタン/マウスを) クリックする」は「(ボタン/マウスを) 左クリックする」, 「マウスボタンを押す」は「マウスの左ボタンを押す」を意味するものと約束する。イタリック文字はいくつかのボタンや入力・選択項目の集合 (パネル) に対するタイトル, [] はボタン, " " はラジオボタンあるいはチェックボックス, { } は入力・選択項目, < > はキーボード上のキーを指す。

ラジオボタン (円の中の黒点でチェックを表す) やチェックボックスそのものをクリックする代わりに、それらに続く文字のところをクリックしてもよろしい。OpenGL 非対応のビデオカードを使用していると, { } に相当する入力で数値入力後に<Enter> を押し、その数値を確定しなければならない場合がある。

各ウィンドウ, Menu バー, Dialog バーの右上隅の「閉じる」ボタン[X]をクリックすると、プログラムがいきなり終了してしまい、それまでに入力したデータはすべて失われる。これは glut の仕様であり、今のところ fail safe のための妙案は見つっていない。ダイアログボックスなどは[OK]や[Cancel]をクリックして閉じ、Menu バー内の[Exit]をクリックしてプログラムを終了するよう習慣づけていただくしかない。

TIFF や JPEG のようなグラフィックデータファイルを保存中にキーボードやマウスを使うと、グラフィックデータの一部が破損することがある。ファイルへの出力が完全に終わるまでじっくり待てば大丈夫である。このような障害はビデオカードのドライバーのバグに起因すると思われる。

Windows 版を使用する場合、"チューチューマウス"というマウス・ユーティリティ (シェアウェア) がインストールされていると、カーソルがグラフィックスウィンドウ上で瞬きしたり、GUI がスムーズに動かなくなったりするという障害が発生する恐れがある。明らかに VENUS とは相性が悪いので、削除するようお願いする。

4. 電子・原子核密度可視化プログラム VEND の操作例

- 1) VEND.exe をダブルクリックし起動する.
- 2) 電子・原子核密度のグラフィックを表示するウィンドウ Graphics (以下, Graphics ウィンドウと呼ぶ) の背後の Output ウィンドウ (タイトル: VEND) は, サイズを変えた後, 別な見やすい位置に移しておく. Output ウィンドウのタイトルバー上で右クリックし, プロパティを選び, ウィンドウの位置とサイズを指定すれば, それらが記憶される. Output ウィンドウには様々な重要な情報が出力されるので, 常に見えるようにしておくこと. **なにかトラブルが起きたときは, 必ず Output Window を参照するよう心がけてほしい.**
- 3) Graphics ウィンドウをあらかじめ適当なサイズに調節しておく. もちろん, 密度分布作画後に調節してもよい. その場合は, 相似の図が得られる. Graphics ウィンドウの最下部をインフォバーと呼ぶ. インフォバーには, どの操作ボタンが押されたかがリアルタイム表示されるとともに, 原子間距離, 結合角, ねじれ角の計算結果も出力される.
- 4) VEND: Menu ウィンドウ中の[Open]をクリックして Open ダイアログボックスを開き, {Format} で 'WIEN2k (*.rho)' を選び, [Browse...] をクリックする. VENUS¥Examples¥VEND¥WIEN2k¥MgB2.rho というファイルを選択し, [開く]をクリックする. しばらく待つと, MgB₂ の単位胞, 等電子密度面 ($1/\text{\AA}^3$), 単位胞での断面が Graphics ウィンドウに表示される.
- 5) Manipulations 中の[Magnify]をクリックし, Graphics ウィンドウ内でマウスボタンを押しながら上 (拡大) あるいは下 (縮小) にドラッグして図の大きさを調節する.
- 6) Properties ロールアウトをクリックし, 引き続き[Isosurfaces]をクリックすると, Isosurfaces ダイアログボックスが現れる. 適当な場所に移す.
- 7) {Isosurface level} を 0.7, {f(section)} を 0.01 とする. Rainbow 表示では断面が青 (0 %) から赤 (100 %) まで連続的に色が変化するが, f(section)を設定すると, 最大密度 \times f(section)以上の電子密度の部分はフルスケールに達しているとみなされ, 赤くなる.
- 8) [Apply]をクリックし, 前のステップで設定した値に基づき, 図を描き直す.
- 9) Manipulations 中の[Rotate]をクリックする. 'Drag (Free rotation)'モードとなっている. Graphics ウィンドウ上でマウスボタンを押しながらドラッグして単位胞をいろいろな向きに回転させてみる. Isosurfaces ダイアログボックス中の[OK]をクリックし, 当該ダイアログボックスを閉じる.
- 10) [Slices]をクリックし, Slices ダイアログボックスを開く. 適当な場所に移す.
- 11) {Scale factor for isosurface level} を 0.0 (全平面を描く), {Scale factor for f(section)} を

0.01 とし，{Shift}を 0.5 に設定してから Shortcuts で[(001)]をクリックすると，ホウ素原子が B-B 共有結合を通じてネットワークを形成している $z = 0.5$ 面上の電子密度分布が表示される。

12) Graphics ウィンドウ上でマウスボタンを押したままドラッグし，単位胞をいろいろな向きに回転させマウスを動かすスピードに応じて回転速度が変わる。

13) Graphics ウィンドウの右上，右から 2 番目の最大化・最小化ボタンをクリックし，全画面表示とする。この画面でもオブジェクトを自由に回転させることができる。迫力ある画像を十分楽しんだ後，もう一度，同じボタンをクリックして元のサイズに戻す。

14) [Clear]をクリックし， $z = 0.5$ 面を消す。[OK]をクリックし，Slices ダイアログボックスを閉じる。

15) VEND: Menu ウィンドウ内の[Exit]をクリックし，VEND.exe を終了する。

なお，VEND での操作記録を保存するためのスクリプト*.vnd を他のフォルダや他のマシンにコピーしたり移動したりしたときは，表示の対象となるファイルの名前が絶対パスつきで*.vnd の 2 行目に書かれているので，必要に応じてこの行を書き直さねばならない。

5. 結晶構造可視化プログラム VICS の操作例

- 1) VICS.exe をダブルクリックし起動する。
- 2) 結晶構造のグラフィックを表示する Graphics というウィンドウ（以下、Graphics ウィンドウと呼ぶ）の背後の Output ウィンドウ（タイトル： VICS）は、サイズを変えた後、別な見やすい位置に移しておく。
- 3) Graphics ウィンドウをあらかじめ適当なサイズに調節しておく。もちろん、結晶構造作画後に調節してもよい。その場合は、相似の図が得られる。
- 4) VICS: Menu ウィンドウ中の[Open]をクリックして Open ダイアログボックスを開き、VENUS¥Examples¥VICS¥vcs¥Inorganic¥YBa2Cu4O8.vcs というファイルを選択し、[開く]をクリックする。Graphics ウィンドウに高温超伝導体 $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ 配位多面体模型が表示される。
- 5) Manipulations 中の[Magnify]をクリックする。Graphics ウィンドウ内でマウスボタンを押しながら上（拡大）あるいは下（縮小）にドラッグして図の大きさを調節する。
- 6) 必要なら Manipulations 中の[Translate]をクリックし、Graphics ウィンドウ上でマウスボタンを押しながらドラッグすることにより、適当な位置に図形を並進させる。
- 7) Properties ロールアウトをクリックし、[General]をクリックする。Light パネルで、{Ambient (%)}&{Diffuse (%)}の値を適当に変えて明るさやコントラストを調節し、[OK]をクリックする。
- 8) [Atoms]をクリックし、Parameters パネルで{Stacks}を 20、{Slices}を 20 程度とし、原子に対する分解能を変えてみる。この際には、数値入力枠の右側に位置する上下向きの三角のあたりで、マウスボタンを押しながら上下にドラッグすることにより、値を変えることもできる（他のパラメーターでも同様）。三角をクリックすると、値が一つだけ増減する。設定を終えたら、[OK]をクリックする。
- 9) Models で"Ball-and-stick", "Space-filling", "Polyhedra", "Wire-frame", "Stick"という順番にモデルを切り替え、Graphics ウィンドウ内の図がどのように変化するか、眺めてみる。最後に"Polyhedra"に戻す。
- 10) [Bonds]をクリックし、Bonds ダイアログボックスを開く。Parameters の{Radius (B&S), poly}を約 0.8 とする。Graphics ウィンドウ上で結合の直径がリアルタイムに変わるのを確認する。Bond style パネルで"Bicolor cylinder"をチェックし、各結合を 2 色とする。[OK]をクリックし、Bonds ダイアログボックスを閉じる。
- 11) [Polyhedra]をクリックすると、Polyhedra ダイアログボックスが現れる。[Polyhedral style]をクリックする。適当な表示形式を選択してから[OK]をクリックすることを繰

り返し、その都度、Graphics ウィンドウ中の配位多面体の形式が変化することを確認する。

12) 最後にもう一度[Polyhedral style]をクリックし、上側、右端の中心原子だけ表示するモードを選び、[OK]をクリックする。さらに[OK]をクリックして、Polyhedra ダイアログボックスを閉じる。

13) Manipulations 中の[Distance]をクリックする。引き続き、Graphics ウィンドウ上で、任意の 2 原子を続けてクリックすると、インフォバーに原子間距離が表示され、Output ウィンドウにさらに詳しい情報が出力される。原子の選択を解除するには、Graphics ウィンドウの背景部分でマウスをクリックする。

14) Manipulations 中の[Angle]をクリックする。引き続き、Graphics ウィンドウ上で、任意の 3 原子を続けてクリックすると、インフォバーに結合角が表示される。また Shift キーを押しながら、任意の 4 原子を続けてクリックすると、インフォバーにねじれ角 (tortion angle) が表示される。いずれの場合も、Output ウィンドウにさらに詳しい情報が出力される。原子の選択を解除するには、Graphics ウィンドウの背景部分でクリックする。

15) Manipulations 中の[Rotate]をクリックする。Drag (Free rotation)モードにおいて Graphics ウィンドウ上でマウスをドラッグし、図形を回転させてみる。

16) Graphics ウィンドウの右上、右から 2 番目の最大化・最小化ボタンをクリックし、全画面表示とする。この画面でもオブジェクトを自由に回転させることができる。迫力ある画像を十分楽しんだ後、もう一度、同じボタンをクリックして元のサイズに戻す。

17) Rotation modes 中の"Push"を選択し、Graphics ウィンドウ上でマウスボタンを押し、ドラッグしながらボタンを離すと、ドラッグした向きに図形が回転し続ける。回転速度はドラッグ速度に比例する。Graphics ウィンドウ上でマウスをクリックすると、回転が止まる。

18) Manipulations 中の[Select]をクリックし、<Shift>を押しながら、複数の原子をクリックして選択する。<Delete>を押すと、それらの原子が除去される。<Esc>を押すと、元に戻る。

19) VICS: Menu ウィンドウ中の[Exit]をクリックし、VICS.exe を終了する。

6. 美しい画像を得るためのノウハウ

原子の輪郭（円弧）がしばしばギザギザになっているのは，{Stacks}と{Slices}が小さすぎるためである(VICS マニュアル 4.2.3 参照)．単位胞や等高線の線が汚なかったり，途切れ途切れになっていたりするのは，それらの{Width}が適切でないことに起因する．全体的に分解能が低いように見える場合は，グラフィックデータファイルを export する際の{Scale}を大きくするべきである．

論文用の図や OHP シートを作成するためにグラフィックデータファイルを Export するときには，{Scale}を 10 に設定して高分解能（言い換えればピクセル数の多い巨大な）のイメージを出力しておき，それを Adobe Photoshop，Paint Shop Pro，GraphicConverter，IrfanView32 などの画像処理ソフトウェアで適当な大きさに縮小する．

たとえば Adobe Photoshop 7.0 を使用する場合は以下の通りである：

- 1) グラフィックデータファイルを Photoshop で読み込む．
- 2) イメージ → 画像解像度...
- 3) ドキュメントのサイズで幅あるいは高さを指定する．いずれか一方を指定すれば，他方は自動的に調節される．
- 4) 解像度を所望の値に設定する．インクジェット・カラープリンタで印刷する場合，300 dpi 程度，雑誌や書籍などの図は 300～400 dpi とするとよい．
- 5) 縦横比を固定，画像の再サンプルをチェックし，後者ではもっとも品質の高い画像が得られる補間方式であるバイキュービック法を選択する．
- 6) ファイル → 別名で保存...で適当な形式のファイルとして保存する．

グラフィック用ユーティリティーを使って縮小すると，単位胞を表す直線がシャープさを失うことがある．フォトレタッチソフト Photoshop，Photoshop Elements，Paint Shop Pro のバイキュービック補間法（bicubic interpolation method）は高画質という点で非常に優れている．