

# SOVA

Structural Order Visualization and Analysis

ユーザーマニュアル

2023年8月25日

東北大学 志賀元紀、森田秀利

## 目次

1. 概要 .....	2
1.1. 動作環境 .....	2
1.2. インストール .....	2
1.2.1. Windows 版 .....	2
1.2.2. MacOS 版 .....	3
2. アプリケーション画面 .....	3
2.1. 起動 .....	3
2.2. 画面説明 .....	4
2.2.1. 3D ビュー .....	4
2.2.2. ファイル操作タブ .....	5
2.2.3. 表示機能タブ .....	6
2.2.4. PDF 解析タブ .....	8
2.2.5. 編集 (Atoms) タブ .....	9
2.2.6. 編集 (Bonds) タブ .....	9
2.2.7. 編集 (多面体) タブ .....	10
2.2.8. リング解析タブ .....	12
2.2.9. キャビティ解析タブ .....	13
3. 操作方法 .....	14
3.1. ファイル操作 .....	14
3.2. 3D ビュー .....	15
3.3. 表示機能 .....	16
3.4. PDF 解析 .....	16
3.5. リング解析 .....	18
3.6. キャビティ解析 .....	19
3.7. グラフ比較 .....	20

## 1. 概要

SOVA (Structural Order Visualization and Analysis) は Reverse Monte Carlo (以下 RMC) 法で計算して得られた原子構造を 3D 表示し、得られた構造からさらに統計解析する GUI である。

### 1.1. 動作環境

動作環境を以下に示します。

項目	条件
OS	Windows 7, 8, 10, MacOS, Linux
Python	3.9

## 1.2. インストール

### 1.2.1. Windows 版

SOVA のインストーラー (SOVA.msi) 図 1-1 をクリックすると起動画面が現れて次へボタンで最終的にインストールされます。

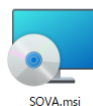


図 1-1 インストーラー

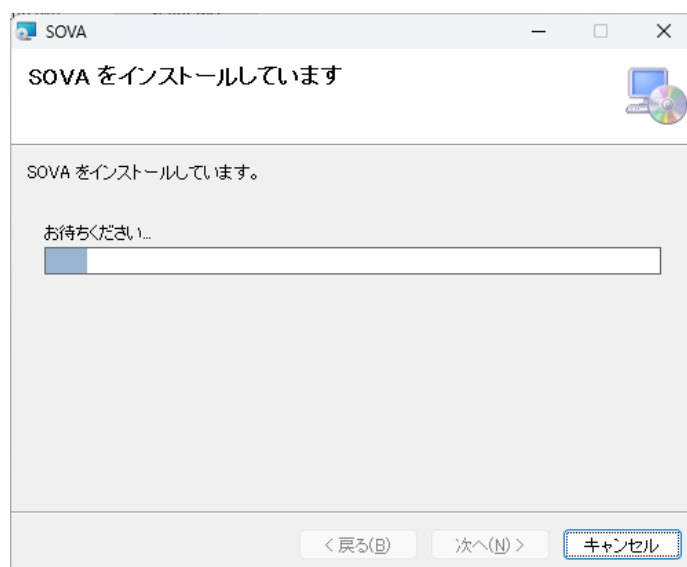


図 1-2 インストール画面

## 1.2.2. MacOS 版

SOVA.dmg ファイルをクリックすると以下のフォルダが現れる。左の SOVA.app ファイルを右の Application フォルダに移動すればインストールされる。

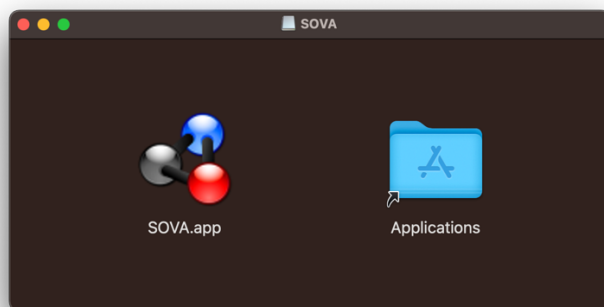


図 1-3 MacOS インストール画面

## 2. アプリケーション画面

### 2.1. 起動

起動はデスクトップアイコンをクリックするか、メニューから SOVA をクリックすると以下のような起動画面が現れます。

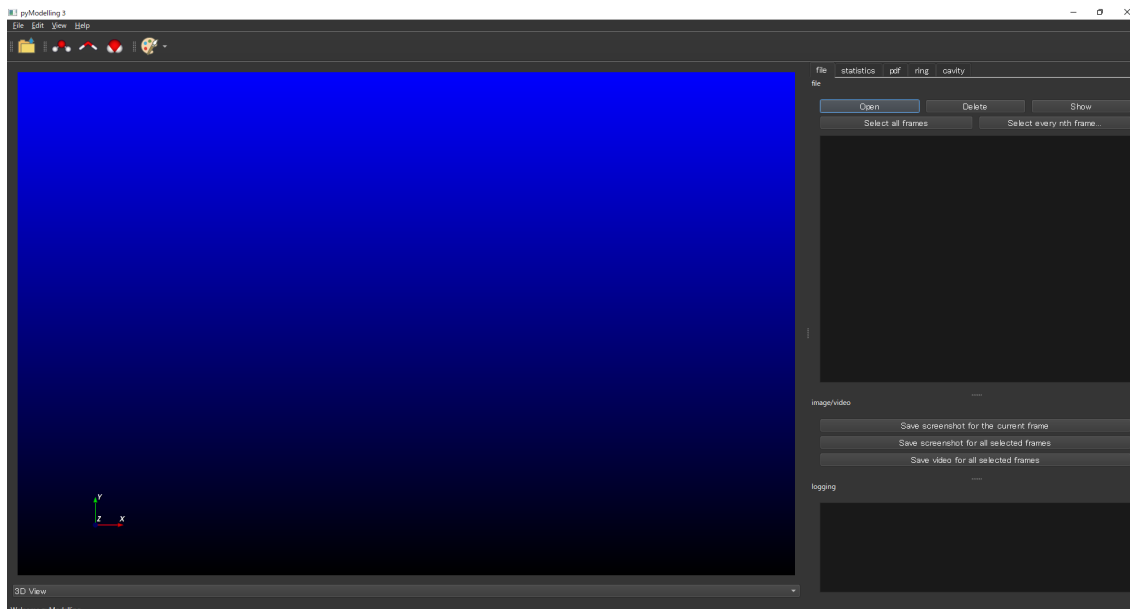


図 2-1 SOVA 起動画面

## 2.2. 画面説明

SOVA を起動したら図 2-2 の画面が表示される。各部分についての説明を以下に示した。

表 2-1 SOVA の画面説明

項目	説明
3D ビュー	この部分に各ファイルの原子座標に原子を表示する
メニューバー	3D 表示した原子表示を切り替え
各機能タブ	読み込んだ原子データから統計解析や編集を行ったりするタブ群。目的タブを選択して切り替えることができる
3D 画像保存	3D ビューで表示しているものを画像として保存する
ログ	各操作のログを表示する
グラフ表示	統計解析した結果をグラフ表示。コンボボックスで目的のグラフを切り替えることができる



図 2-2 画面説明

### 2.2.1. 3D ビュー

3D ビューにはファイルを読み込んだ後に原子が表示される。3D ビューに原子を表示した図を以下の図 2-3 に示した。

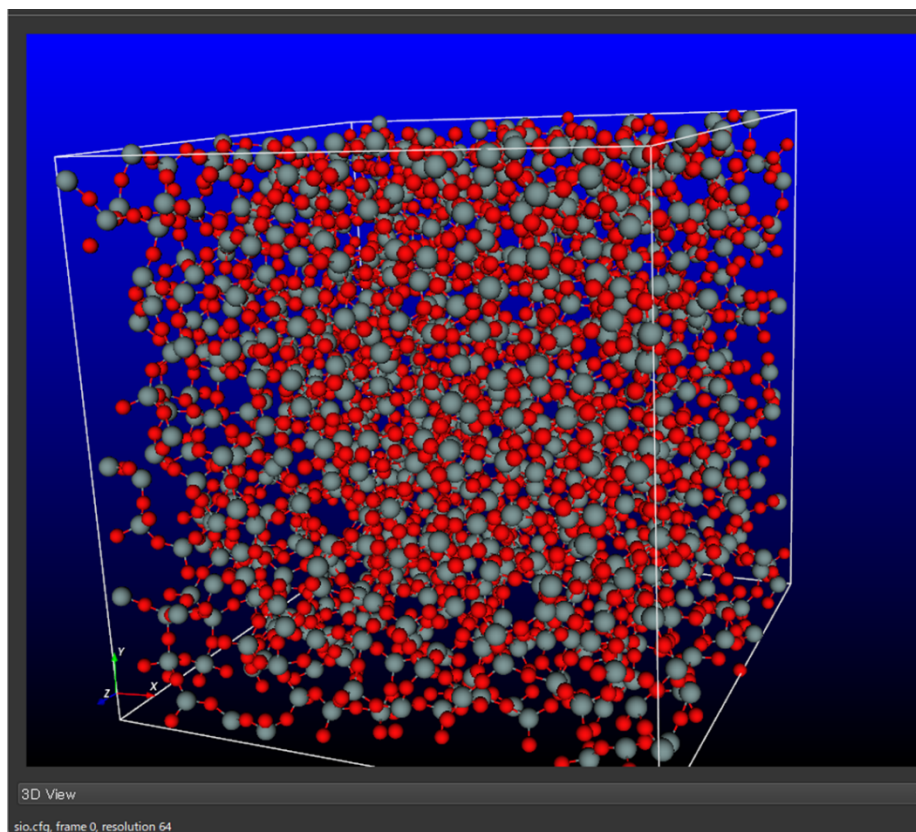

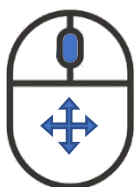
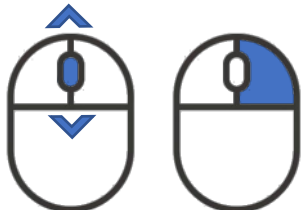


図 2-3 3D ビューでファイルを読み込んだところ

3D ビュー上でのマウス操作を以下に示した。

		
回転	移動	ズーム

### 2.2.2. ファイル操作タブ

データファイルを選択して、削除、表示などを管理するタブ。以下にタブ表示 (図 2-4) と機能の説明 (表 2-2) を示した。

表 2-2 ファイルタブ機能説明

項目	内容
----	----

ファイルリスト	読み込んだファイルのリスト
Open ボタン	ファイル選択。ファイル選択ダイアログが起動してファイルを選択する。選択したファイルはファイルリストにフリスト表示される
Delete ボタン	ファイルリストに表示されたデータを削除する。選択したいデータを選択してボタンを選択する
Show ボタン	ファイルリストで選択したデータを表示する。表示した場合表示されていたデータは消去される
Select all frames ボタン	時系列データ（フレームで管理）を選択する
Select every nth frame	時系列データから n 番目のデータを選択する



図 2-4 ファイルタブ画面

### 2.2.3. 表示機能タブ

表示機能 (view) タブでは 3D ビューで表示された原子に対して表示選択をする機能である。view タブ画面を以下の図 2-5 に示した。また機能内容を以下の表 2-3 に示した。

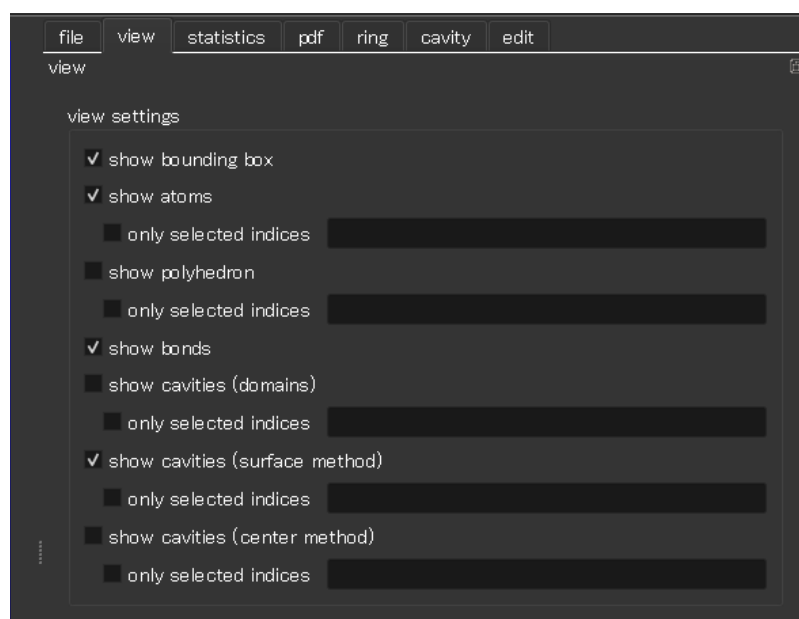


図 2-5 表示タブ画面

表 2-3 表示タブ機能説明

項目	内容
show bounding box	計算格子表示
show atoms	原子表示。個々の原子インデックスを only selected indeces テキストボックスに入力すると選択した原子を表示することが可能
show polyhedron	多面体表示。個々の多面体インデックスを only selected indeces テキストボックスに入力すると選択した多面体を表示することが可能
show bonds	結合表示
show cavities (domains)	domain キャビティ計算で得られたキャビティ表示。個々のキャビティインデックスを only selected indeces テキストボックスに入力すると選択したキャビティを表示することが可能
show cavities (surface method)	surface method で計算されたキャビティ計算で得られたキャビティ表示。個々のキャビティインデックスを only selected indeces テキストボックスに入力すると選択したキャビティを表示することが可能
show cavities (center method)	center method で計算されたキャビティ計算で得られたキャビティ表示。個々のキャビティインデックスを only



	selected indices テキストボックスに入力すると選択したキャビティを表示することが可能
--	----------------------------------------------------

#### 2.2.4. PDF 解析タブ

PDF タブでは PDF (Pair Distribution Function) 解析で得られたデータを表示するためのタブである。PDF 解析で得られたデータのリストをいかに示した。

- ・ partial  $g(r)$
- ・ partial  $S(Q)$
- ・ Neutron  $S(Q)$
- ・ Neutron  $g(r)$
- ・ X-ray  $S(Q)$
- ・  $G(r)$
- ・  $T(r)$
- ・  $N(r)$

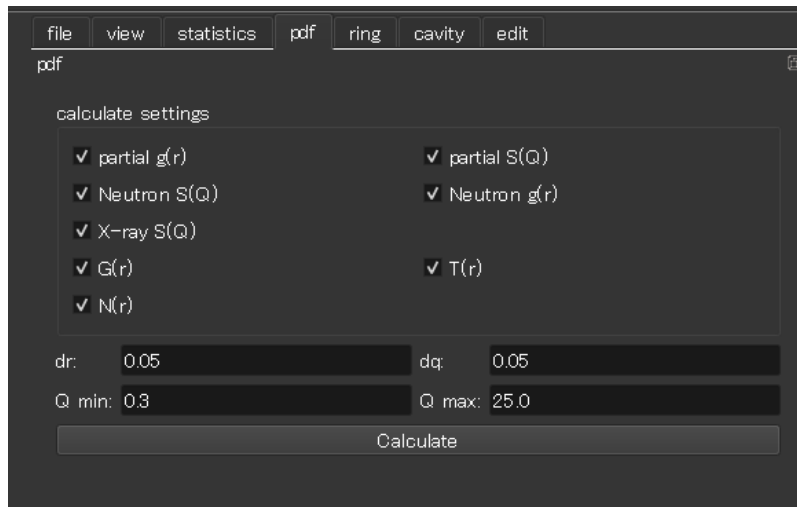


図 2-6 pdf タブ画面

表 2-4 pdf タブ機能説明

項目	内容
partial $g(r)$	部分 $g(r)$ の表示
partial $S(Q)$	部分 $S(Q)$ の表示
Neutron $S(Q)$	中性子 $S(Q)$ の表示
Neutron $g(r)$	中性子 $g(r)$ の表示
X-ray $S(Q)$	X 線 $S(Q)$ の表示

$G(r)$	$G(r)$ の表示
$T(r)$	$T(r)$ の表示
$N(r)$	$N(r)$ の表示
$dr$	$g(r)$ を求めるための $r$ 間隔
$dq$	$S(Q)$ を求めるための $q$ 間隔
$Q min$	$S(Q)$ を求めるための最小 $Q$
$Q max$	$S(Q)$ を求めるための最大 $Q$
Calculate	pdf 解析を実行する

### 2.2.5. 編集 (Atoms) タブ

編集タブでは原子の種類を変更できる。

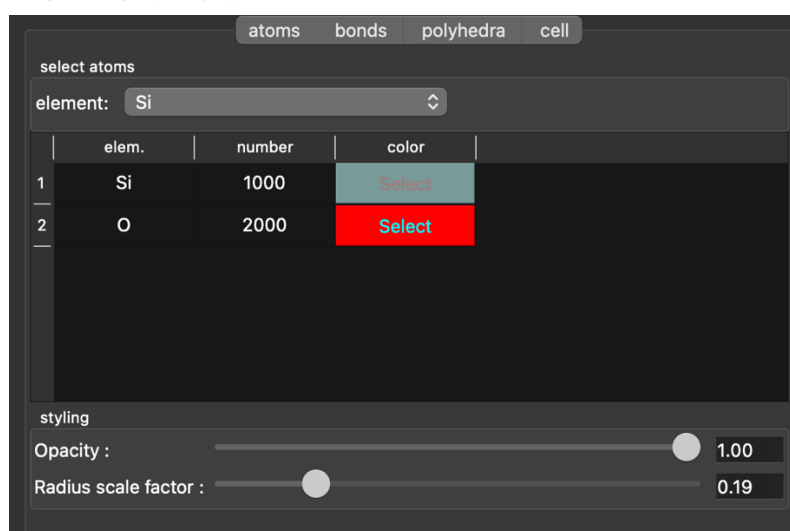


図 2-7 編集 (Atoms) タブ画面

表 2-5 編集 (Atoms) タブ機能説明

項目	内容
element	原子
table	原子一覧
Opacity	原子透明度
Radius scale factor	原子半径

### 2.2.6. 編集 (Bonds) タブ

編集タブでは原子、原子間結合などの編集を行う。以下の図 2-8 に示した。またタブ内の機能について表 2-6 に示した。

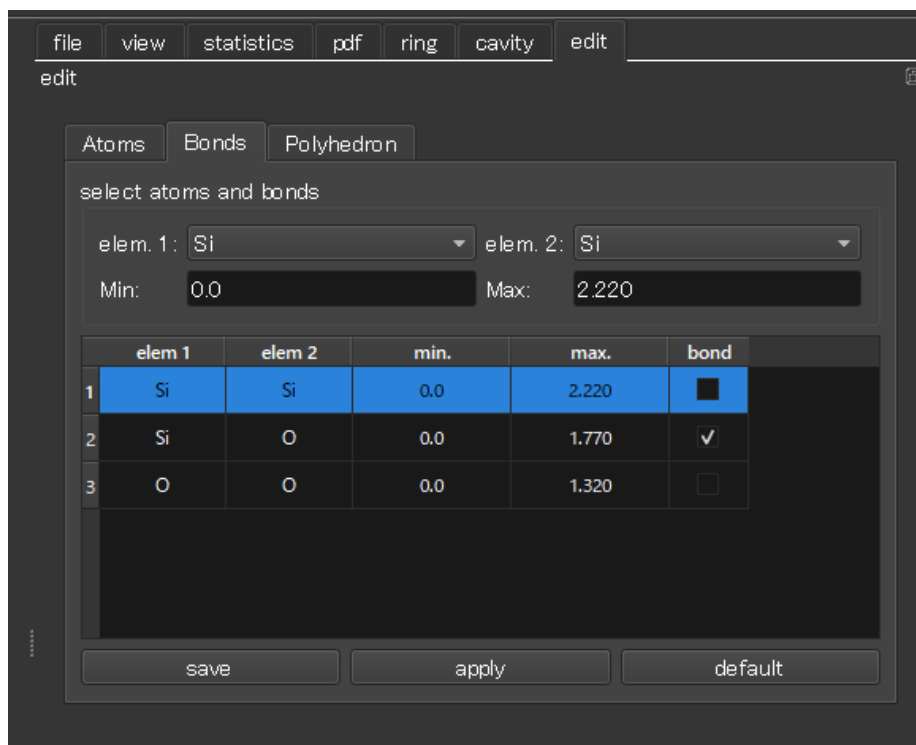


図 2-8 編集 (Bonds) タブ画面

表 2-6 編集 (Bonds) タブ機能説明

項目	内容
elem. 1	原子種 1 の選択
elem. 2	原子種 2 の選択
Min.	原子 1, 2 間の最小距離
Max.	原子 1, 2 間の最大距離
テーブル	原子間距離一覧、チェックボックスで結合有無の選択をする
save ボタン	条件を保存
apply ボタン	条件設定を反映
default ボタン	結合距離を共有結合データベースに設定する

### 2.2.7. 編集 (多面体) タブ

多面体表示タブでは中心原子と周りの原子を設定すると、周りの原子だけで構成される多面体をポリゴン表示で表示することができる。

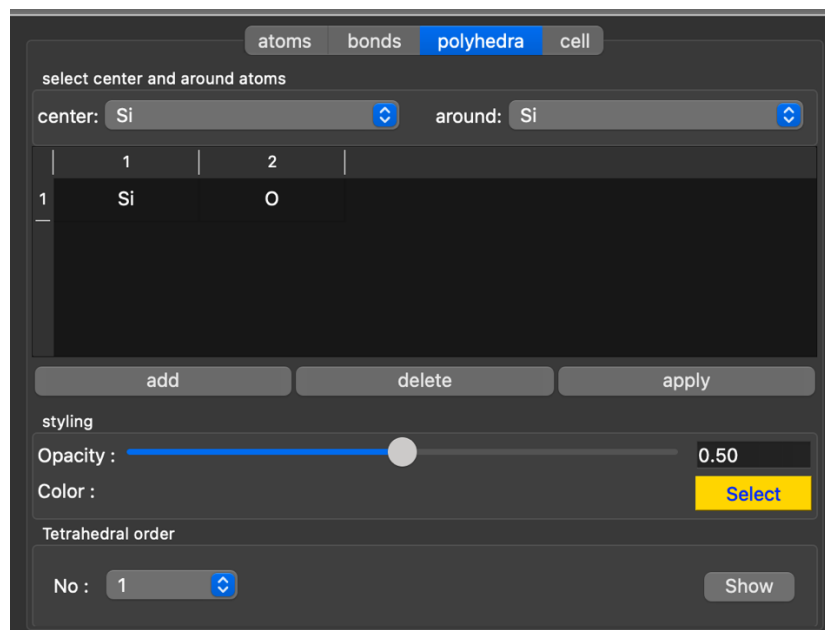


図 2-9 多面体表示タブ

表 2-7 編集（多面体）タブ機能説明

項目	内容
center	中心の選択
around	周りの原子
add	テーブルにペアを追加
delete	テーブルの原子ペアを選択して削除
apply	多面体を生成
Opacity	多面体の透明度
Color	多面体の色
Select	色選択
No.	多面体歪み統計計算テーブル No.
Show	多面体計算ダイアログ表示

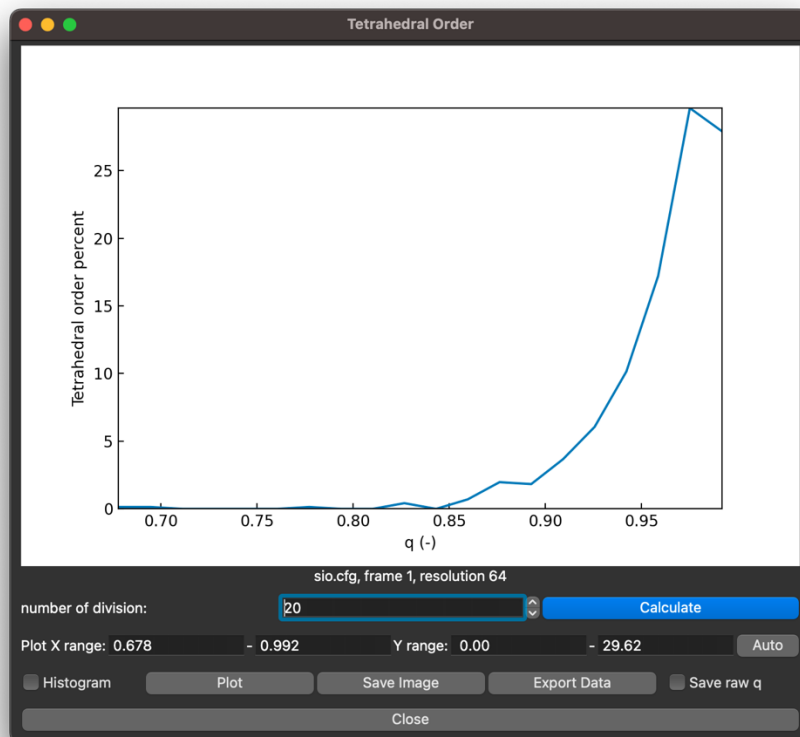


図 2-10 多面体解析ダイアログ

### 2.2.8. リング解析タブ

結合距離で設定された結合をもとに RING 解析を実行するタブである。以下の図 2-11 にタブ画面を示した。また機能一覧について表 2-8 に示した。

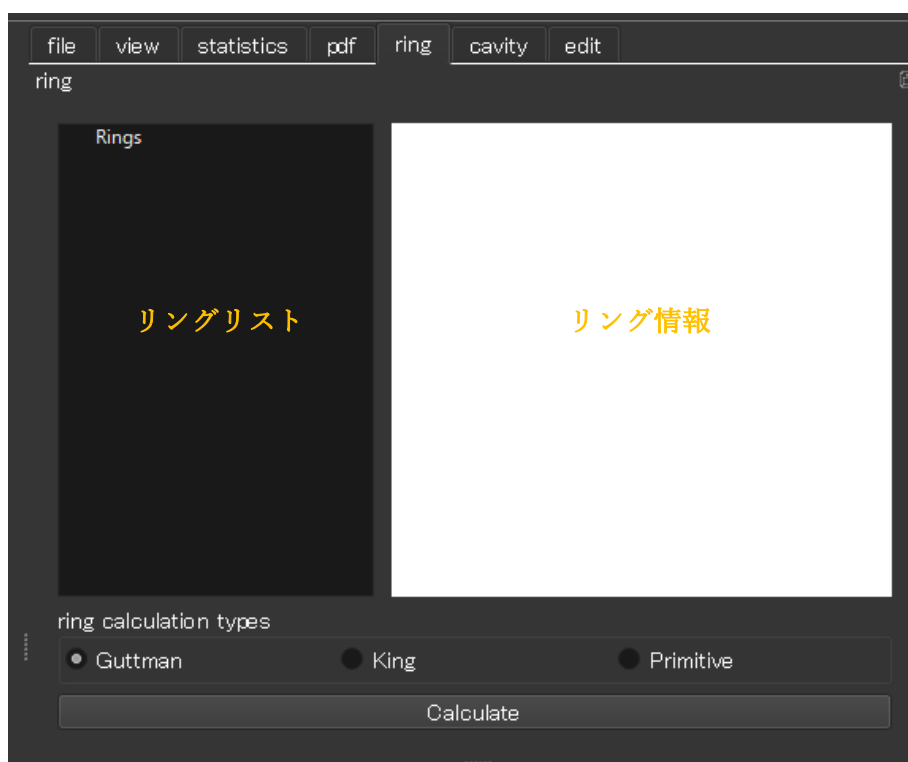


図 2-11 リングタブ画面

表 2-8 リングタブ機能説明

項目	内容
リングリスト	リングリスト。計算後ツリー状にリングが表示される
リング情報	リングリストで選択したリング情報が表示される
ring calculation types	リング計算の種類 (Guttman 法、King 法、Primitive 法) を選択
Calculate	計算実行

### 2.2.9. キャビティ解析タブ

キャビティ計算タブを以下の図 2-12 に示した。

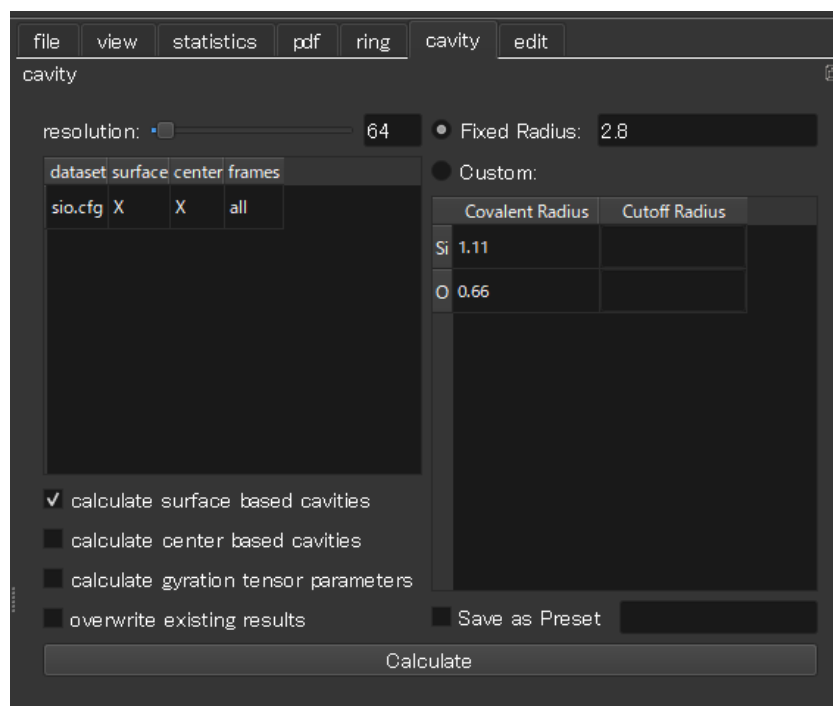


図 2-12 キャビティタブ画面

表 2-9 キャビティタブ機能説明

項目	内容
resolution	キャビティ計算のための解像度
database surface center frames	解析するファイル名
calculate surface based cavities	surface based で解析を実行する
calculate center based cavities	center based で解析を実行する
calculate gyration tensor parameters	回転テンソルを利用する
overwrite existing results	解析結果の上書き
Fixed radius	半径を固定して計算
Custom	各原子に対して半径を設定して計算
Calculate	計算実行

### 3. 操作方法

#### 3.1. ファイル操作

ファイルを読み込むにはメニューから[File]→[Open]を選択するか、File タブで Open ボタンを選択、またはツールバーでアイコンをクリックするとファイル選択ダイアログが表示される。RMC 解析後のデータ (\*.cfg ファイル) を選択し、OK ボタンを押すと 3D ビューに原子が 3D 表示される (図 3-1)。

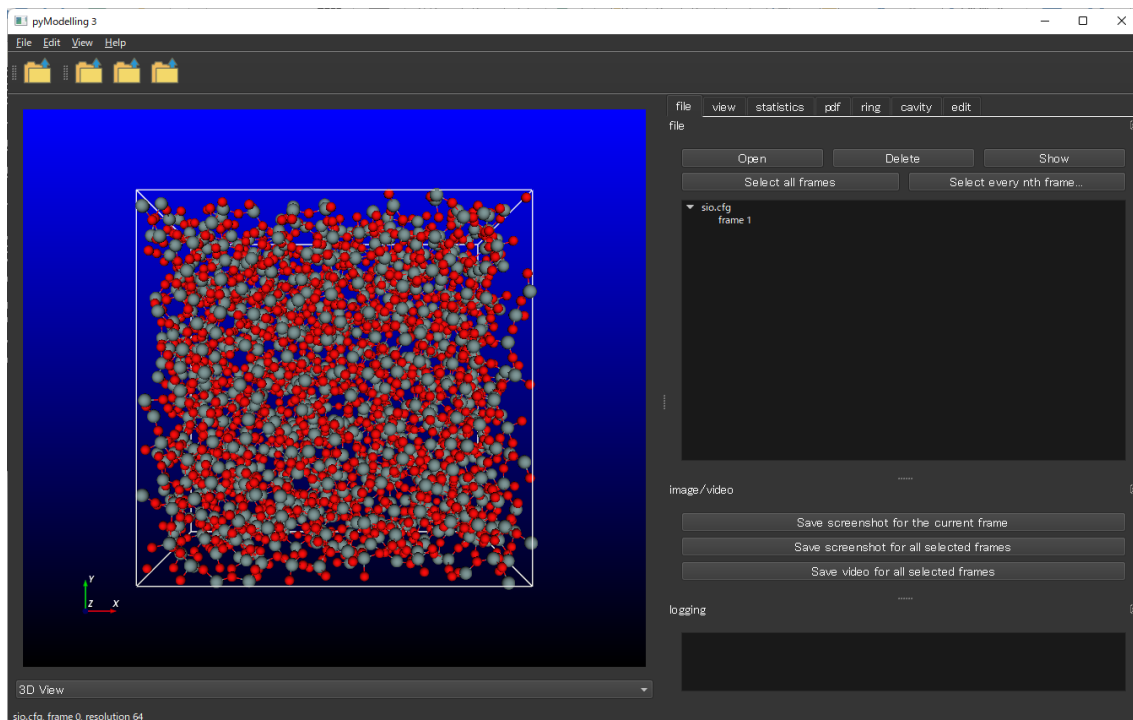


図 3-1 ファイル読み込み後画面

### 3.2. 3D ビュー

ファイルを読み込むと 3D ビューで表示されるが、マウスで回転、移動、ズームが可能である。操作方法は 2.2.1 を参照

原子の表示の種類は 3 種類ありそれぞれ Ball and Stick, Liquorice, Van der Waals 表示の 3 種類可能で上のツールバーで切り替えが可能である。



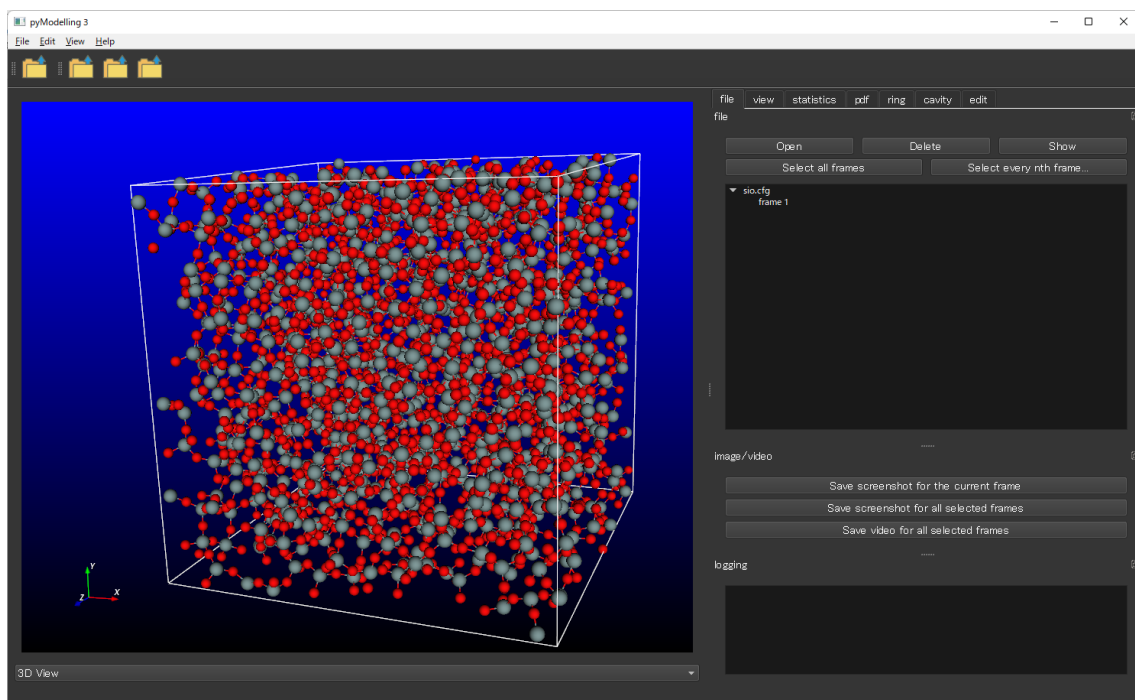


図 3-2 マウスで回転した画面

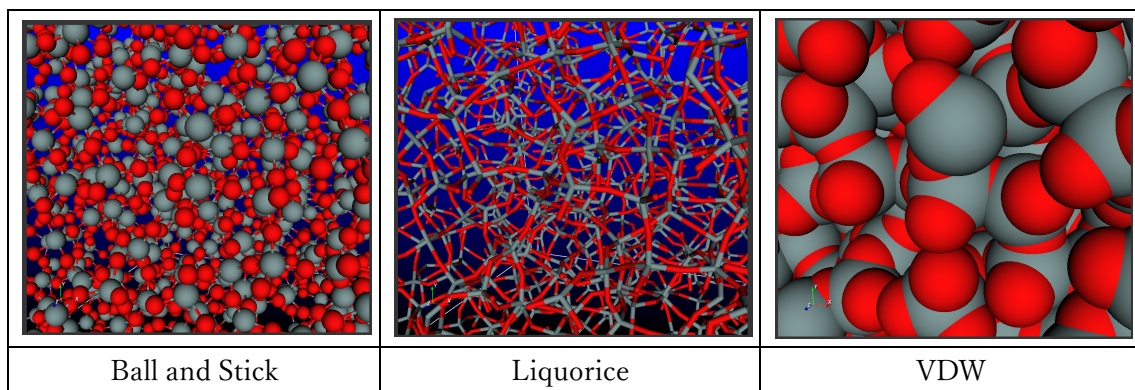


図 3-3 原子表示の種類

### 3.3. 表示機能

原子表示は3種類用意されている。それぞれ、1) Ball and Stick、2) Liquorice、3) VDW表示の3種類である。ツールバーのボタンで切り替えることができる

### 3.4. PDF 解析

PDF タブで計算後は GUI 下のコンボボックスで Pair Distribution Function に自動で切り替えられグラフが表示される。PDF タブでチェックしたデータ表示に対して上部のタブにて切り替えが可能になる。以下の図 3-4 には Partial  $g(r)$  が表示してある。

それぞれの機能に関して以下の表に示した。

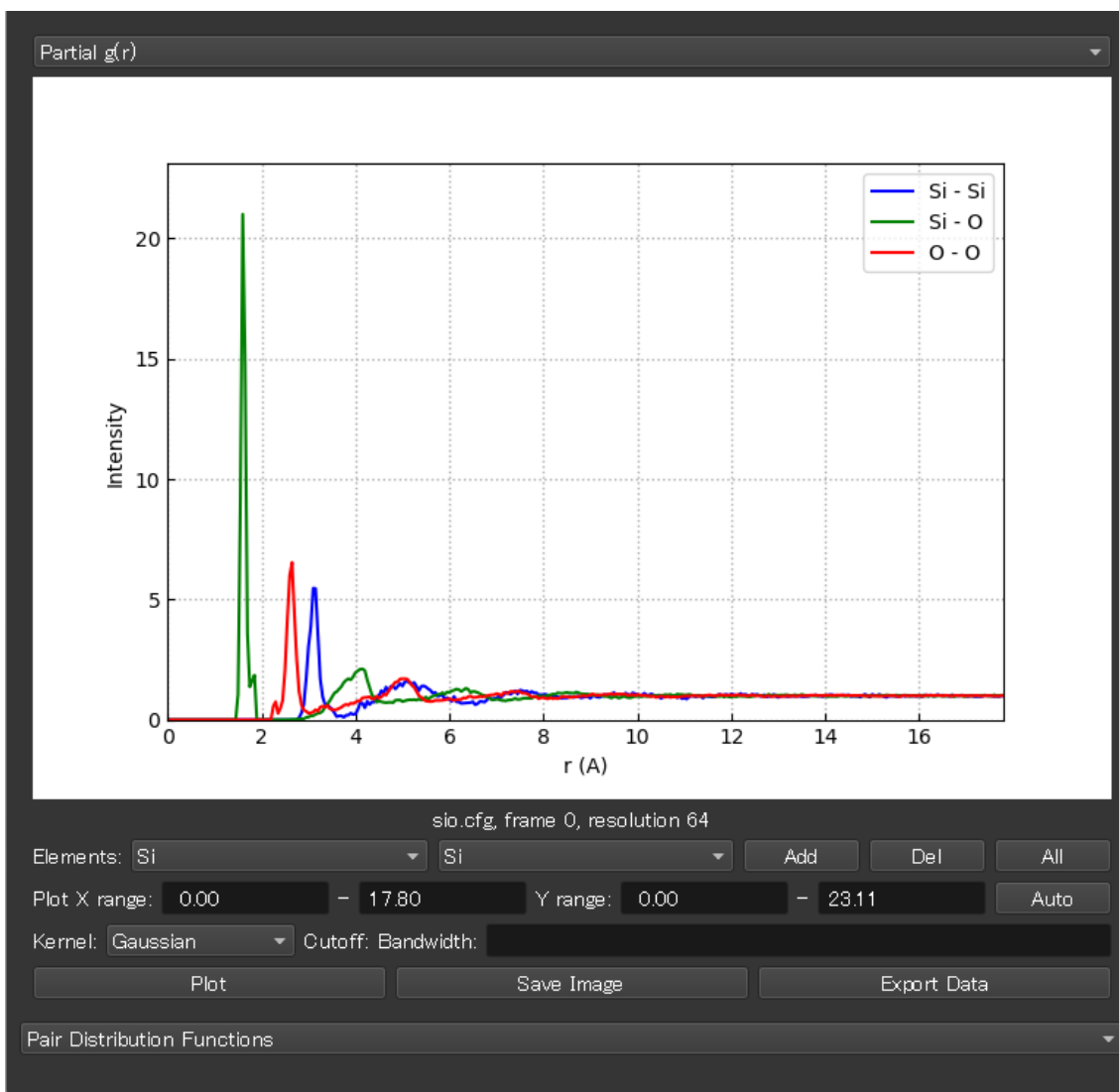


図 3-4 PDF 解析結果表示

表 3-1 PDF 解析結果表示機能説明

項目	内容
表示選択コンボボックス	表示したいデータの切り替え
Elements	表示する原子種ペア
Add ボタン	Elements ペアをグラフに追加
Del ボタン	Elements ペアをグラフから削除
All ボタン	Elements ペアをすべて表示
Kernel	グラフのカーネル関数にて変換
Plot ボタン	表示ボタン
Save Image ボタン	画像保存。ボタンを押すと保存先を聞かれるので保存先を選択

Export Data ボタン

CSV ファイルデータに保存。ボタンを押すと保存先を聞かれるので保存先を選択

### 3.5. リング解析

リングタブで Calculate ボタンを押すと以下のように計算進捗プログレスバーが表示される。

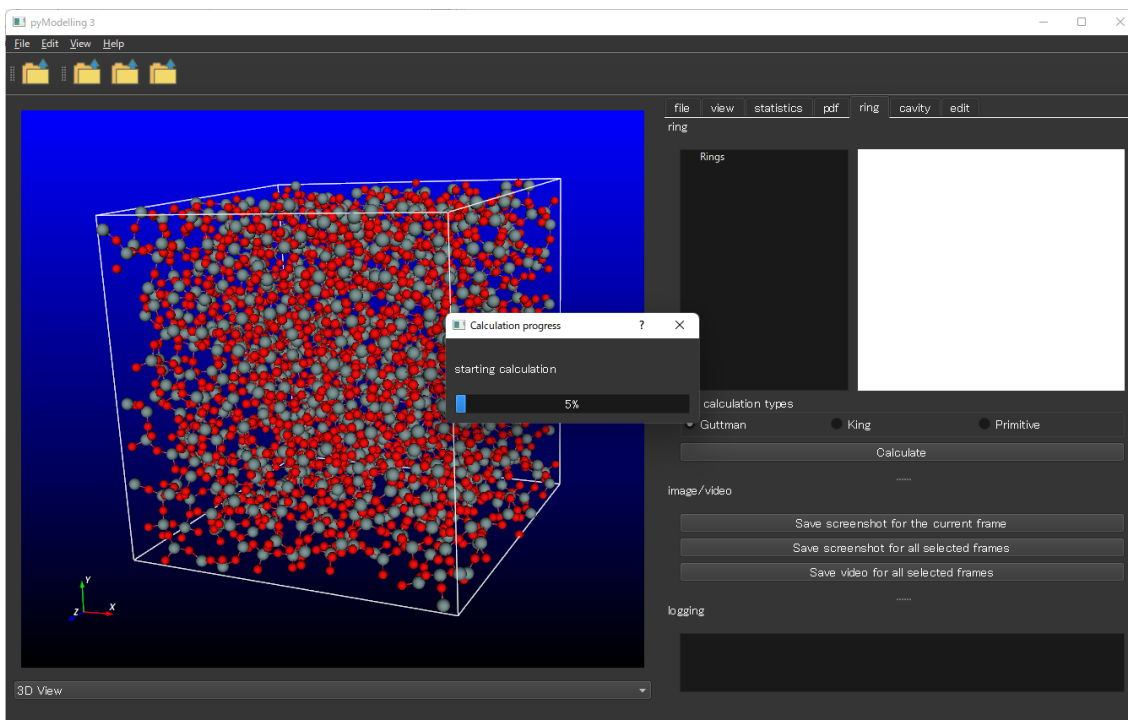


図 3-5 リング計算中の画面

計算終了後には図 3-6 のように ring タブのリングリストにリングの個数分だけツリー表示で表示される。表示されたリングを選択するとリスト右側にリングの情報が現れる。情報はリングを形成している原子番号の一覧が表示される。またリングを選択すると 3D ビューに選択したリングの位置が表示される。

下部のコンボボックスを「3D」から「Ring Histograms」に変更するとリングのヒストグラムが表示される（図 3-7）。Plot ボタンを選択すると表示される。リング数を表示しないようにするには「Show Number」のチェックを外し Plot ボタンを再度押すと表示されなくなる。

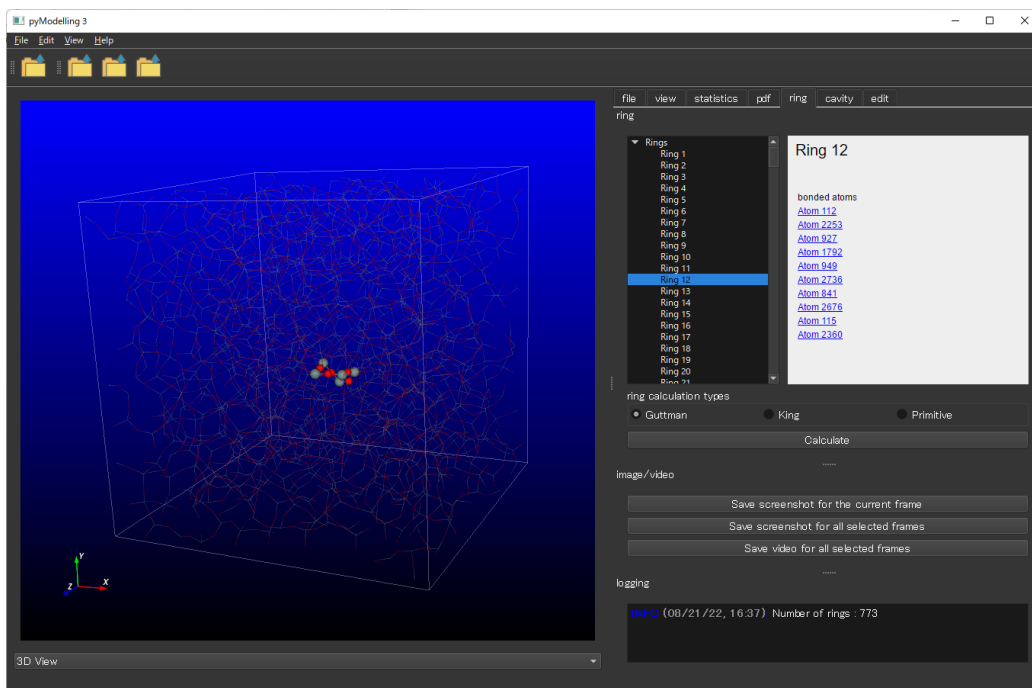


図 3-6 リング計算後の画面

下部の

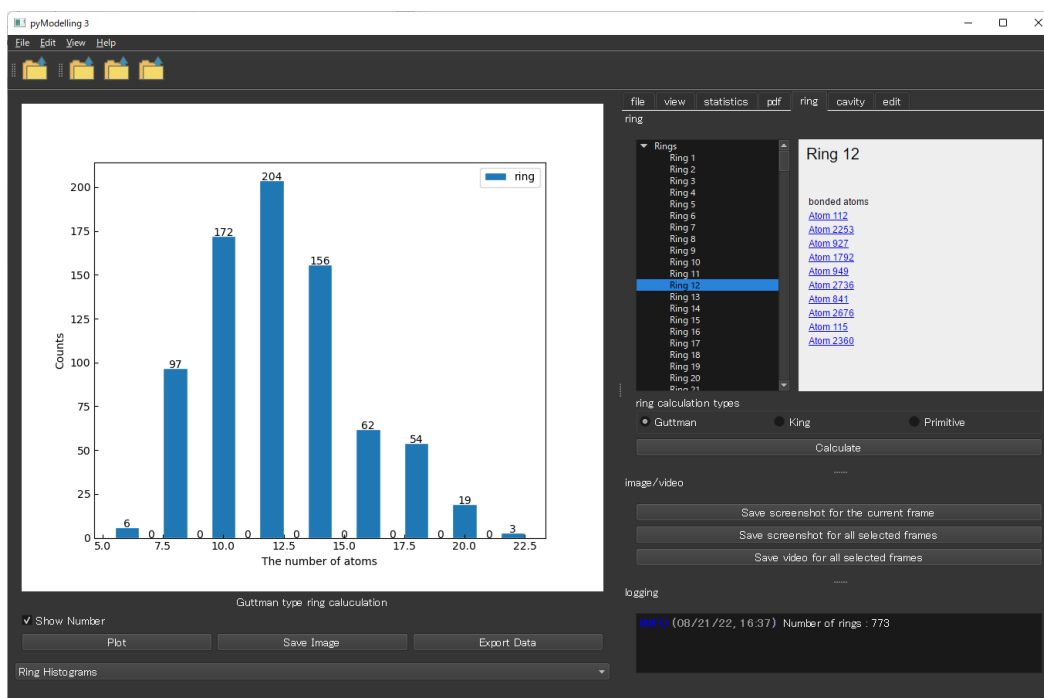


図 3-7 リングリストグラム

### 3.6. キャビティ解析

キャビティ計算は cavity タブで Calculate ボタンをクリックすると 3D ビューにキャビティ領域が表示される (図 3-8)。キャビティのリストは statistics タブの Cavity 部分にツ

リーリストとして表示される。Cavity を選択すると Cavity 情報が表示される。

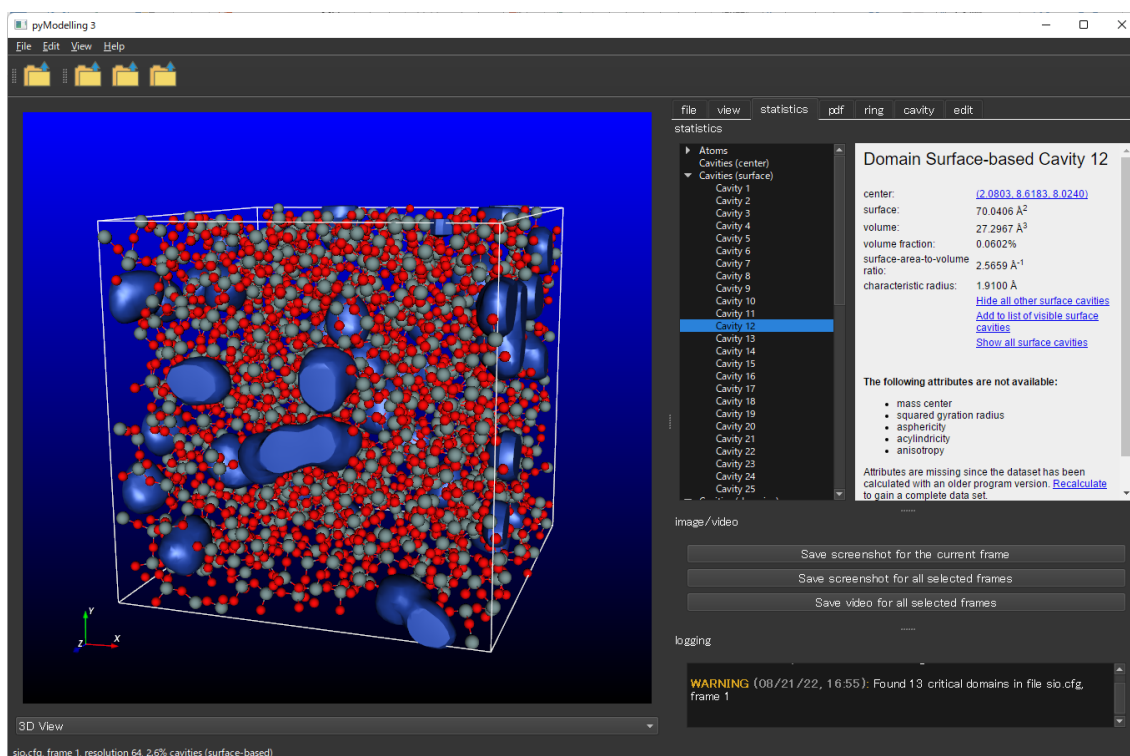


図 3-8 キャビティ計算画面

### 3.7. グラフ比較

複数の解析した結果を比較することが可能で、メニューの Tools から Diff. graph を選択すると以下のような画面が現れる。

左から比較したいケース名を選択、二列目からデータの種類を選択する。Apply ボタンを押すと右のグラフに比較した図を表示される。

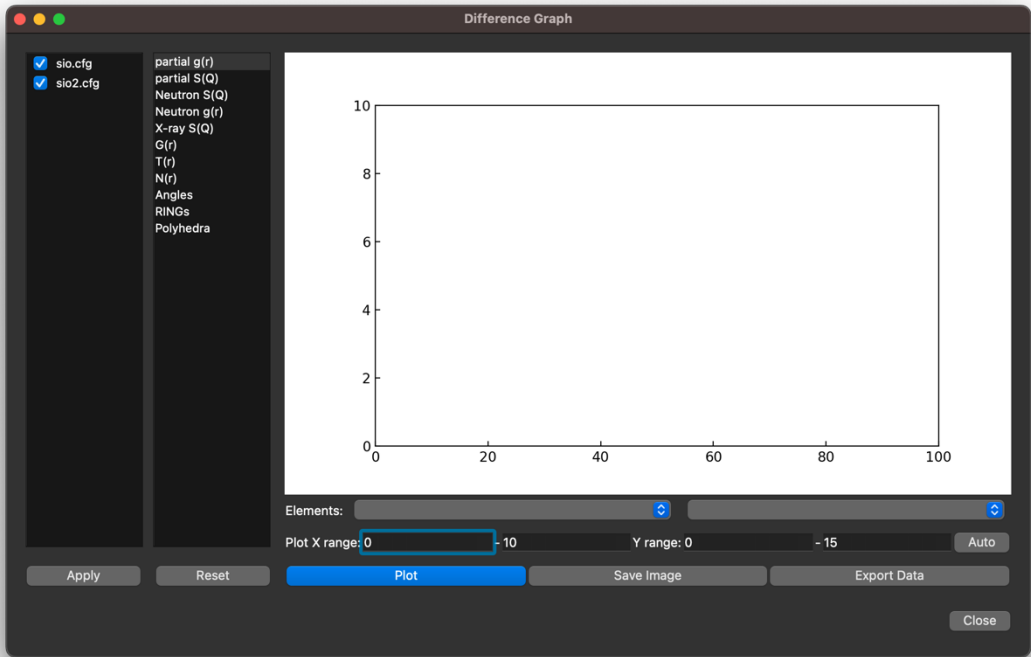


図 3-9 グラフ比較ダイアログ

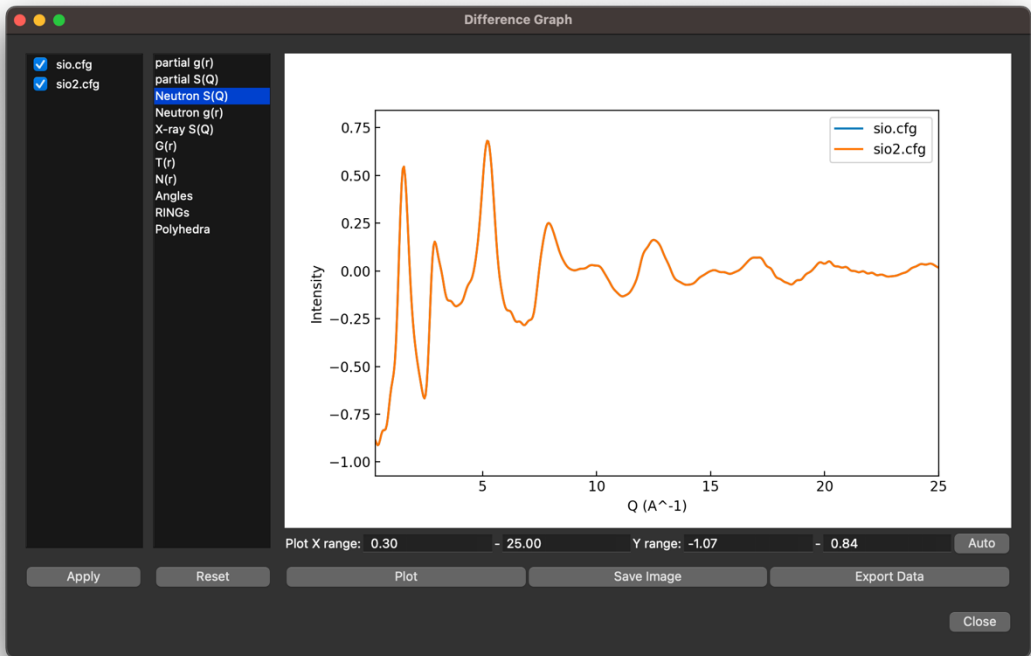


図 3-10 中性子  $S(Q)$  を比較した図