

SALMON VR - macOS版 ユーザーマニュアル

このドキュメントは、SALMON VR - macOS版（以下本アプリ）のインストール方法および操作方法等について説明します。

動作環境

本アプリの動作環境は以下のとおりです。

- macOS 14.5以上
- チップ：Apple Silicon

インストール方法

ダウンロードしたzipファイルを任意の場所に展開してください。

起動方法

Finderで展開したディレクトリに移動し、ディレクトリに含まれる **SALMON VR.app** をダブルクリックで起動してください。

なお、WebからダウンロードされたappファイルはmacOSのセキュリティ保護機能により、そのままでは起動できません。以下を参考に状況に応じて追加の手順を行ってください。

注意 1：「開発元が不明なため開けません」と表示される

本アプリの初回起動時は「開発元が不明なため開けません」といった警告ダイアログが表示される場合があります。その場合は一旦OKを押してダイアログを閉じ、以下の手順に従って起動してください。

1. Macでアップルメニュー > 「システム設定」と選択し、サイドバーで「プライバシーとセキュリティ」をクリックします。（下にスクロールする必要がある場合があります。）
2. 「セキュリティ」に移動して、「開く」をクリックします。
3. 「このまま開く」をクリックします。
4. ログインパスワードを入力して、「OK」をクリックします。

参考情報

- [開発元が不明なMacアプリを開く](#)

注意 2：「アプリケーションを開けません」と表示される



本アプリを開こうとすると「アプリケーション "SALMON VR" を開けません。」と表示される可能性があります。その場合は、以下の手順に従ってアプリ本体に実行権限を付加してください。

1. 「OK」を押してダイアログを閉じる。
2. ターミナルを開いて、本アプリが置かれている場所までカレントディレクトリを移動します。
3. 以下のコマンドを実行してください

```
chmod a+x SALMON\ VR.app/Contents/MacOS/SALMON\ VR
```

注意3：「ファイルが壊れています」と表示される



本アプリを開こうとすると「～は壊れているため開けません。…」と表示される可能性があります。その場合は、以下の手順に従って拡張属性を削除してください。

1. 「キャンセル」を押してダイアログを閉じる。
2. ターミナルを開いて、本アプリが置かれている場所までカレントディレクトリを移動します。
3. 以下のコマンドを実行してください

```
xattr -d com.apple.quarantine "SALMON VR.app"
```

注意4：「ファイルにアクセス」警告が表示される



本アプリの起動時に「~フォルダ内のファイルにアクセスしようとしています」といった文言の警告が表示される可能性があります。その場合は「許可」を選択してください。

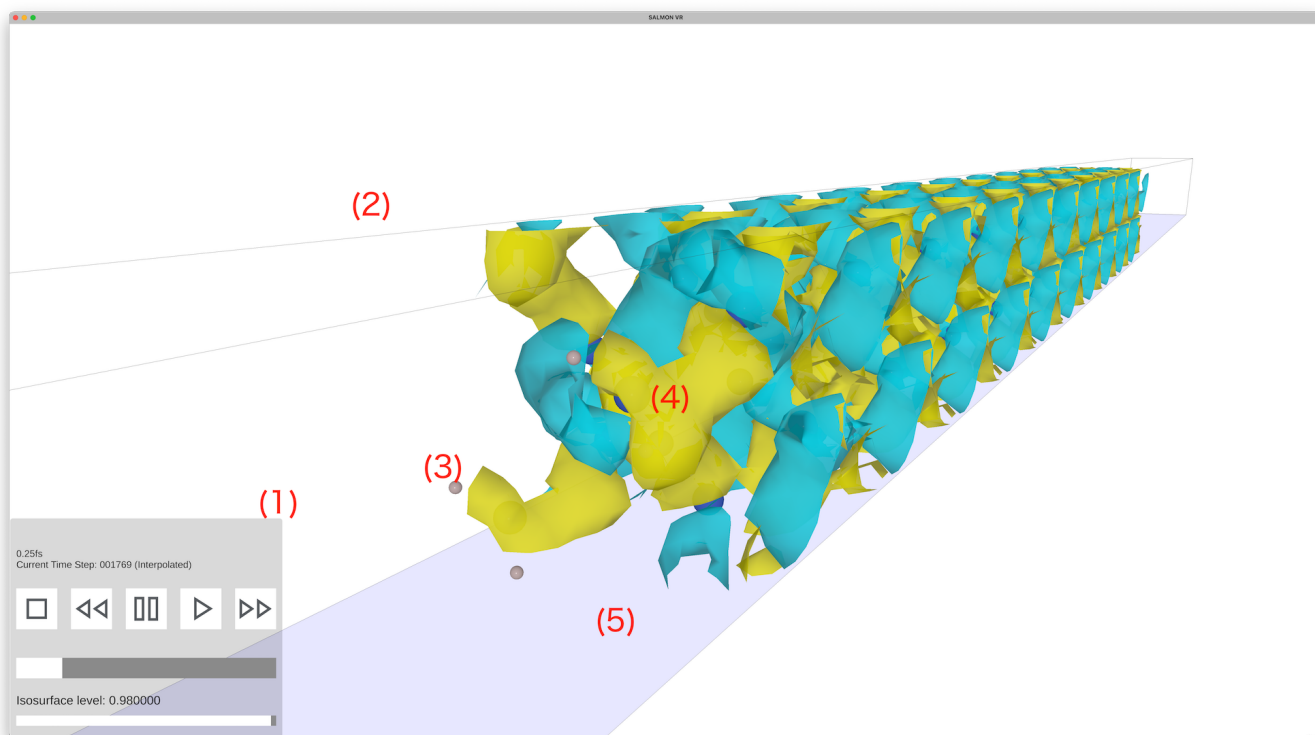
参考情報

- [Macでファイルおよびフォルダへのアクセスを制御する](#)

終了方法

本アプリのウィンドウを左上の赤ボタンを押して終了します。

画面の見方



本アプリの基本的な画面構成について以下に説明します。

1. GUIパネル：タイムラインの再生・停止やIsosurfaceレベルの調整が可能です。
2. 計算空間：黒い線の内側は計算空間を表します。

3. 原子：水素などの原子は球状のオブジェクトで表現されます。
4. 電子密度：電子密度は正数が青、負数が黄色の2つの等値面 (Isosurface) で表現されます。
5. ベクトルポテンシャル：ベクトルポテンシャルは読み込まれた軸が計算空間の床面 (2次元) にマッピングされて表示されます。正数は赤、負数は青で色付けされ、値が0に近いほど透明度が上がります (0=全透明)

Cubeデータのレンダリングとタイムラインについて

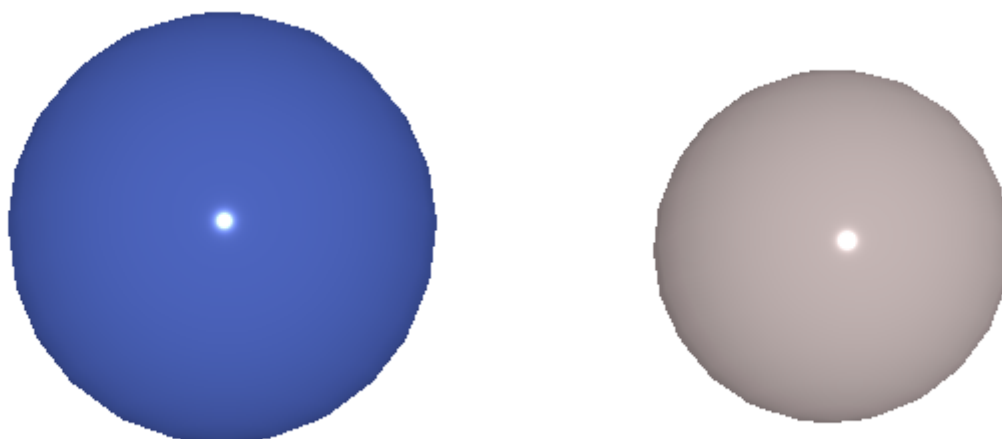
本アプリは起動時にCubeファイル (*.cube) から以下の情報を読み込みます。

情報	参照元
全タイムステップの電子密度データ	*drho.cube のパターンに該当するファイル一式。 * ファイルフォーマットは設定ファイルから変更可能。
全タイムステップ分のベクトルポテンシャルデータ	*Ac_x.cube のパターンに該当するファイル一式。 * ファイルフォーマットは設定ファイルから変更可能。軸を変更する場合は *Ac_y および *Ac_z を指定します。
計算空間、グリッド数とグリッド幅、原子数、各原子の種類および座標	最初に読み込まれたCubeファイルのヘッダーから参照
タイムステップ	ファイル名の先頭 it の後に続く 6 けたの数字から取得

取得された各データは以下のようにレンダリングされます。

原子

原子は種類ごとに色とサイズが異なる球状のオブジェクトとしてレンダリングされます。例として、以下の図にケイ素 (青い球)、水素 (白い球) のレンダリング結果を示します。



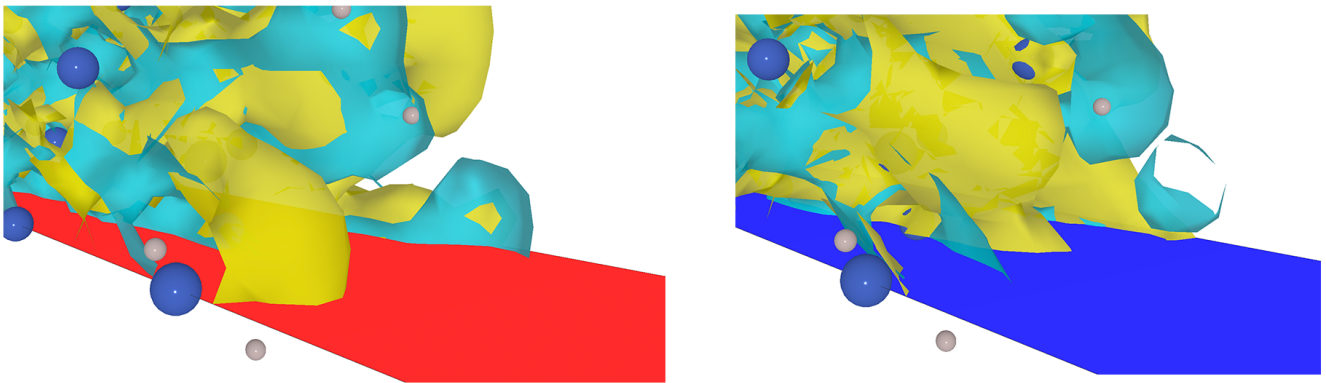
電子密度

電子密度は、整数が青色、負数が黄色の2つの等値面 (Isosurface) でレンダリングされます。Isosurfaceはマーチングキューブ法を用いて計算され、レベルは後述するGUIパネルから変更可能です。

ベクトルポテンシャル

ベクトルポテンシャルは計算空間の床面 (X方向とZ方向のグリッドが成す平面) にマッピングされた平面としてレンダリングされます。このとき、XとZを固定したY方向のグリッドがとる値は平均化されます。また、各グリッドの値は整数を赤、負数を青で表現されます。また、値が0に近づくほど透明度が上がり、0は完全透明となります。なお、値は最大値を完全な赤 (#FF0000FF) および青 (#0000FFFF) となるよう正規化されます。

例として、下図にベクトルポテンシャルが整数 (左) および負数 (右) の時のデータのレンダリング結果を示します。



タイムラインとタイムステップの補完について

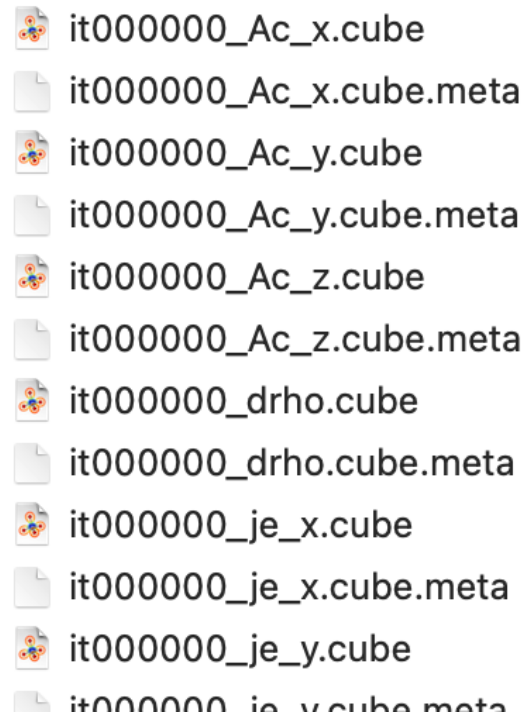
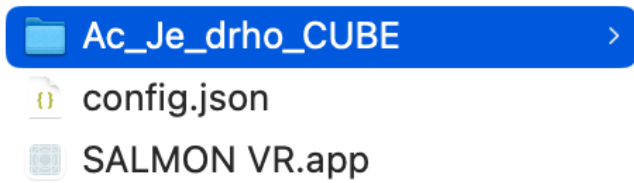
本アプリでは読み込まれたデータをタイムステップの順番にタイムラインを形成し、アニメーションとして再生することが可能です。このとき、タイムステップは1ずつ進みますが、もし読み込まれたCubeファイルのタイムステップが間引かれている場合は、値は前後のファイルの値でリニア補完されます。

なお、タイムラインの制御については後述の「GUIパネルの使用方法」を参照してください。

Cubeファイルの読み込み方

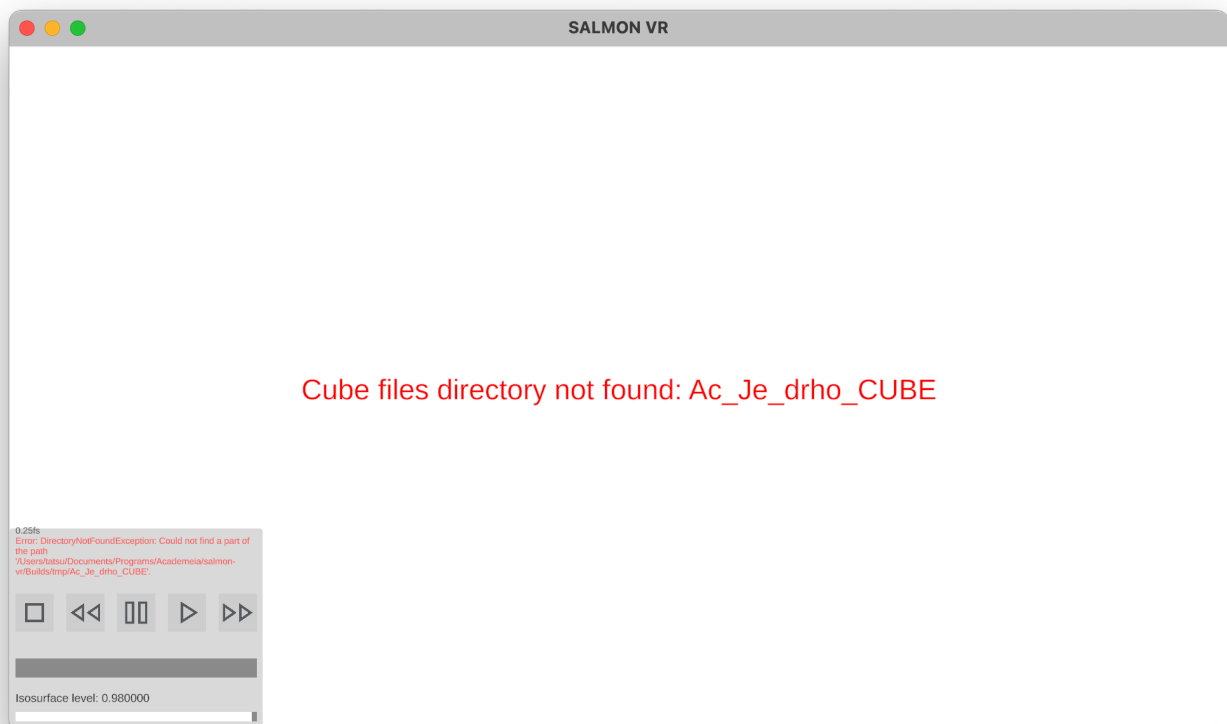
本アプリは起動時にappファイルと同じディレクトリに置かれたCubeファイルを読み込みます。

例えば、Cubeファイル一式が格納された「Ac_Je_drho_CUBE」というディレクトリを対象とする場合は、Finder上で以下の図のように配置してください。



なお、対象のディレクトリ名は以下に説明する設定ファイルから変更が可能です。

本アプリ起動直後に以下のようにエラーメッセージが表示される場合は、Cubeファイルが正しく読み込まれていない可能性があります。ディレクトリの場所と名前が正しいか確認してください。



設定ファイルについて

appファイルと同階層に配置されている「config.json」から本アプリの環境変数を変更することが可能です。デフォルトの値は以下のとおりです。

```
{
  "CubeFilesDirectoryName": "Ac_Je_drho_CUBE",
  "InfomationText": "0.25fs",
  "TimestepPerSecond": 100,
  "DrhoFileFormat": "*drho.cube",
  "AcFileFormat": "*Ac_x.cube",
  "EnableAcGammaCorrection": false,
  "AcGamma": 2.2
}
```

それぞれの変数の内容は以下のとおりです。

変数 (Key)	値 (Value)	型タイプ
CubeFilesDirectoryName	読み込まれるCubeファイル一式が置かれたのディレクトリ名	文字列
InfomationText	GUIパネルに情報表示する追加のテキスト	文字列
TimestepPerSecond	アニメーションの速度を指定します。値はタイムラインを再生した時に1秒ごとに進むタイムステップの量を指定します (100の場合: 1秒間に100タイムステップ進む)	整数
DrhoFileFormat	Cubeファイルのうち、電子密度のファイルフォーマット	文字列
AcFileFormat	Cubeファイルのうち、ベクトルポテンシャルのファイルフォーマット	文字列
EnableAcGammaCorrection	ベクトルポテンシャルの透明度にガンマ補正をかけるか否か	Boolean
AcGamma	上記ガンマ補正の係数 (<code>EnableAcGammaCorrection: true</code> の場合のみ有効)	実数

視点の操作方法

以下のキーボードとマウス操作の組み合わせで3次元空間内で視点を自由に移動することができます。

キーボードで操作

空間の移動

キー	動作
w	前方に移動
s	後方に移動
a	左に移動

キー 動作

d 右に移動

e 上に移動

q 下に移動

視点の回転

キー 動作

↑ 上方向に回転

↓ 下方向に回転

← 右方向に回転

→ 左方向に回転

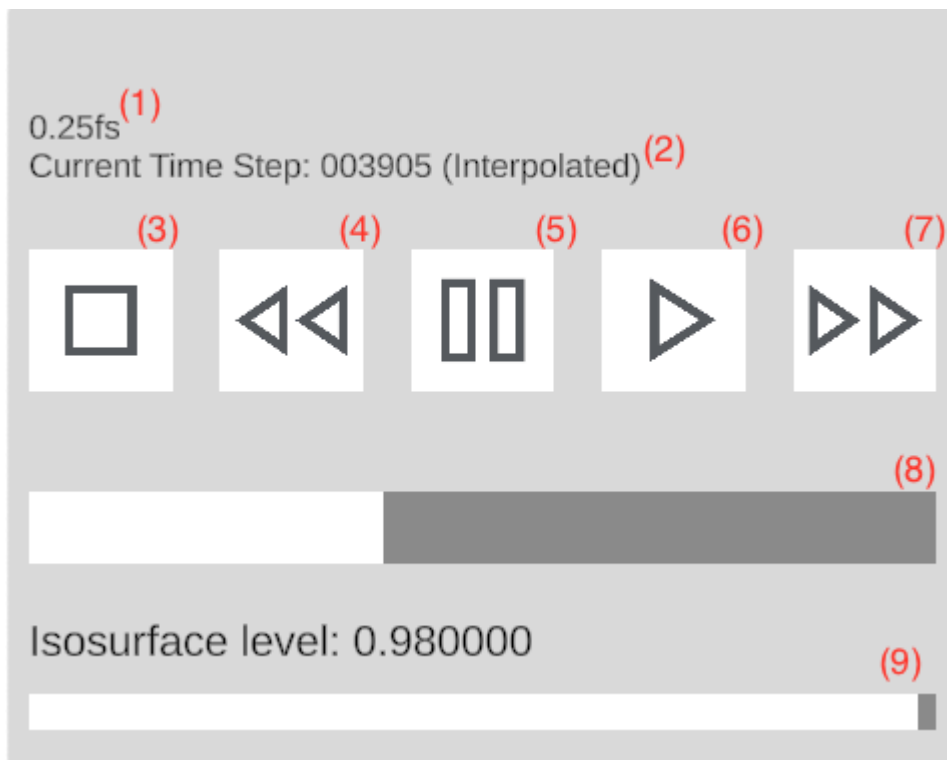
※ Shiftキー同時押し：移動・回転の速度アップ

マウスで操作

操作	動作
スクロール	前後の移動
右ボタンでドラッグ	視点の回転
ミドルボタンのドラッグ	上下左右の移動

GUIパネルの使用法

画面上に置かれたGUIパネルではタイムライン（タイムステップのアニメーション）操作やIsosurfaceレベルの調整などが可能です。詳細は以下のとおりです。



1. 追加の情報表示（設定ファイルから変更可能）
2. 現在のタイムステップの値（補間された値の場合は後ろにInterpolatedが付きます）
3. 再生停止
4. 倍速逆再生（押すたびに倍率アップ）
5. 一時停止
6. 再生
7. 倍速再生（押すたびに倍率アップ）
8. シークバー（マウスドラッグで位置操作が可能）
9. Isosurface Level の変更（値は最大値で正規化）

タイムラインをキーボードで操作

タイムラインはキーボード入力からも操作可能です。

キー	動作
スペースバー	再生・停止
k	再生・停止
j	倍速逆再生（入力のたびに倍率アップ）
l	倍速再生（入力のたびに倍率アップ）

コマ送り

キー	動作
f	1タイムステップ進む
b	1タイムステップ戻る

※ Shiftキー同時押しで10タイムステップごとに可変