

この PDF ファイルを開くと、セキュリティのワーニングが表示されます。

[オプション] から [信頼する] を選んでください。

VTS ソフトウェア(株)

2025 年 1 月 30 日

PDF3D と VMD による分子データの 3D PDF 文書の作成

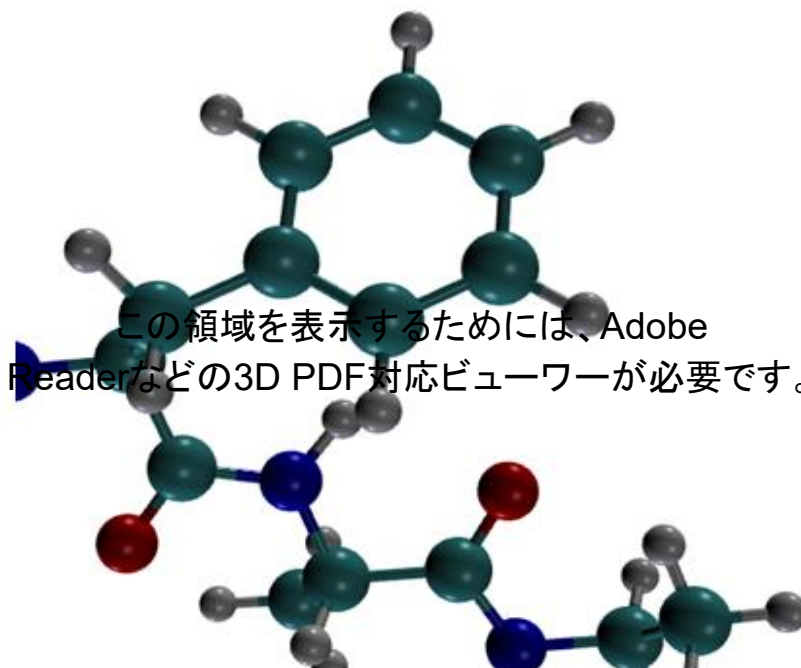
ボール&スティックや CPK、VDW 表示など、分子データの可視化結果を PDF 文書に埋め込み、技術文書として保存、また、共有することができます。

この資料では、VMD を利用した操作方法を紹介します。

VMD の操作方法

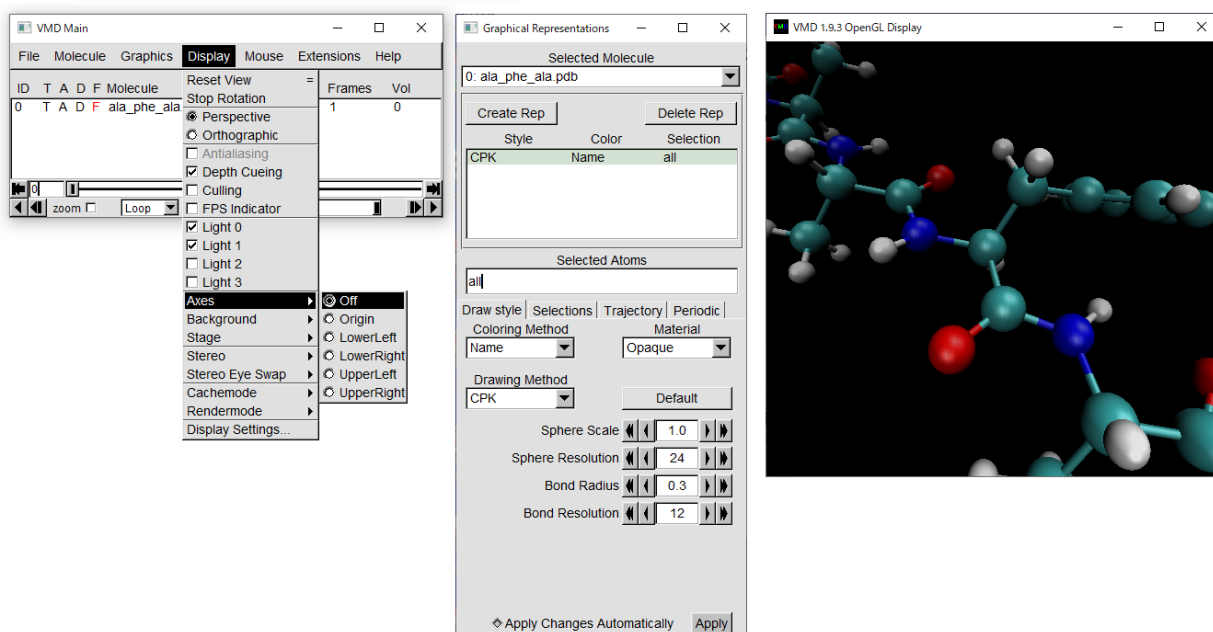
まず、VMD で分子データの読み込みを行い、可視化を行ってください。

また、Graphics メニューの Representations で、適切な表示方法を設定します。



マウス左：回転、マウス右を上下：拡大縮小、マウス左右同時：移動

また、可視化できたら、最後に、Display メニューの Axes メニューから方向軸を非表示 (Off) にしてください。



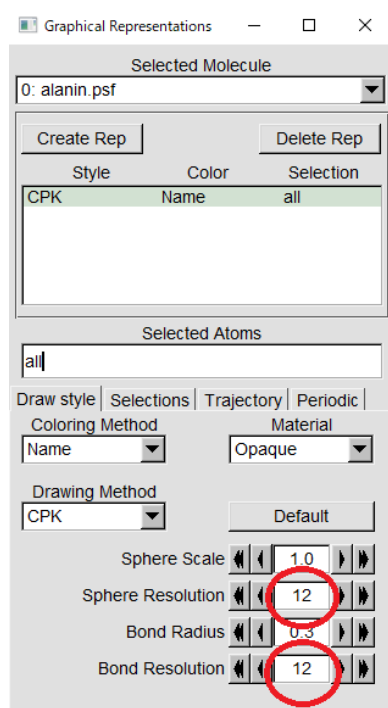
次に、PDF3D ReportGen に受け渡す 3 次元データを作成します。

注意)

VMD には、3 次元ファイルの作成方法として、VRML 形式を使って変換する方法と Obj 形式を使って変換する方法の 2 つの方法があります。

基本的には、Wavefront Obj 形式のファイル保存を利用してください。

また、Graphics Representations (下図にある Sphere Resolution や Bond Resolution) を利用し、ポリゴンの分割数を調整してください。

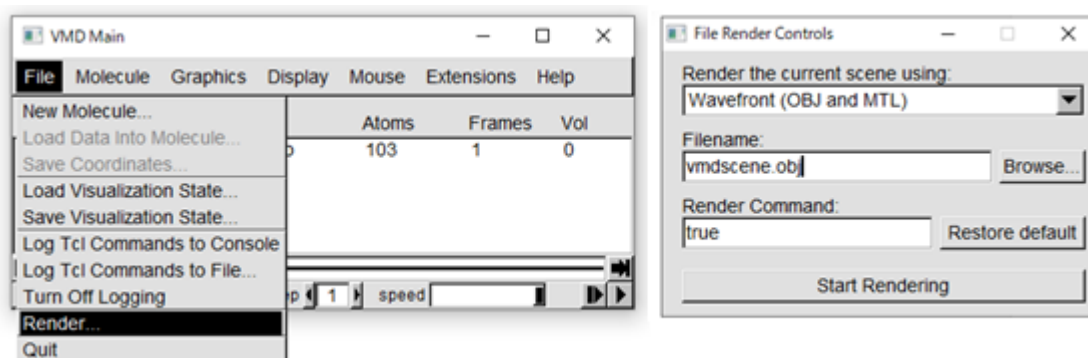


3D PDF で表示できる目安は、マシン環境にも依存しますが、操作性を考えると、50 万から 100 万ポリゴン程度です。例えば、Sphere Resolution が 10 の場合、1 つの球あたり約 12 ポリゴンが必要となります。Resolution を 20 にあげると、1 つの球あたり約 128 ポリゴン程度が必要となります。Bond の有無なども踏まえて、適宜、調整してください。

VRML 形式に出力、変換する場合、球は VRML の Sphere プリミティブとして出力されます。Acrobat Reader の 3D ビューは Sphere プリミティブをサポートしていないため、ReportGen の変換時に、高精細なポリゴン分割球に変換されます。きれいな球が描けますが、ポリゴン数が大量なるため、球の数が多い場合には利用できません。500 個程度までであれば、VRML 出力の利用も可能です (きれいな球が描けます)。

VMD で 3 次元ファイルに出力するには、File メニューの Render を選びます。

開いたパネルの Render the current scene using: の選択で、Wavefront (OBJ and MTL) の形式 (もしくは VRML2.0) を利用します。次に、ファイル名を指定 (拡張子.obj も必要) し、Start Rendering ボタンをクリックします。指定した場所に、Obj ファイル (.obj/.mtl) ファイルが作成できたことを確認してください。



ReportGen による PDF ファイルの作成

ReportGen で作成した Obj ファイルを変換します。

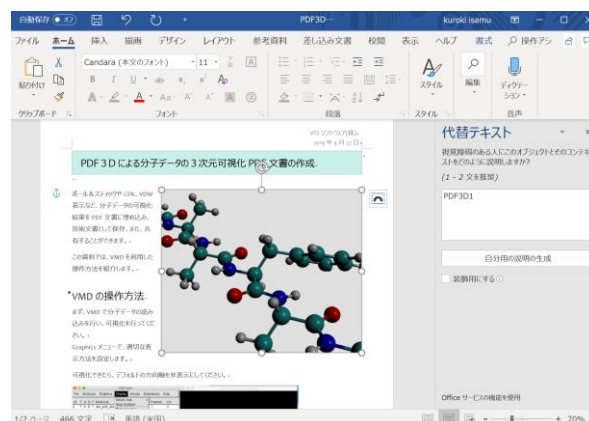
詳細は『チュートリアル・ガイド』を参照してください。

1. テンプレート文書の作成

例えば、本文書のように、3D ビューが埋め込まれた文書を作成するには、まず、Microsoft Word を利用し、文書を作成します。

3 次元データを埋め込みたい場所に、画像を配置し、マウス右メニューから、その画像に「代替テキスト」を設定、PDF3D1 と指定します。(右図参照)

名前を付けて保存メニューから、PDF ファイル (Template.pdf) に保存します。



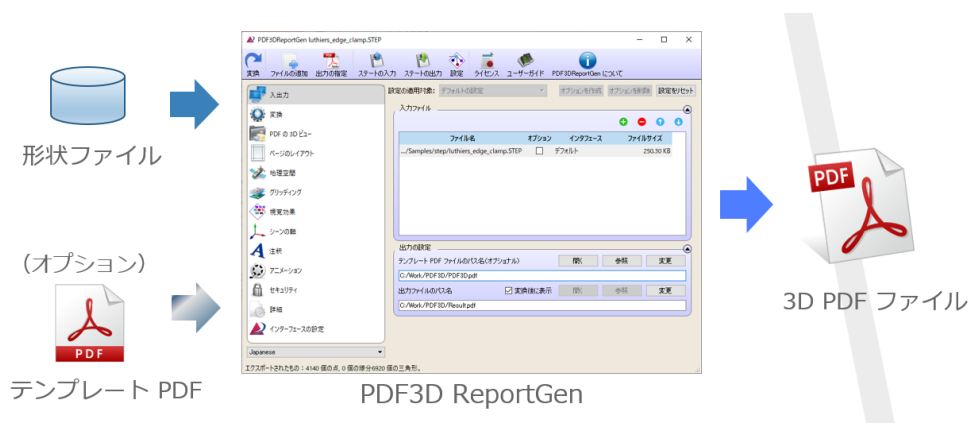
2. ReportGen を起動し、3D PDF を作成します。

VMD で作成した Obj ファイルを入力ファイルとして指定します。

テンプレート・ファイルの入力に、1. で作成した PDF ファイル (Template.pdf) を指定します。

出力する PDF ファイル名 (作成する 3D PDF ファイル) を指定し、実行します。

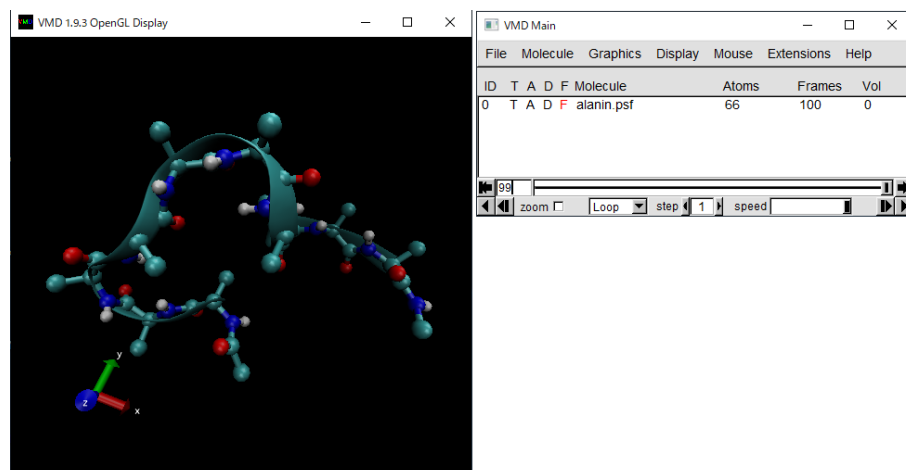
(その他、デフォルトのライト・タイプや背景色の設定なども、このツールの中で行うことができます。)



アニメーションの作成

アニメーションを作成するには、連番ファイルが必要です。step01.obj、step02.obj、... のように Obj 形式の連番ファイルを作成します。

VMD で連番ファイルを作成するには、以下のようなスクリプトを作成し、実行します。



例えば、上図では、VMD のサンプル・データ alanin.psf/dcd データを CPK と NewRibbons で可視化しています。このデータは 100 ステップあります。この 100 ステップを順番に進めながら Obj ファイルを作成するスクリプトを作成します。（例えば、メモ帳などを利用し、以下の内容を c:\tmp¥anim_obj.tcl として作成してください。）

```
#  
axes location off  
  
#  
for {set i 0} {$i < 100} {incr i} {  
  animate goto $i  
  render Wavefront [format "c:/tmp/test.%05d.obj" $i]  
}
```

axes location off コマンドは、VMD の方向軸をオフにするコマンドです。この軸もファイルに出力されてしまいますので、オフにしています。

次に、0 から 99 までの for ループを作成しています。

animate コマンドの goto を使って、\$i、すなわち、ループのカウント値のステップに移動しています。

その後、render コマンドを Wavefront 形式でファイルに保存しています。

format 文を使うことで、桁揃えの連番ファイル名を作成しています。

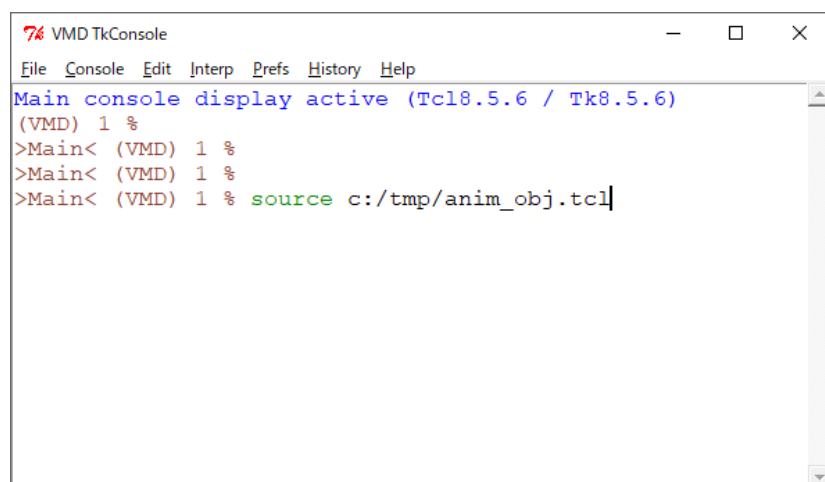
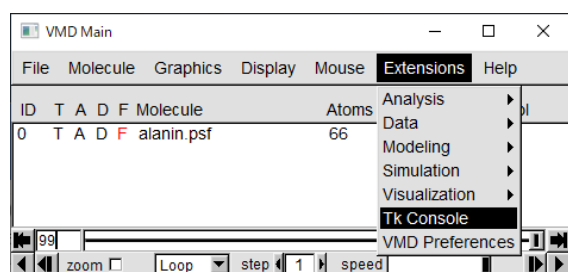
この例では、c:¥tmp フォルダに、test.00000.obj、test.00001.obj ... の連番ファイルが作成されます。

(¥ は / で指定します。)

スクリプトファイルができたなら、VMD の Extensions メニューから Tk Console を選びます。開いたコンソールで、source コマンドを利用してスクリプトファイルを実行します。

```
source c:/tmp/anim_obj.tcl
```

(スクリプトファイルの指定も ¥ は /、もしくは ¥¥ で指定してください。)



VMD の Display のアニメーションが動作するのを確認してください。

また、スクリプトの中で指定した場所 (c:¥tmp) に .obj/.mtl のペアの連番ファイルが作成されているのを確認してください。

VMD は、コマンドラインで実行することもできます。

例えば、スクリプトの中でデータを読み込み、グラフィックスの設定を行った後、データの出力を行います。次の例は、先ほどのスクリプトに、データの読み込みと NewRibbons と CPK の表示を追加した例です。

```
#
axes location off

#
mol new C:/tmp/proteins/alanin.psf waitfor all
mol addfile C:/tmp/proteins/alanin.dcd waitfor all

mol delrep 0 top
mol representation NewRibbons 0.350000 10.000000 7.250000 0
mol addrep top
mol representation CPK 0.9 0.6 10.0 10.0
mol addrep top

#
for {set i 0} {$i < 100} {incr i} {
  animate goto $i
  render Wavefront [format "c:/tmp/test.%05d.obj" $i]
}
```

以下のようにバッチで実行できます。

```
"C:¥Program Files (x86)¥University of Illinois¥VMD¥vmd.exe"
      -dispdev none -e anim_psf.tcl
      (紙面の都合上改行)
```

-dispdev none は、表示画面なしに実行するオプションです。

* VMD のコマンドの詳細は、VMD のマニュアル等を参照してください。

また、File メニューの Save Visualization State メニューで現在の状態をコマンドに保存できます。

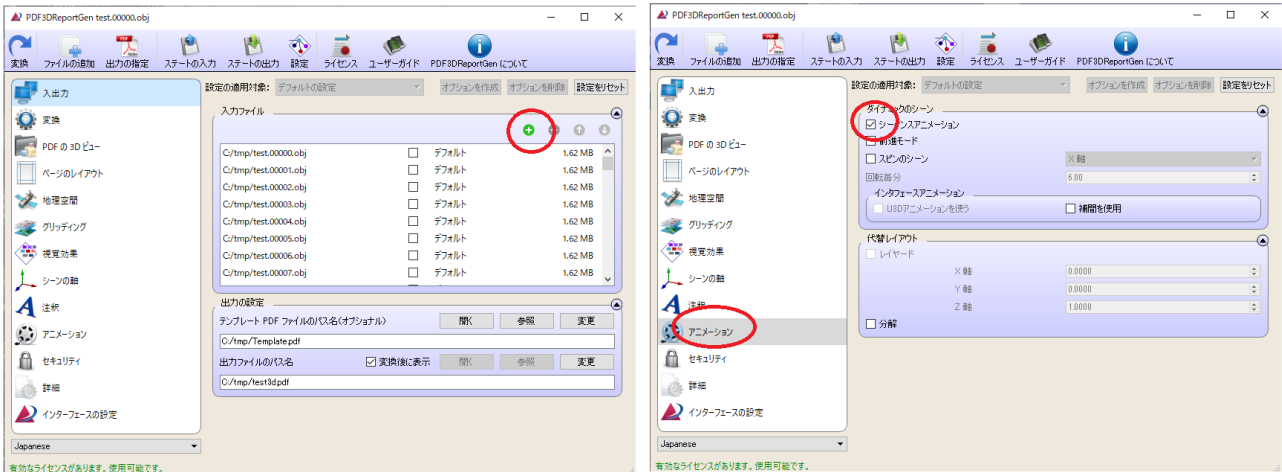
File メニューの Log Tcl Command ... を利用して、その操作のコマンドを見ることもできます。

ReportGen による PDF ファイルの作成 (アニメーション)

ReportGen で連番ファイルからアニメーションを作るには、まず、入力ファイルとして連番ファイル (*.obj) を指定します。入力ファイルの緑の + アイコンでファイル・ブラウザーを開き、*.obj をすべて選択します。

テンプレートの PDF ファイルと出力ファイルを指定します。

[アニメーション] タブにある [シーケンスアニメーション] をオンにして、変換を実行します。



詳細は ReportGen の『チュートリアル・ガイド』を参照してください。