

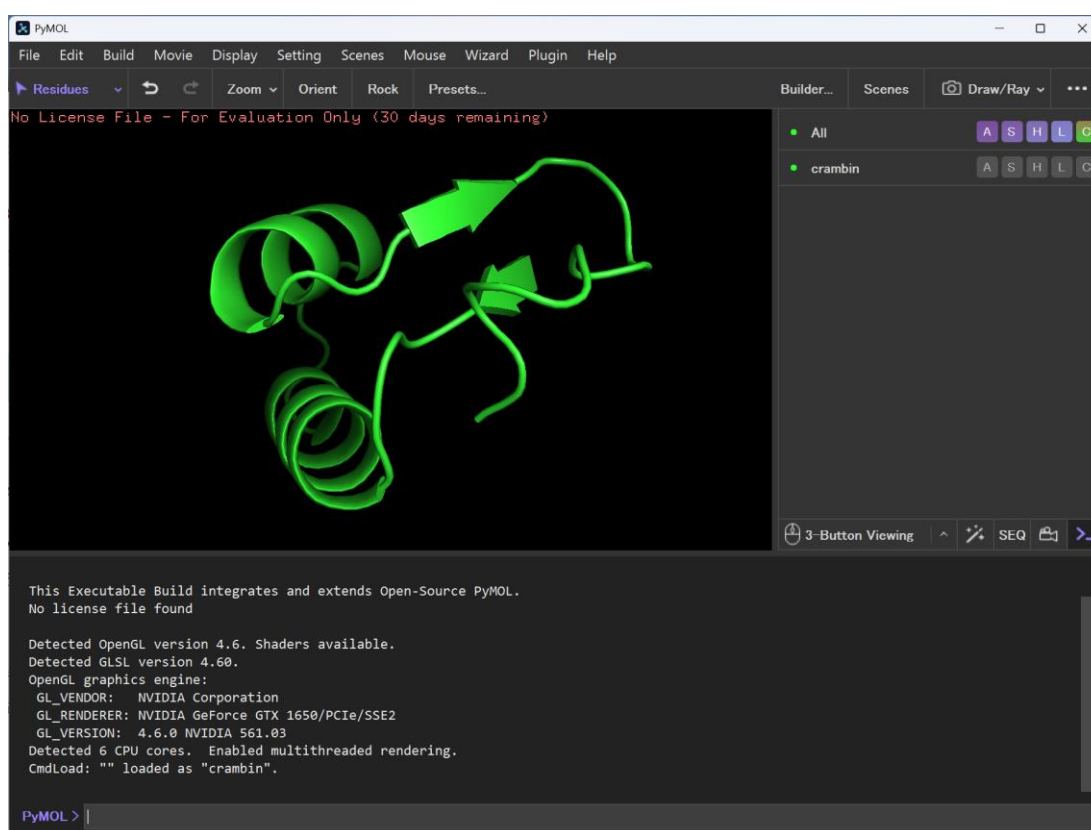
## PDF3D と PyMOL による分子データの 3D PDF 文書の作成

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 3 次元形状として PDF 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、PyMOL で可視化した結果を 3D PDF ファイルに変換する方法と注意点について説明します。

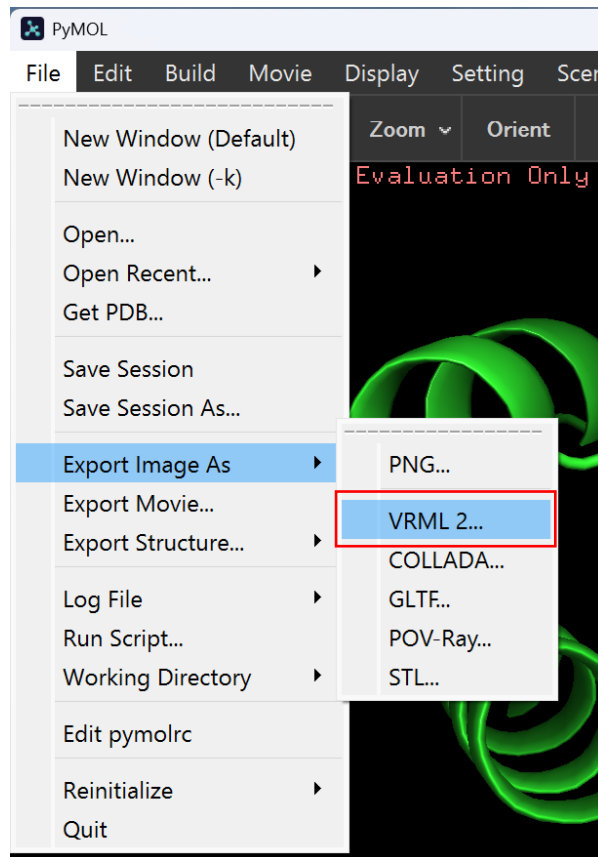
### PyMOL からの 3 次元データの保存

まず、PyMOL 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。



PDF3D ReportGen で 3D PDF ファイルに変換するために、3 次元の形状データに保存します。

3 次元データとして保存するには、[File]メニューの[Export Image As]にある[VRML 2...]メニューを選択します。VRML ファイルに保存します。



ファイル・ブラウザが開くので、適当な名前を指定します。例えば、c:¥tmp¥pymol\_cartoon.wrl として保存します。（実際にファイルができたかを確認してください。）

<補足>

PyMOL には、3 次元形状ファイルへの保存方法として、VRML の他に、COLLADA や glTF、POV-Ray、STL があります（上図の[Export Image As]メニュー参照）。

ReportGen で 3D PDF ファイルに変換するには、基本的には、VRML ファイルを利用します。後述しますが、ポリゴン数が多くなり、パフォーマンスに影響がある場合などには、COLLADA ファイルの利用も検討してみてください。VRML と COLLADA を利用した変換の違いについては、後半の章で説明します。

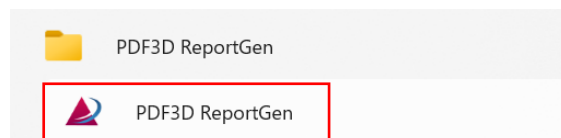
ReportGen では、glTF ファイルの入力もサポートしています。ただし、その変換は、COLLADA ファイルによる変換と大きな違いはありません。VRML、COLLADA のどちらの方法でも変換がうまくいかない場合には、glTF ファイルも試してみてください。

## ReportGen による PDF ファイルの作成

作成した VRML ファイルを ReportGen で 3D PDF ファイルに変換します。以下に簡単な手順を示します。詳細については、ReportGen の『チュートリアル・ガイド』を参照してください。

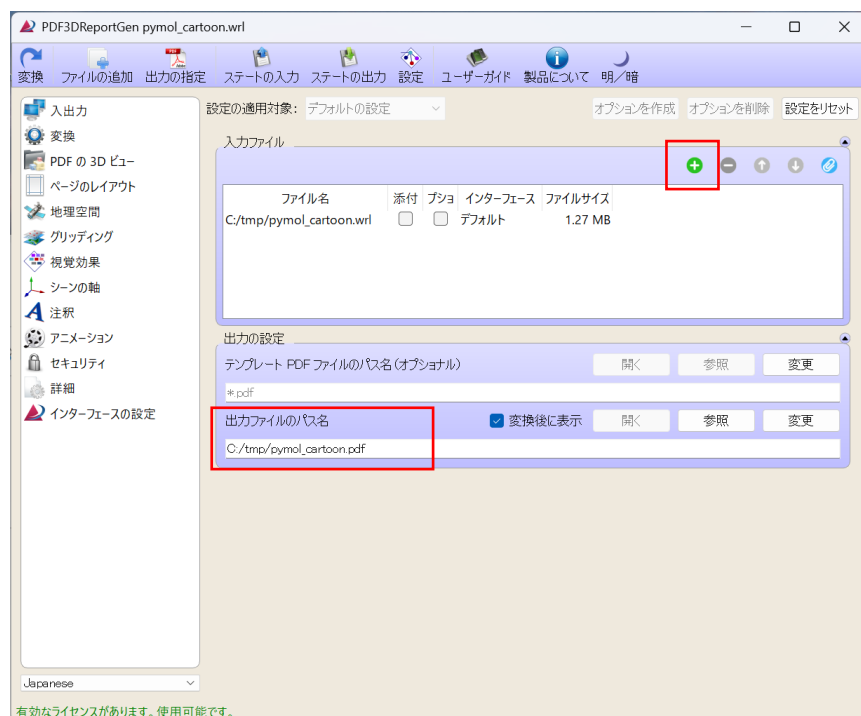
### 1. ReportGen を起動します。

スタート・メニューから[PDF3D ReportGen]を起動します。



### 2. 作成した VRML ファイルを[入力ファイル]に指定します。

図の+アイコンをクリックし、保存した VRML ファイル（例えば、先に作成した c:\tmp\pymol\_cartoon.wrl ファイル）を指定します。



デフォルトでは、[出力ファイルのパス名]に、入力ファイルと同じフォルダーに同じ名前の.pdf ファイルが自動で設定されます。（必要に応じて、出力するフォルダーやファイル名を変更してください。）

### 3. [変換]アイコンをクリックします。

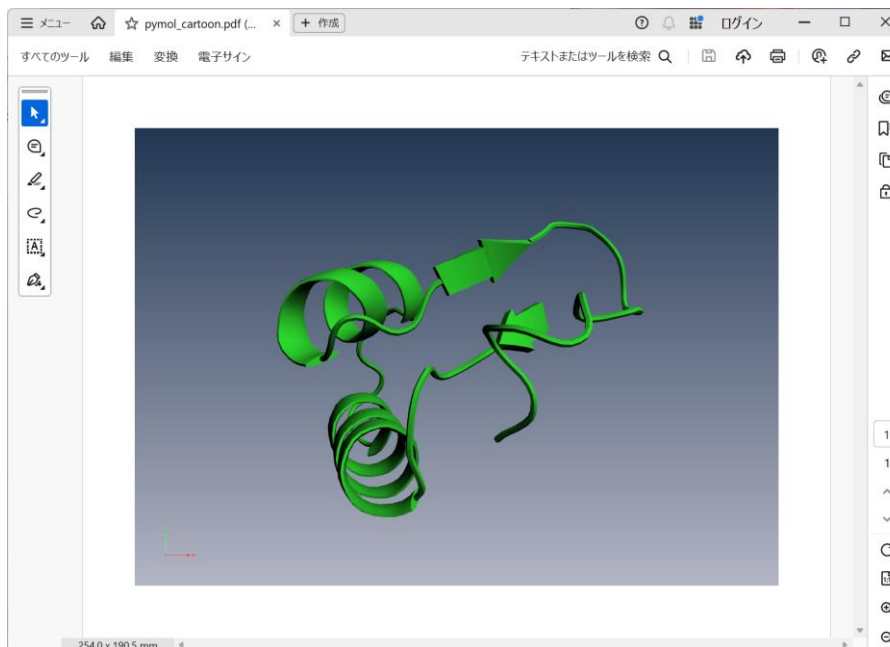
アイコン・メニューの左端にある[変換]アイコンをクリックします。3D PDF ファイルへの変換が実行されます。



問題なく変換が終わると、デフォルトでは、その変換後の PDF ファイルが開きます。（PDF ファイルを開くデフォルトのアプリケーションが Acrobat Reader に設定されている必要があります。）



黄色のバーが表示されるので、[オプション]から[今回のみこの文書を信頼する]を選び、メッセージが表示されているビューの領域をマウス左でクリックすると、3次元の形状オブジェクトが表示されます。



マウス左ボタンで回転、マウス中ホイールやマウス右ボタンの上下で拡大縮小することができます。

<補足>

Acrobat Reader の操作方法については、VTS ソフトウェア（株）で公開しているサポート情報のドキュメントを参照してください。

<https://vts-software.co.jp/supportinfo/support-general/>

「Acrobat Reader でのデータ読み込み時の注意点」

「Acrobat Reader の使い方」

デフォルトでは、Power Point の標準サイズのドキュメントが作成されます。ReportGen の変換時のパラメータで、ページ・サイズ、背景色、タイトルの設定などを行うことができます。

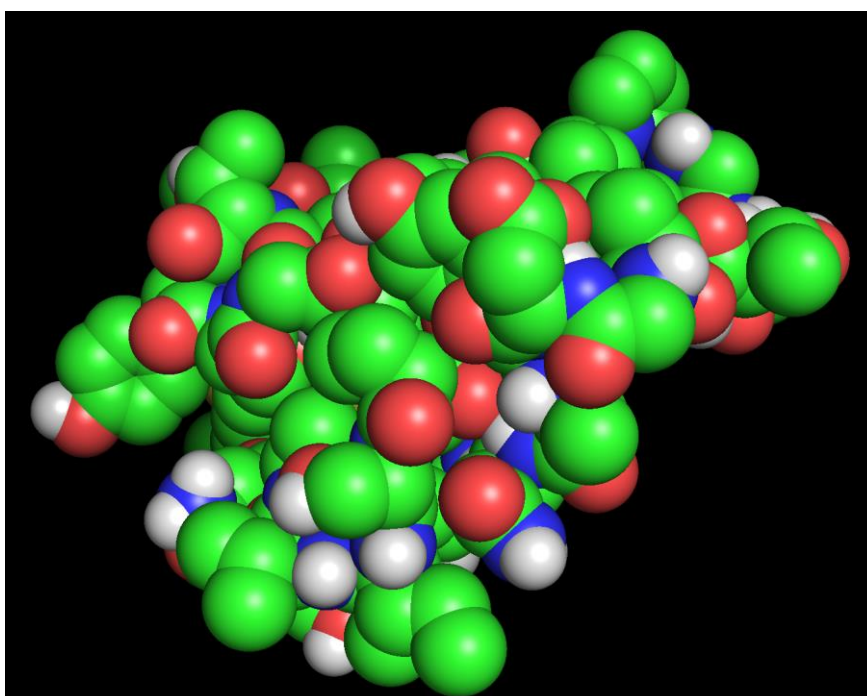
その他にも、Microsoft Office（Word や Power Point、Excel）で予め作成したドキュメントに 3D を埋め込むこともできます。

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

## 球の変換について

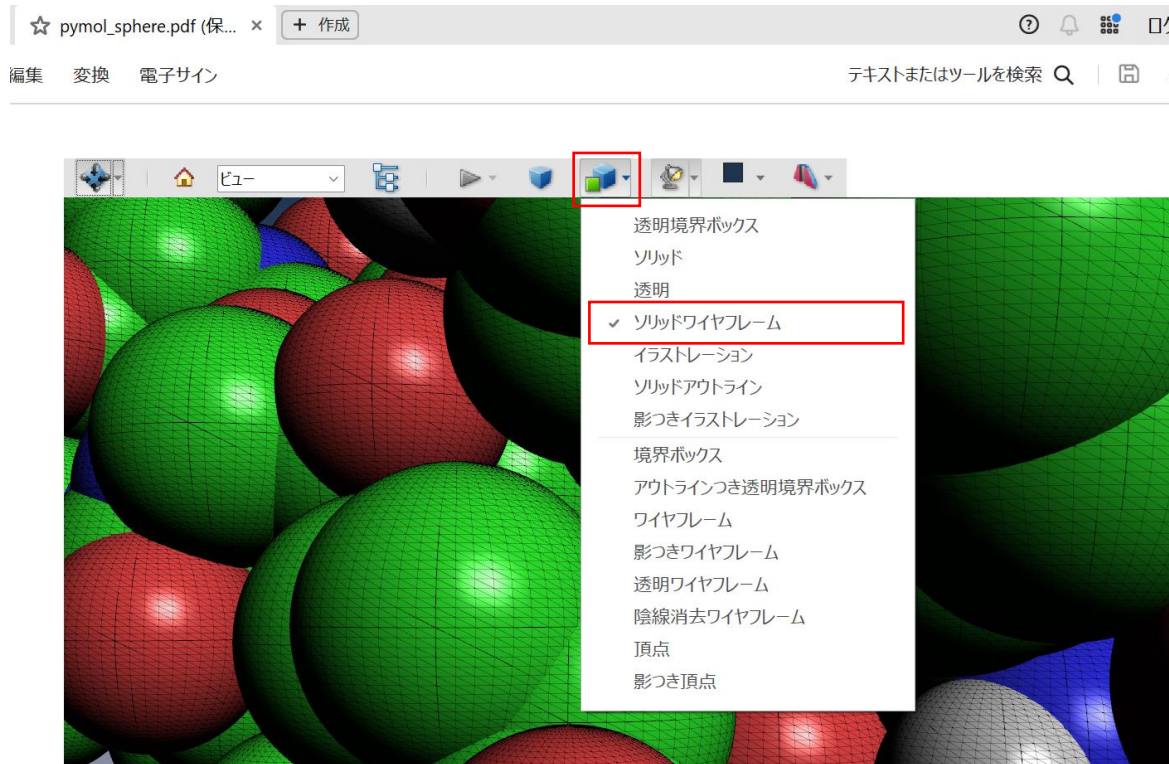
PyMOL の spheres 表示では、原子を球の形状で表現できます。PyMOL 上では、グラフィックスの機能で真球として表現されていますが、3D PDF ファイルには、球を真球として表現する機能はなく、三角形のポリゴンの集まりで表現されます。

例えば、下図は、PyMOL 上の spheres 表示を行った例です。



最初の手順と同様に、[File]メニューの[Export Image As]にある[VRML 2...]メニューを選び、VRML ファイルに保存します。

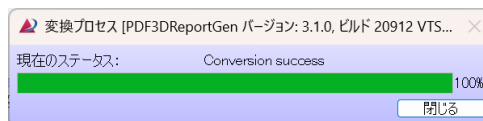
以下にその VRML ファイルを変換した 3D PDF ファイルを Acrobat Reader で開いた状態を示します。下図では、ビューの上にあるツール・バーのメニューで、[ソリッドワイヤフレーム]表示を行っています。

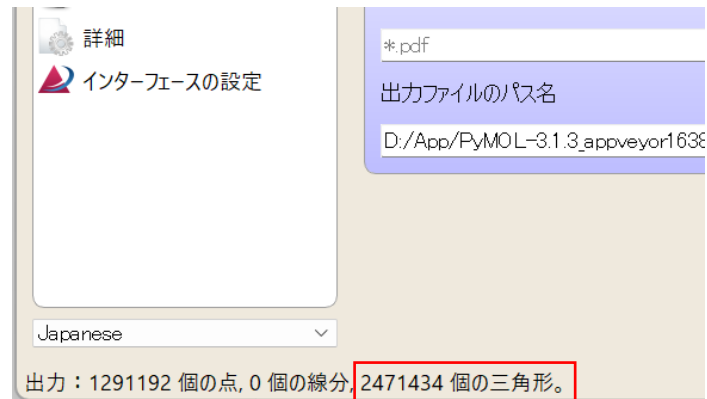


各球が三角形のポリゴンの集合で表現されている様子（球を構成する三角形の外形線）を見ることができます。

3D PDF ファイルでは、ポリゴン数が多くなると、その PDF ファイルを開く時間やマウスによる回転操作などのパフォーマンスが低下してしまいます。デフォルトでは、1つの球は、約 6000 個の三角形に変換されます。球の数が多くなると、莫大なポリゴン数となってしまいます。

3D PDF ファイルに変換された全体のポリゴン数は、ReportGen の変換後の以下のダイアログで[閉じる]ボタンを押した後に、ReportGen のパネルの左下のメッセージに表示されます。

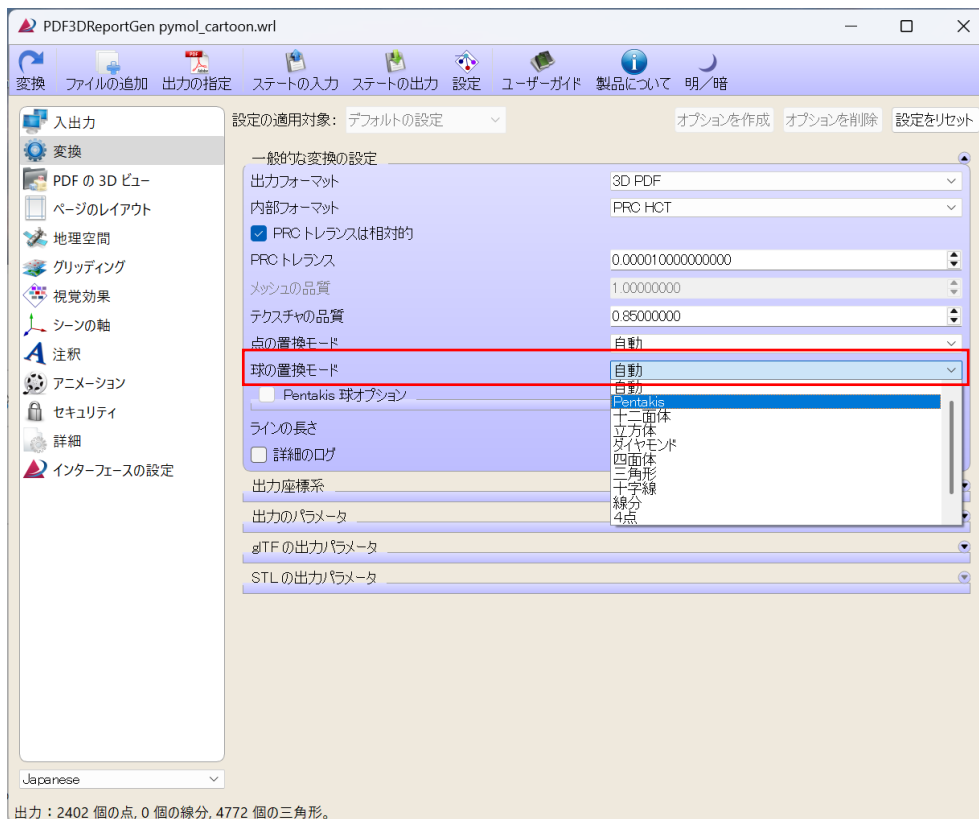




この例では、247 万個の三角形ポリゴンに変換されています。

マシンのパフォーマンスにも依存しますが、一般的には、操作性を考えると、100 万から 200 万程度に抑える方が良いです。

ReportGen では、この 1 つの球をどれくらいのポリゴン数に変換するかをパラメータで設定することができます。左側にある[変換]タブのパラメータで調整します。

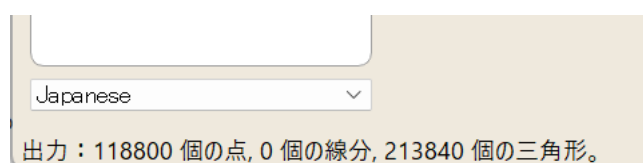
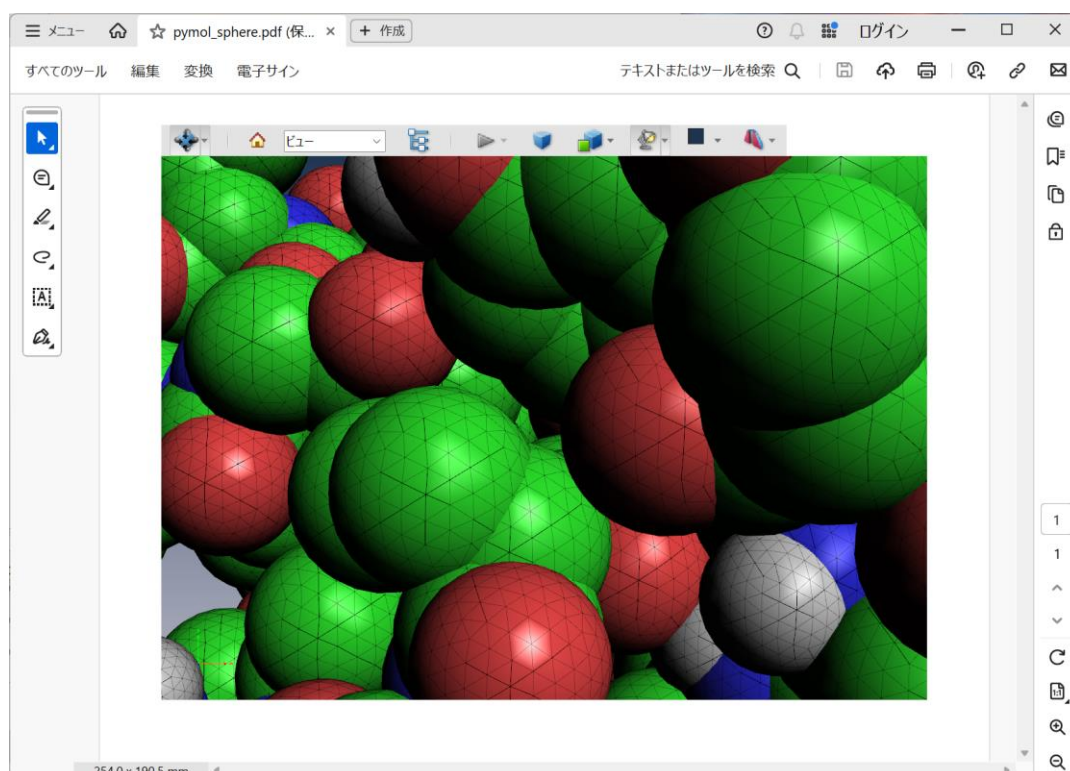


[球の置換モード]を[Pentakis]に設定します（デフォルトでは[自動]に設定されています）。

次に、[Pentakis 球オプション]をチェックし、[最小のサイズ][最大のサイズ]に 1 より大きな値を設定します。例えば、図の例では、両方の値を 3 に設定しています。



最初の例よりも球が少ないポリゴンで分割されます。



この例では、全体のポリゴン数も 21 万個に抑えることができます。

[最小のサイズ]と[最大のサイズ]のパラメータは、その指定された値  $N$  に対して、 $N \times N \times 60$  の数で分割します。3 の場合には、1 つの球が 540 個に分割されます。大きさが異なる球が混在している場合には、[最小のサイズ]と[最大のサイズ]に異なる値を設定することで、球の大きさによって分割数を変えることもできます。

その他、さらにポリゴン数を削減するには、球の代わりに、十二面体やダイヤモンド形状を置くことも可能です。詳細は、『チュートリアル・ガイド』を参照してください。



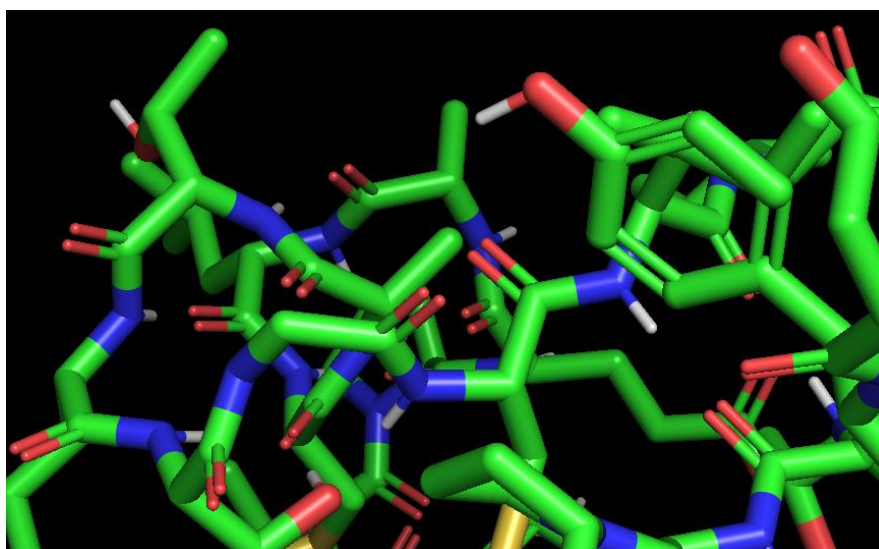
<補足>

VRML ファイルでは、球は、VRML フォーマットの Sphere プリミティブとして出力され、上記のように、ReportGen の変換時に、その Sphere プリミティブをポリゴンに分割した球に変換しています。

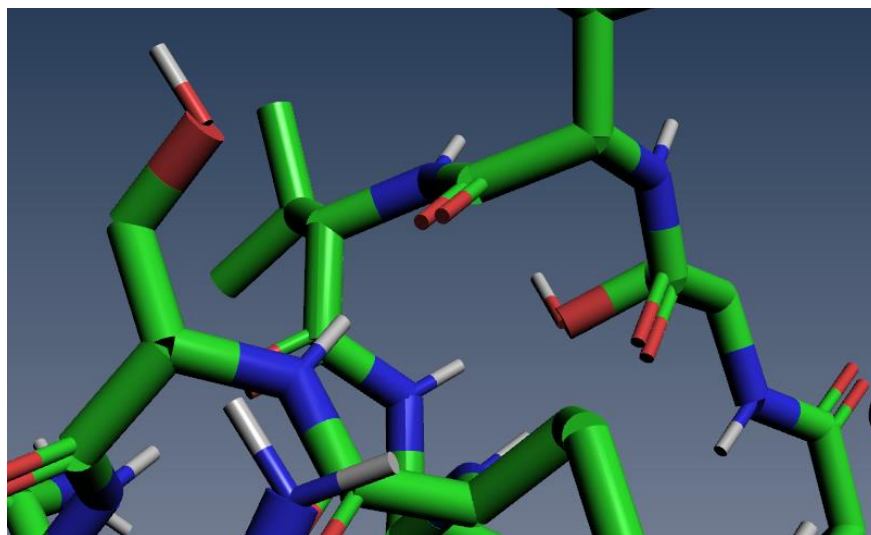
COLLADA ファイルでは、PyMOL 上で球をポリゴンに分割してから出力されます。また、そのポリゴン数を調整できます。ポリゴン数が多くなってしまう場合には、COLLADA ファイルの利用も検討してみてください。詳細は、以降の章で説明します。

## スティック表示の変換について

PyMOL の sticks 表示では、下図のように、原子の結合状態を円筒形状で表現できます。

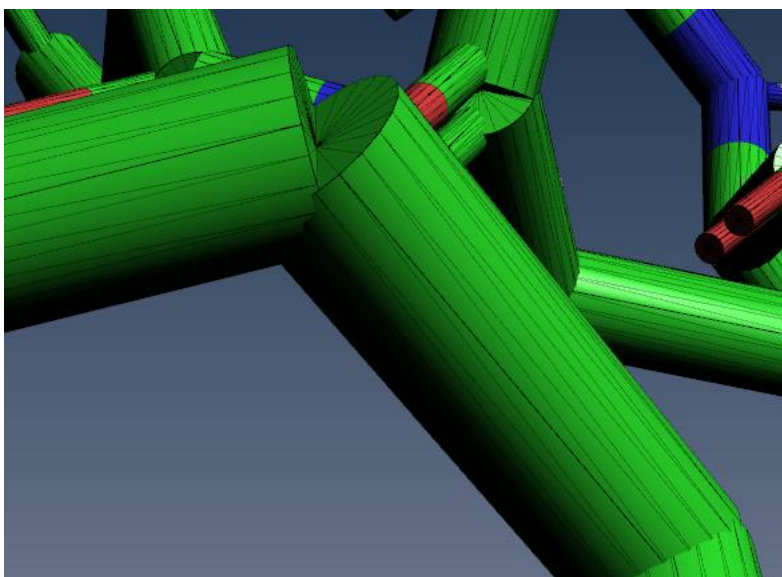


この表示を VRML ファイルに保存し、3D PDF ファイルに変換した結果を以下に示します。



PyMOL 上では、円筒の端点や円筒同士の接合部には、球体が作成され、なめらかに表現するようになっています。VRML ファイルへの出力では、この端点や接合部の球体の情報は出力されません。そのため、3D PDF ファイルでは、図のように、円筒形状のみの表現となります。

また、VRML フォーマットの Cylinder プリミティブで出力され、先に述べた球と同様に、ReportGen で、三角形に分割しています。下図のように、[ソリッドワイヤフレーム]表示を行うと、三角形のポリゴンで構成されているのを見ることができます。ただし、球の変換と異なり、ReportGen の内部で自動的に分割されているため、その分割数を変えることはできません。

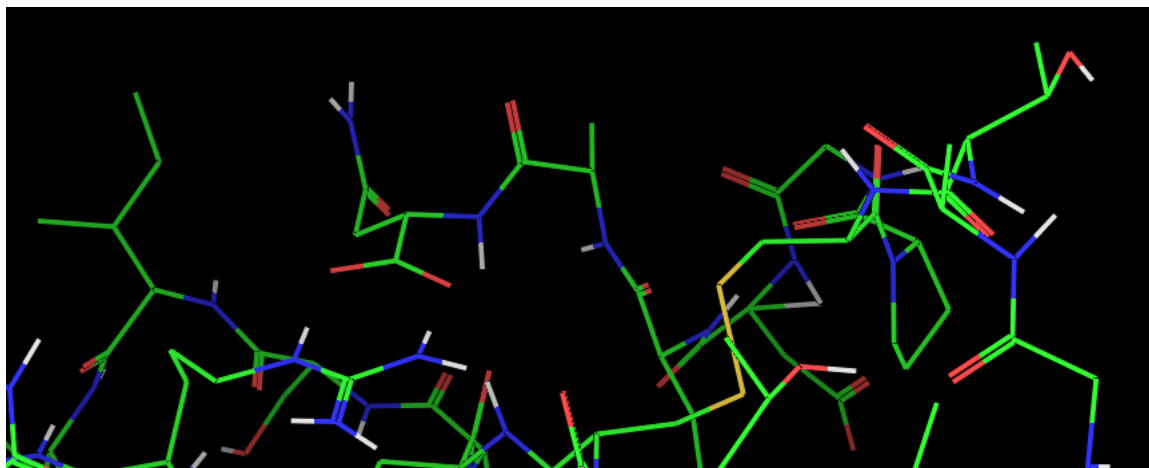


<補足>

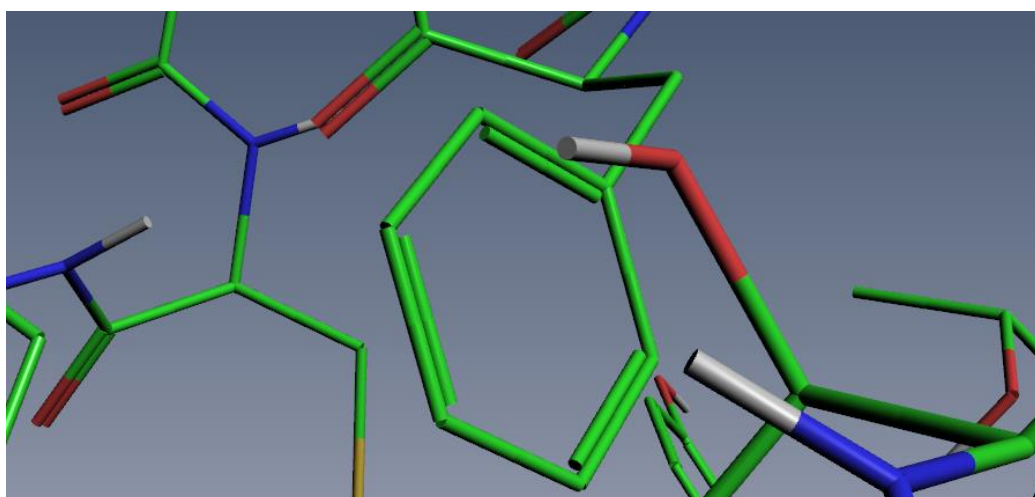
COLLADA ファイルでは、端点や接合部の球形状も出力されます。また、球の出力と同様に、COLLADA ファイルでは、PyMOL 上で円筒をポリゴンに分割してから出力されます。その分割数を PyMOL 上で変更できます。詳細は、以降の章で説明します。

## ライン表示の変換について

PyMOL の lines 表示の結果も前述のスティックと同様に、3D PDF では円筒形状に変換されます。下図は、PyMOL での表示です。



3D PDF ファイルでは、以下のように円筒形状で表現されます。



PyMOL 上のライン幅の設定に応じて、円筒の径が変わります。

スティックの表示と同様に、ReportGen でポリゴン分割されています。(VRML ファイルの出力では、その分割数は変更できません。)

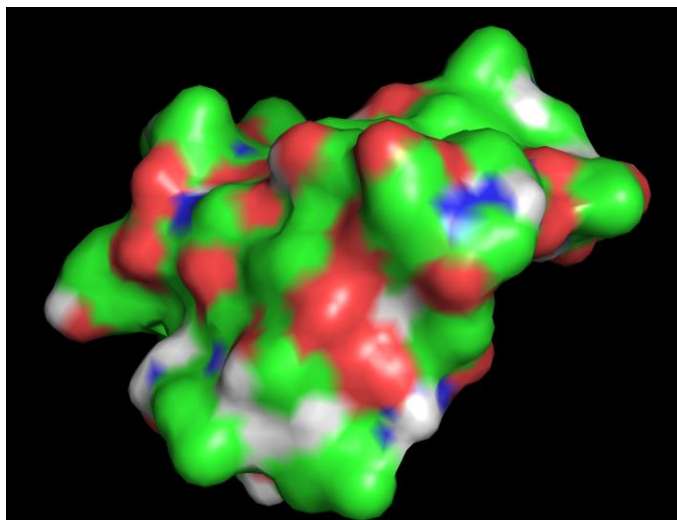
<補足>

COLLADA ファイルの出力でも同様に、円筒形状で出力されます。また、スティック同様、端点や接合部には球形状が出力されます。ポリゴン数も調整できます。

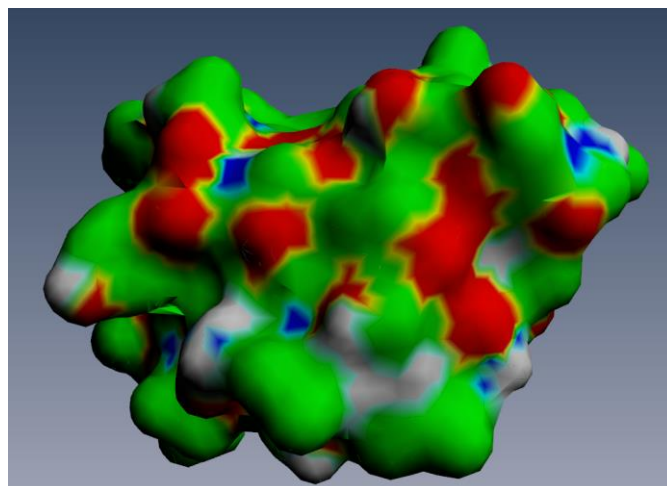
## サーフェス表示の変換について

PyMOL の surface 表示を変換する際には、色の分布が正しく変換できるように、ReportGen の変換パラメータの設定が必要です。

下図は、PyMOL 上の表示です。

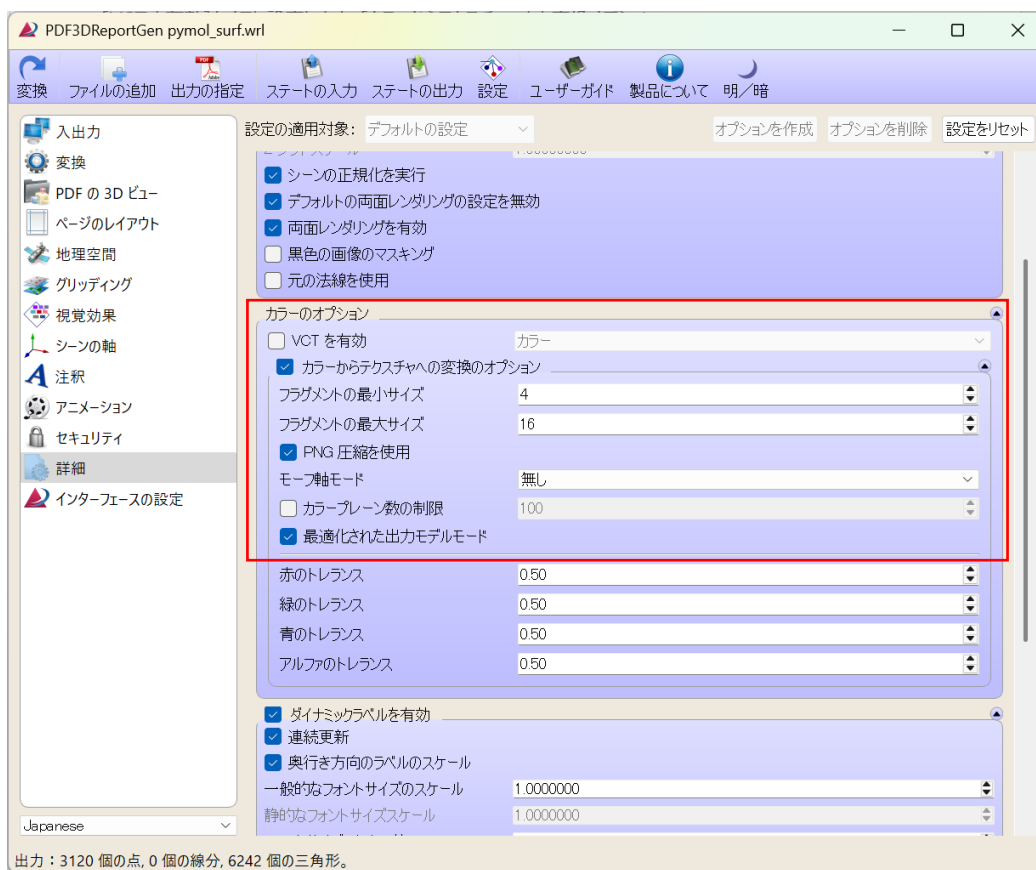


ReportGen では、デフォルトでは、青から赤のレインボー・カラーで変換が行われるため、以下のようなカラー表示となります。

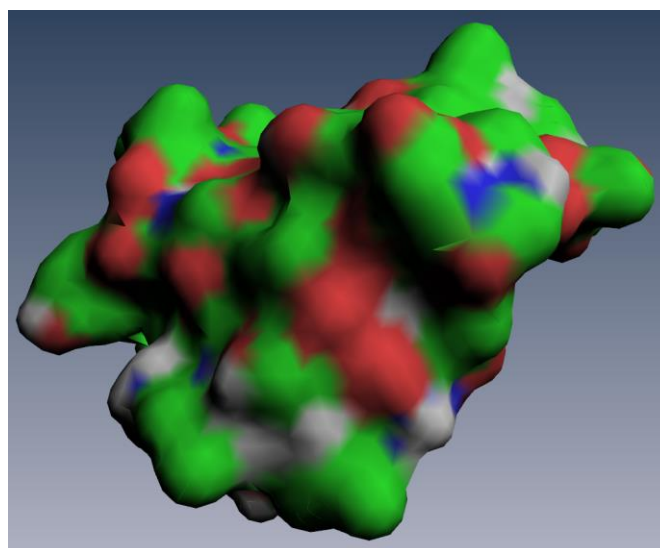


正しく変換するには、[詳細]タブを開き、[カラーのオプション]のパラメータを次のように設定します（下図参照）。

- 1) [VCT を有効]をオフに設定します。
- 2) [カラーからテクスチャへの変換オプション]をオンにします。
- 3) [カラープレーン数の制限]をオフにします。
- 4) [最適化された出力モデルモード]をオンにします。



以下に変換後の結果を示します。

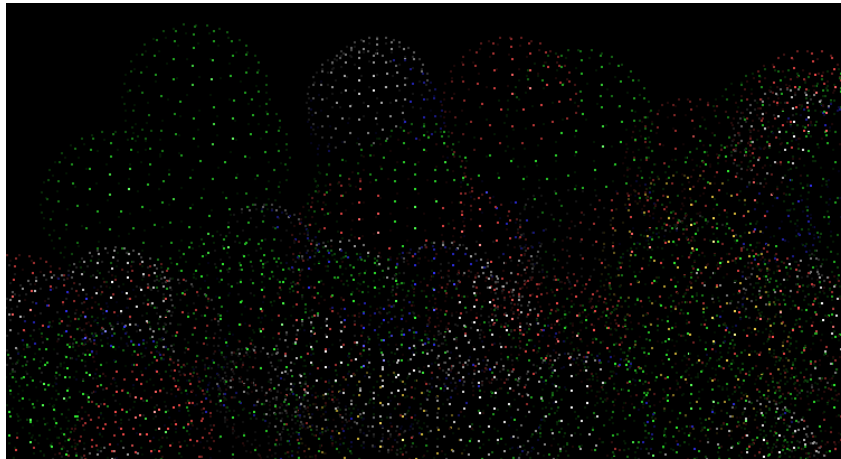


<補足>

この設定は、VRML ファイルの変換に限りません。COLLADA ファイルや glTF ファイルを変換する場合にも、同じカラーの設定が必要です。

## ドット表示の変換について

PyMOL の dots 表示では、spheres 表示の表面をドット（点）で表現したような表示を行うことができます。



この表示は、3D PDF ファイルには変換できません。特に変換処理でエラーが発生するわけではありませんが、VRML ファイル、COLLADA ファイルともに、このドットがすべて球として出力されてしまうため、莫大な数の球を含んだ 3D PDF ファイルとなってしまい、開くことができないファイルができてしまいます。

そのため、ドット表示の変換には利用できません。

## ラベル、アノテーションの変換について

PyMOL 上に表示されたラベルやアノテーションは、VRML ファイル、COLLADA ファイル、glTF ファイルのいずれのファイルの出力にも、その情報が含まれないため、3D PDF には変換できません。



3D PDF 上にラベルを表示するには、Acrobat Reader の 3D 注釈機能を利用してください。

<補足>

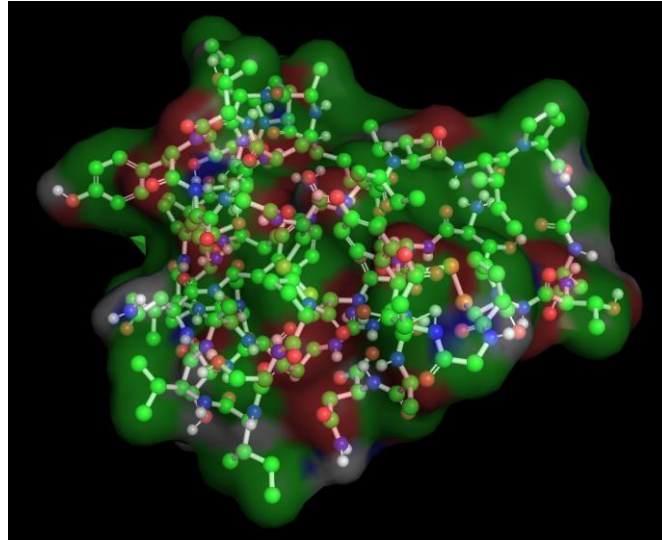
Acrobat Reader の 3D 注釈機能については、VTS ソフトウェア（株）の以下のサポート情報の Web ページで公開しているドキュメントを参照してください。

<https://vts-software.co.jp/supportinfo/support-general/>

『Acrobat Reader の使い方』の「3D 注釈」のセクション」（p.12～）

## 半透明表示の変換について

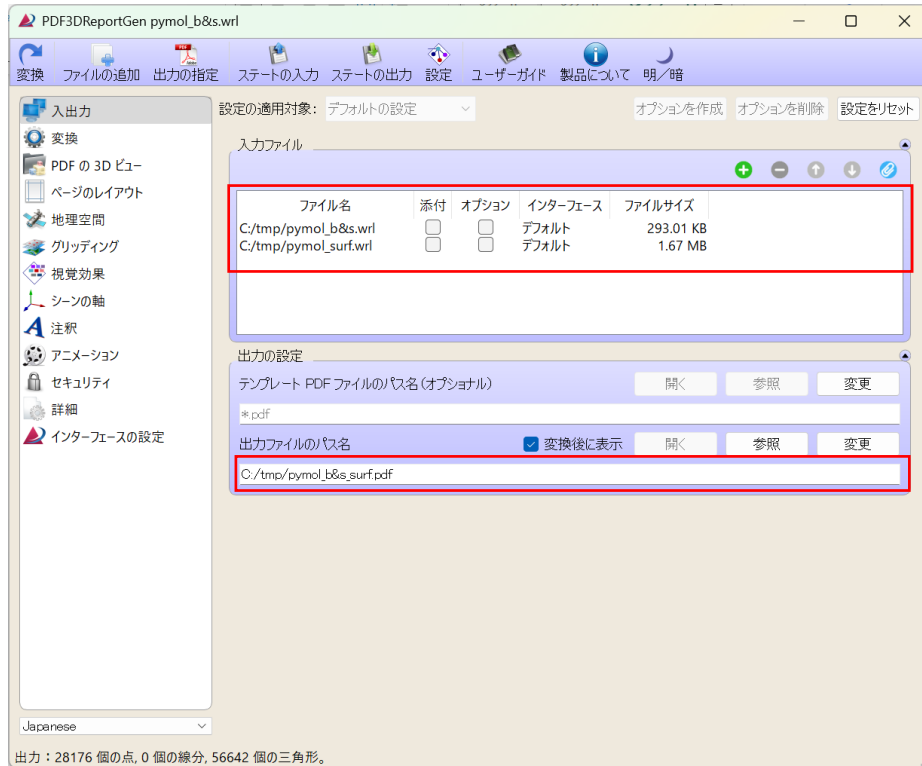
下図は、PyMOL 上で、ボール&スティックと半透明のサーフェース表示を行っています。



残念ながら、VRML や COLLADA、glTF ファイルのいずれの出力でも、この透明度の情報は出力されません。3D PDF ファイル上で、半透明の状態を再現するには、半透明のオブジェクトと不透明のオブジェクトを分けて、2つのファイルに出力してください。例えば、ボール&スティックのみを表示した状態で、`pymol_b&s.wrl` に保存します。次に、半透明のサーフェースのみを表示した状態で、`pymol_surf.wrl` に保存します。

この2つの VRML ファイルを ReportGen で読み込み、サーフェース・オブジェクトに透明度を設定して、変換します。

まず、2つの入力ファイル (`pymol_b&s.wrl` と `pymol_surf.wrl`) を指定します。下図では、出力ファイル名を `pymol_b&s_surf.pdf` としています。



次に、サーフェース・オブジェクトに半透明の設定ができるように、入力ファイル名の横にある[オプション]にチェックします。[インターフェース]がデフォルトから Coin Interface の表示に変わります。

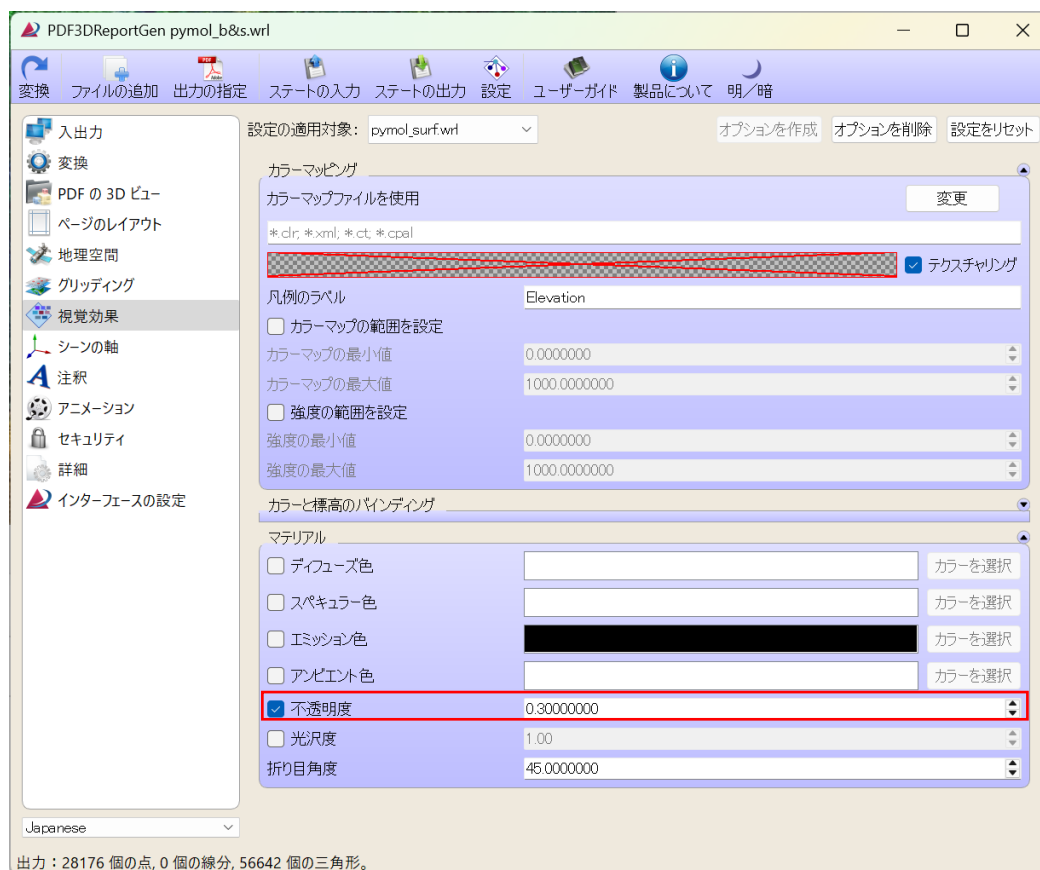


次に、[視覚効果]タブを開きます。

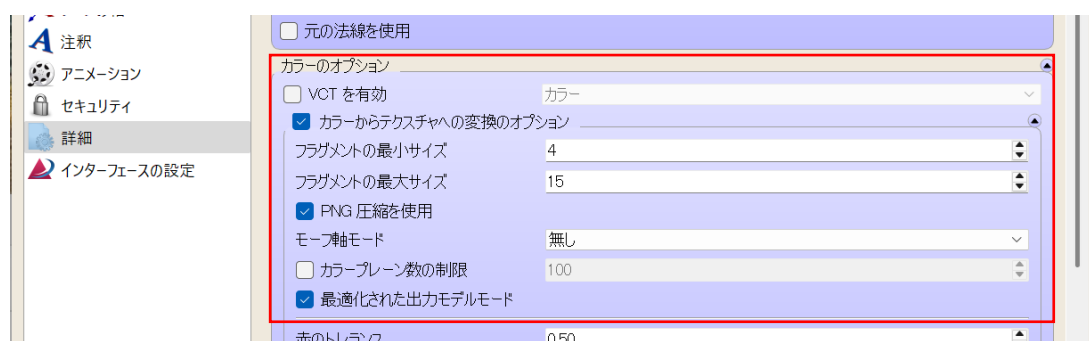
一番上の[設定の適用対象]のプルダウンから、透明度を設定する対象の入力ファイル名の[pymol\_surf.wrl] (この例の場合) を選びます。

[マテリアル]パラメータの[不透明度]に割合 (0 が透明、1 が不透明) を設定します。この例では、0.3 を設定しています。





サーフェースに色付けが行われている場合には、先に述べた[詳細]タブにあるカラーの設定を行ってください。

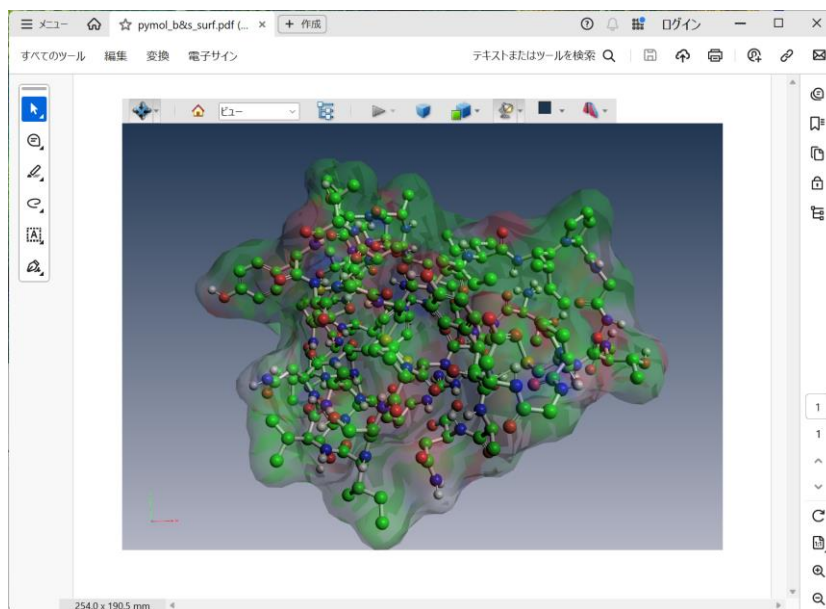


その他、Acrobat Reader の 3D ビューでは、半透明の面の重なりが考慮されないため、面の重なっている部分が暗く表示されてしまう場合があります。

[変換]タブにある[内部フォーマット]をデフォルトの[PRC HCT]ではなく、[U3D RHC]や[U3D]に変更すると、改善される場合があります。



上記設定を行って変換した結果を以下に示します。



## COLLADA ファイル、GTLF ファイルの利用

最初に述べたように、ReportGen で 3D PDF ファイルに変換するには、VRML ファイルの他に、COLLADA ファイル（や glTF ファイル）を利用することもできます。ただし、出力される情報が異なるため、VRML ファイルを利用した場合と比べて、以下の違いがあります。

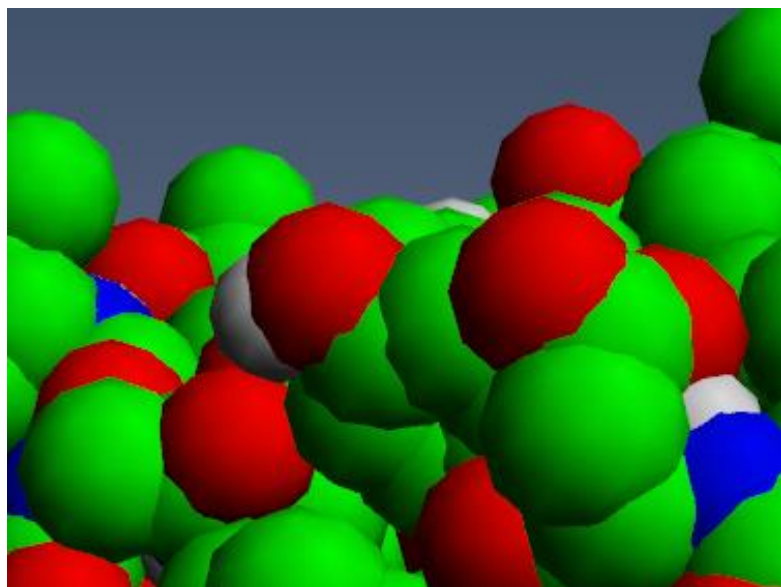
### <補足>

glTF ファイルに出力した場合も、COLLADA ファイルの利用と基本的に同じです。ライトや色の出力に関するフォーマットが異なるため、若干、色合いが異なったものとなります。

### ・球形状の出力

VRML ファイル出力では、球は、VRML フォーマットの Sphere プリミティブとして保存されます。ReportGen で、その Sphere プリミティブを先に述べたようにポリゴン分割した球に変換します。変換時のパラメータで、その分割数を変化させることができます。

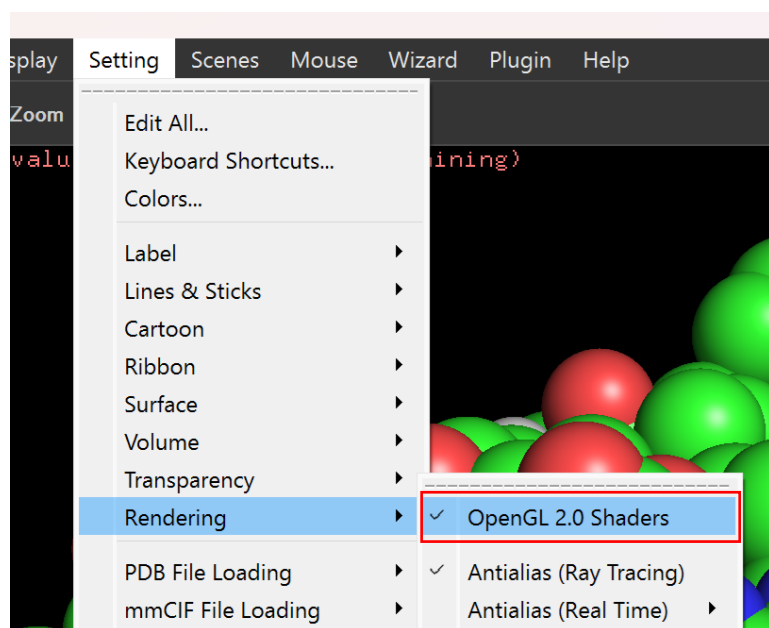
COLLADA ファイル出力では、球プリミティブではなく、PyMOL でポリゴンに分割されて出力されます。以下に、COLLADA ファイルに保存し、3D PDF に変換した結果を示します。



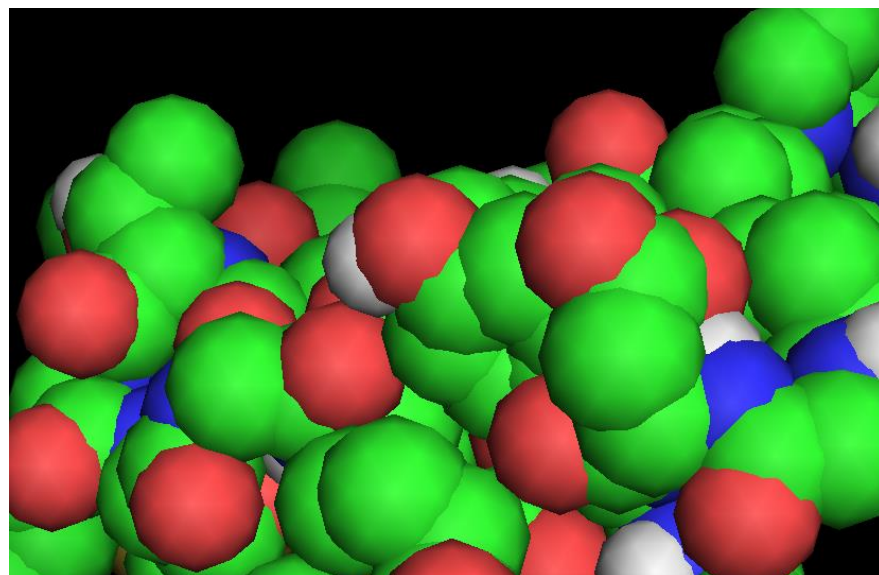
### <注意>

COLLADA ファイルの変換では、VRML ファイルの変換に比べ、その変換時間や 3D PDF ファイルの表示までの時間がかかってしまいます。以降で示す ReportGen の変換パラメータの[アセンブリの深さ]の設定を行うことで軽減することができます。

PyMOL 上でも、この出力されるポリゴン分割された球を見ることができます。PyMOL の[Settings]メニューにある[Rendering]の[OpenGL 2.0 Shaders]をオフにします（選択します）。



球の表示が真球ではなく、ポリゴン分割された球に代わります。



この分割数は、PyMOL 上の球の表示のクオリティで設定できます。

PyMOL のパネル下にある PyMOL > コマンドに、以下のコマンドを入力します。

```
set sphere_quality, 0
```

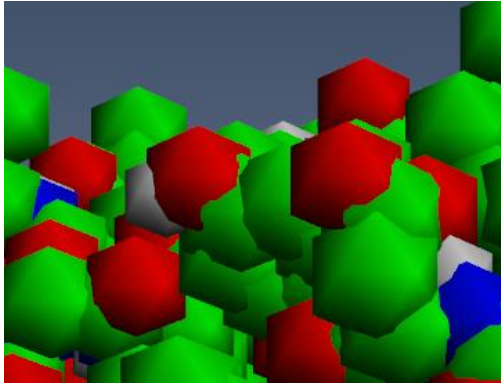
A screenshot of the PyMOL command line interface. The text 'PyMOL > set sphere\_quality, 0' is entered in the command line.

```
PyMOL > set sphere_quality, 0
```

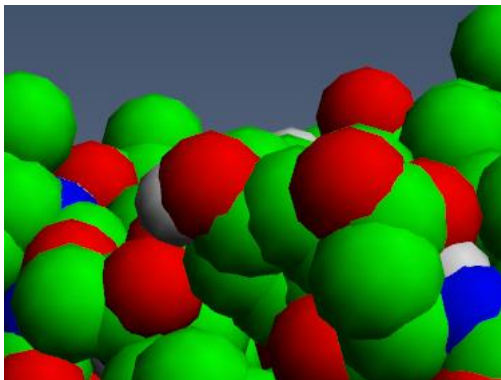
0 から 4 の設定が可能で、0 が一番粗いポリゴンとなります。デフォルトは 1 です。

3 や 4 を設定すると、球がきれいになりますが、ポリゴン数が膨大となります。マシンによっては、COLLADA ファイルの出力に失敗する場合がありますので、0 から 2 の設定を試してみてください。（きれいな球を出力したい場合は、VRML ファイルを利用してください。）

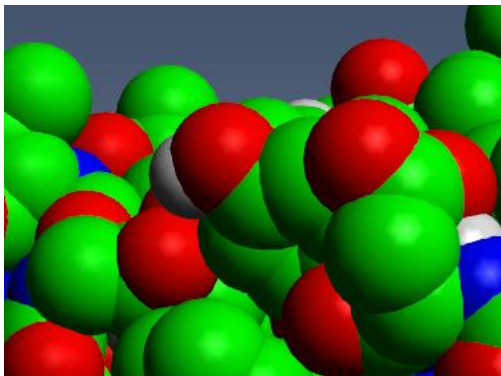
以下に、0, 1, 2 の 3 つのクオリティで出力し、3D PDF に変換した結果を示します。また、テストに利用したデータのポリゴン数を記しています。



クオリティ = 0 (7,920 ポリゴン)



クオリティ = 1 (31,680 ポリゴン)



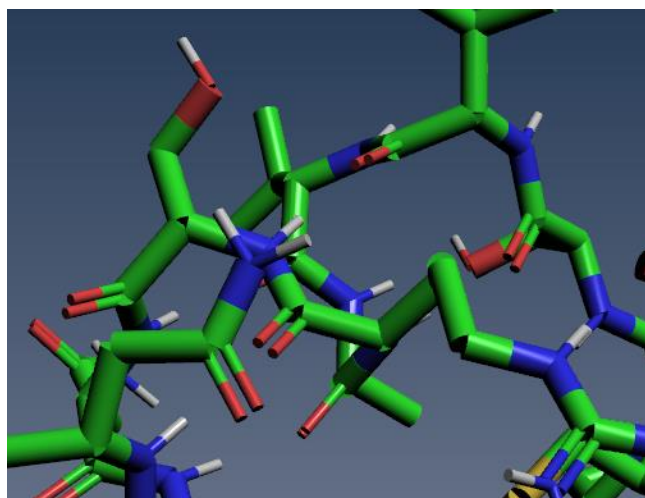
クオリティ = 2 (126,720 ポリゴン)

最初に述べた VRML ファイルの変換では、デフォルトでは 247 万ポリゴンで、球の変換パラメータを 3 に設定した場合には 21 万ポリゴンでした。球の数が多く、パフォーマンスに影響がある場合には、COLLADA ファイルの利用も検討してみてください。

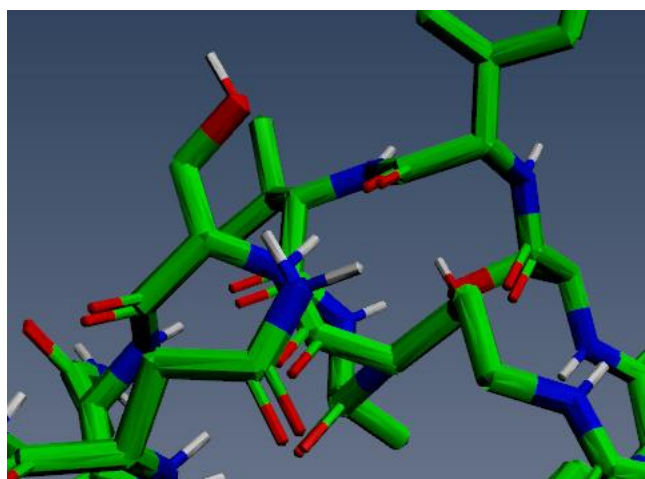
## ・スティック形状の出力

まず、COLLADA ファイルでは、VRML ファイルと異なり、円筒の端点や接合部にもポリゴンが出力されます。

以下に、その違いを示します。



VRML ファイルの変換



COLLADA ファイルの変換

次に、先に述べたように、VRML ファイルでは、Cylinder プリミティブで出力され、ReportGen で変換時に三角形に分割しています。

COLLADA ファイルでは、球の出力と同様に、PyMOL 上で分割されたポリゴンを出力します。

球の出力と同様に、この円筒形状のクオリティも PyMOL 上で設定できます。まず、その状態を見るために、先述の[Settings]メニューにある[Rendering]の[OpenGL 2.0 Shaders]をオフにしてみてください。

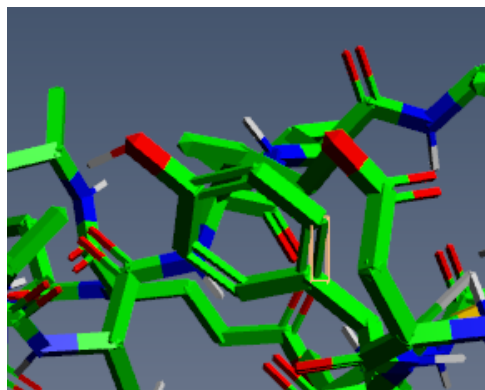
PyMOL のパネル下にある PyMOL > コマンドに、以下のコマンドを入力します。

```
set stick_quality, 4
```

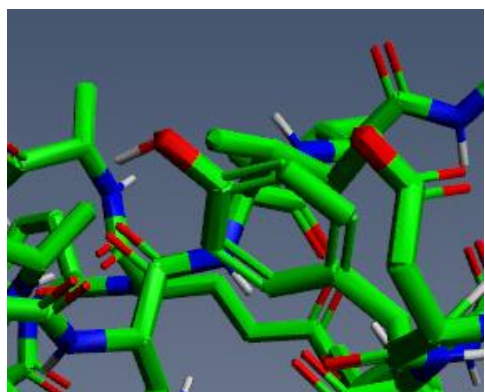
```
PyMOL > set stick_quality, 4|
```

3 から 100 の設定が可能で、3 が一番粗いポリゴンとなります。デフォルトは 8 です。

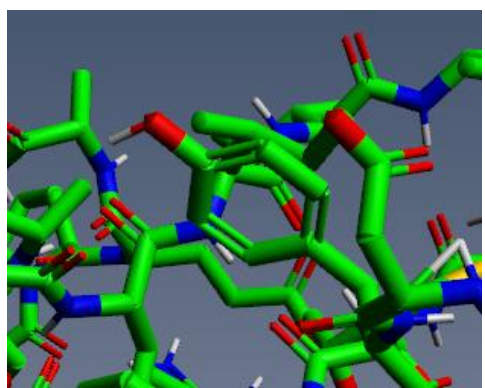
以下に、4, 8, 12 を設定して変換した例を示します。



クオリティ = 4



クオリティ = 8



クオリティ = 12

## ・ラインの出力

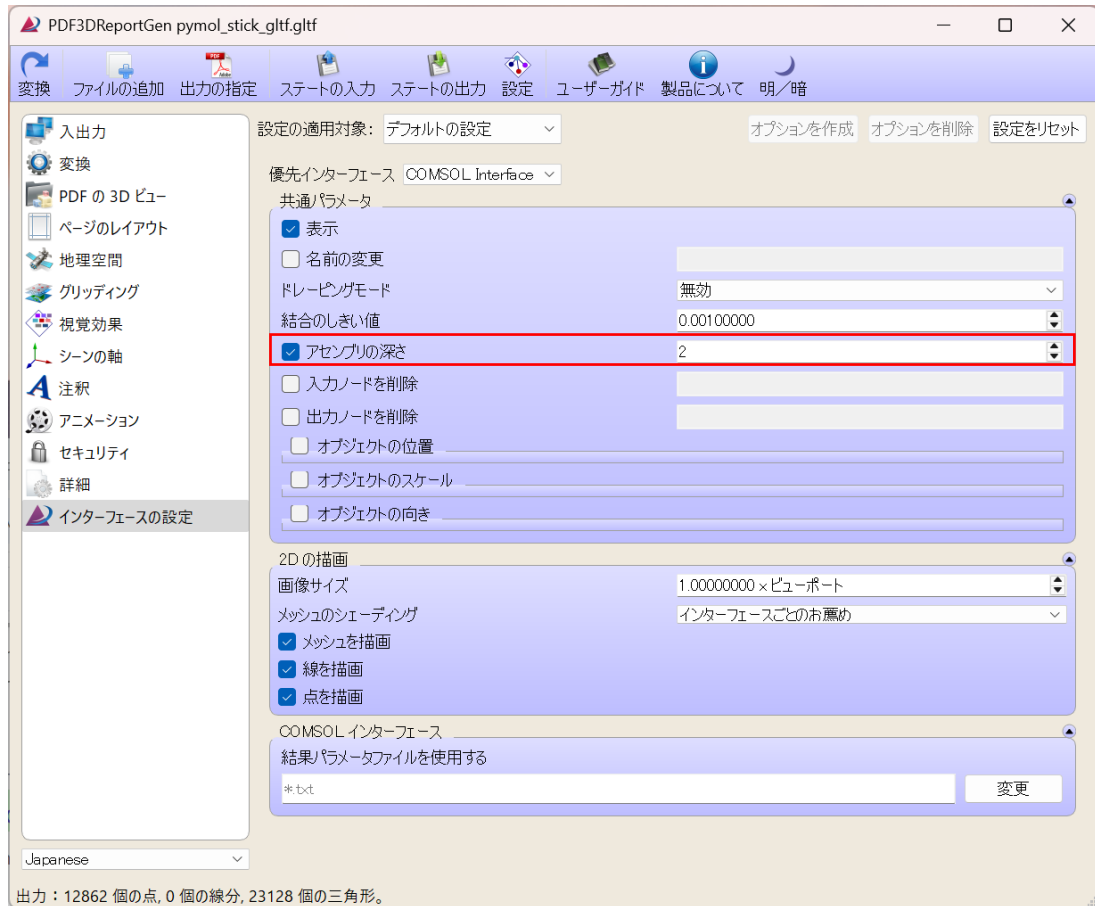
ラインの表示は、先に述べたように、円筒形状で出力されます。COLLADA ファイルの場合には、スティック表示の出力と同様に、その円筒の端点や結合部に球が作成されます。

そのポリゴン数は、先に述べた、スティックのクオリティの設定で変わります。

```
set stick_quality,12 (例)
```

## ・COLLADA ファイルを変換する際のパラメータ設定

COLLADA ファイル（ならびに、glTF ファイル）を変換する場合には、ReportGen の以下のパラメータを設定してください。[インターフェースの設定]タブを開き、[アセンブリの深さ]をオン（チェック）にします。設定値は、デフォルトのまま、2 とします。



このパラメータは、データを構成するオブジェクトの階層構造の深さをマージする機能で、詳細は、『チュートリアル・ガイド』を参照してください。

COLLADA ファイルの出力では、1 つのオブジェクトを複数の領域に分割して処理されます。例えば、1 つの球が 5 つ程度の領域に分割され、その各領域に複数の三角形ポリゴンを持ちます。球オブジェクトの下に複数の領域オブジェクトができ、その領域の中に複数のポリゴン（オブジェクト）ができます。このように、オブジェクトの階層が深くなり、且つ、オブジェクト数が多くなると、パフォーマンスが悪くなります。また、その領域の境界が目立ってしまう場合があります。

そこで、オブジェクトの階層を 1 つにまとめることで、その現象を回避しています。

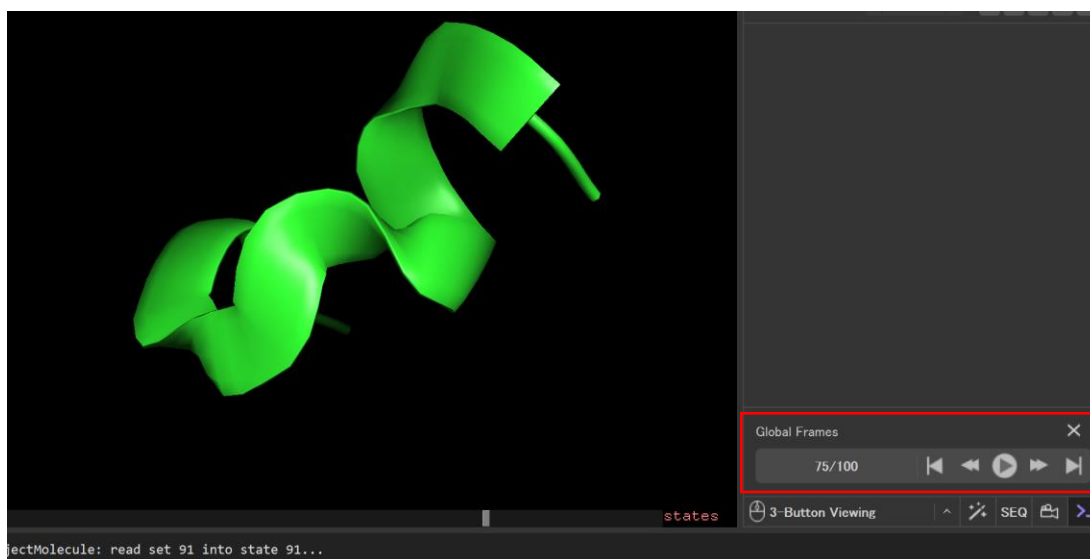


## アニメーションの作成

MD 計算のように時間経過とともに変化するデータのアニメーションを作成することができます。

ReportGen でアニメーションを作るには、時間ステップごとの複数のファイルが必要です。step001.wrl、step002.wrl、step003.wrl のような連番ファイルを作成します。（並びの順番がわかる名前であれば、連番である必要はありません。）

例えば、下図は、PyMOL 上に、トラジェクトリ・データを読み込んだ様子を示しています。



トラジェクトリのデータを読み込むと、[Global Frames]のパラメータが表示され、フレームの移動や再生を行うことができます。

このようにフレームが変化するデータをアニメーションとして変換するには、Python スクリプトを利用します。例えば、次に示すような Python ファイル（c:¥tmp¥out\_vrml.py）を作成します。

```
for inum in range(1, 100, 5):  
    cmd.frame(inum)  
    cmd.save('c:/tmp/step' + format(inum, '03' + '.wrl'))
```

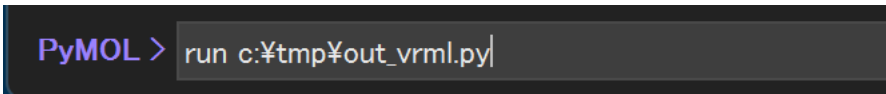
この例では、Python の for 文を利用して、1 から 100 フレームを 5 フレーム飛ばしのループで実行しています。そのフレーム番号を inum に保持します。

cmd.frame()は、PyMOL のフレームを移動するコマンドです。

cmd.save()も PyMOL のコマンドで、拡張子.wrl を指定することで、VRML ファイルに保存します。Python の format 文を利用し、フレーム番号を 3 桁の桁埋め文字列に変換し、c:¥tmp¥step001.wrl といったファイル名を作っています。（フレームの移動ごとに step001、step006 のようにファイル名が変わります。）

この Python ファイルを実行するには、PyMOL のコマンド入力欄に、以下のように run コマンドで指定します。

```
run c:¥tmp¥out_vrml.py
```

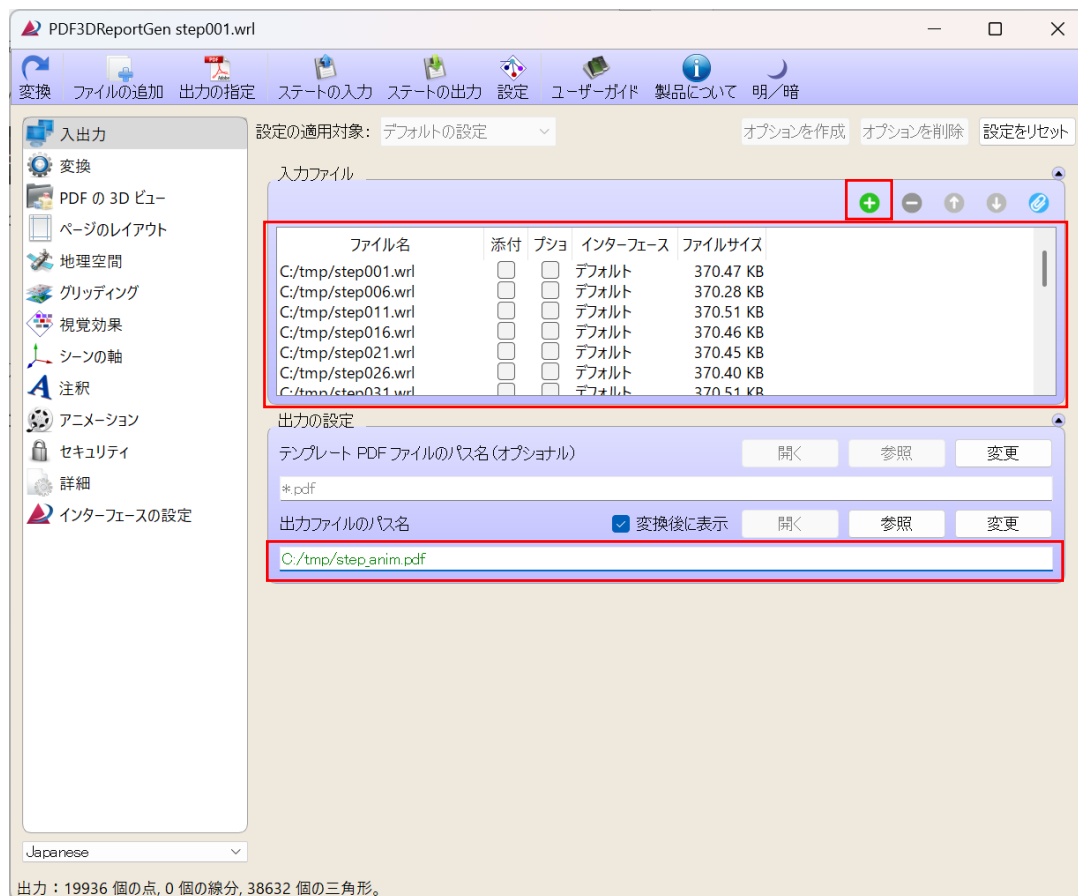


実行すると、この例では、c:¥tmp¥フォルダーに、step001.wrl から step096.wrl の 5 フレーム置きファイルが作成されます。

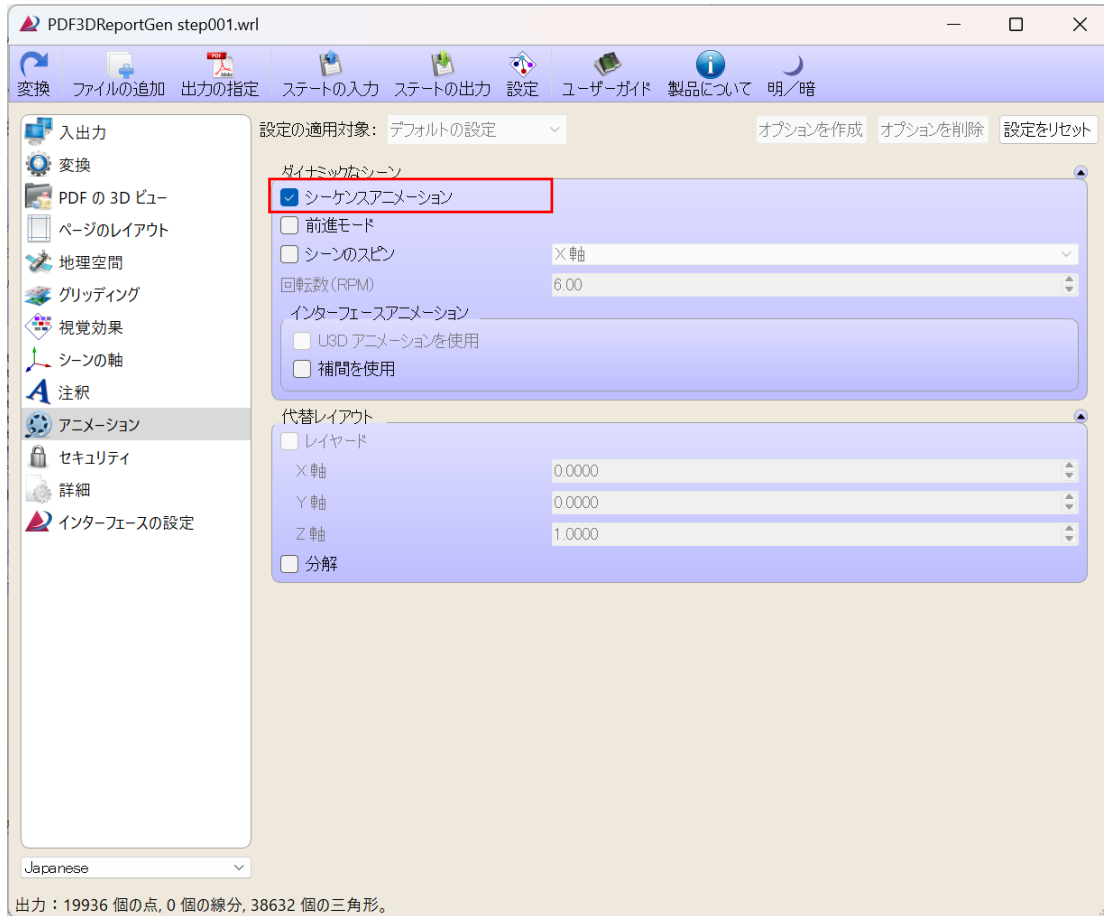
## ReportGen の設定

作成したフレームごとの複数のファイルを入力ファイルに指定します。

+アイコンをクリックし、step001.wrl から step096.wrl のファイル指定しています。(開いたファイル・ブラウザで Shift キーを押しながら、複数のファイルを指定します。) 出力ファイル名も適宜、設定してください。

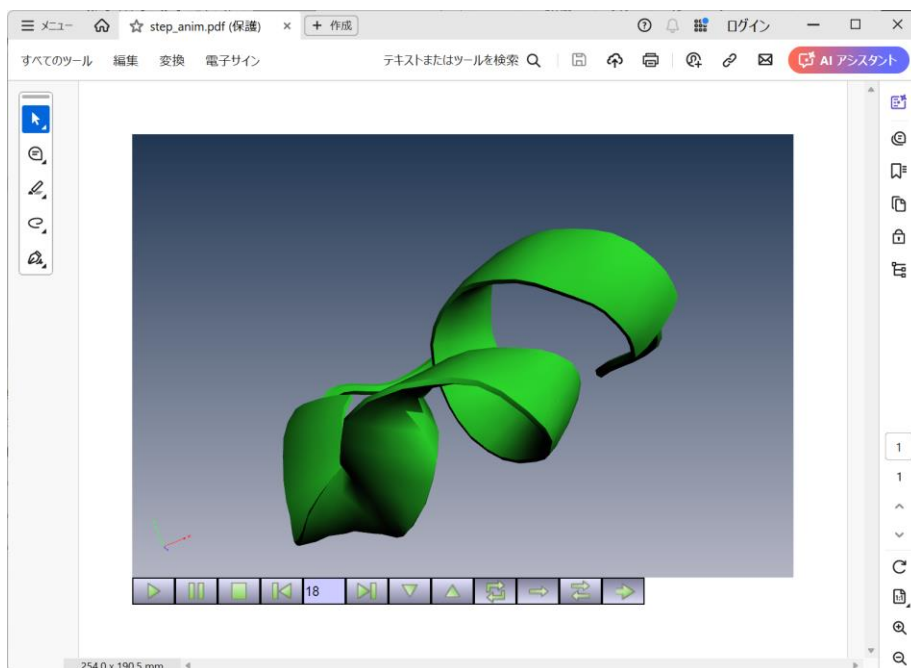


次に、これらの複数のファイルをアニメーションとして変換するには、[アニメーション]タブにある、[シーケンスアニメーション]をオンにします。



[変換]アイコンをクリックし、変換を実行します。

すると、以下のようなフレームの移動や再生ボタンを持った 3D PDF ファイルが作成されます。



<補足>

アニメーションの詳細については、『チュートリアル・ガイド』を参照してください。