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・ブラウザーが開くので、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、gITF 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、 gITF 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。

PDF3DReportGen pymol_cartc	on.wrl			-		×
で 変換 ファイルの追加 出力の指定						
■ 入出力 1	2000 通用対象: デフォルトの設定 - オプション	を作成	オプシ	ョンを削除	設定を	モリセット
🧟 変換	入力ファイル					
🛃 PDF の 3D ビュー			0	00	•	0
ページのレイアウト	ファイル名 添付 プショ インターフェース ファイルサイズ					
≫ 地理空間	C:/tmp/pymol_cartoon.wrl 🗌 デフォルト 1.27 MB					
ジェクリッティンク						
● 倪見効果						
▲ 注釈						
() アニメーション	出力の設定					
1 セキュリティ	テンプレート PDF ファイルのパス名 (オプショナル) 開く		参照	厩	変更	
🚵 詳細	*.pdf					
▶ インターフェースの設定	出力ファイルのパス名 🛛 変換後に表示 開く		参照	R	変更	
	C:/tmp/pymol_cartoon.pdf					
Japanese ~						
有効なライセンスがあります。使用可能	র্বে,					j.

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。

ዾ PC	PDF3DReportGen pymol_cartoon.wrl							_		×	
変換	ファイルの追加	した。 出力の指定	25-トの入力	🕑 ステートの出力		、 ユーザーガイド	していて 製品について	明/暗			
	入出力	N	設定の適用対象:	デフォルトの設定				オプションを作成	オプションを削除	設定をり	ルシット

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。)

≣ x=1- ŵ ☆ pymol_cartoon.pdf (× + ↑1%) ③ ♀ 難 □	コグイン		×
すべてのツール 編集 変換 電子サイン デキストまたはツールを検索 Q 🗍	A 🖨	¢ d	2 🖾
① マルチメディアおよび 3D コンテンツは無効になっています。この文書を信頼できる場合は、この機能を有効にしてください。	プション・	(~JL)) ©
			* □
			ß
			₫
2			
この領域を表示するためには、Adobe Readerなどの3D PDF対応ビューワーが必要です。			
			1
			1
			Ç
			C
			B,
			Ð
254.0 x 190.5 mm 4		Þ	° Q

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。



 	*pdf 出力ファイルのパス名 D:/App/PyMOL-3.1.3_appveyor1638
Japanese 🗸 🗸	
出力:1291192 個の点,0 個の線分,	2471434 個の三角形。

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で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。

₽ PI	DF3DReportGen	pymol_cart	oon.wrl	usia.				<u> </u>	-		×
変換	ファイルの追加	上力の指定	ミ ステートの入力	ステートの出力	設定	ユーザーガイド	製品について	明/暗			
	入出力		設定の適用対象:	デフォルトの設定		~		オプションを作成	オプションを削除	設定を	リセット
Q	変換		一般的な変換の	設定							
-	PDF の 3D ビュー		出力フォーマット				3D PDF				\sim
	ページのレイアウト		内部フォーマット				PRC HCT				\sim
Ż	地理空間		🔽 PRC トレラン	久は相対的							
	グリッディング		PRC トレランス				0.0000100	00000000			•
(視覚効果		メッシュの品質				1.0000000	0			Ť
ť	シーンの軸		テクスチャの品質				0.8500000	0			-
A	注釈		点の置換モード				自動				\sim
	7-1 272		球の置換モード				自動				\sim
0			Pentakis I	求オプション			⊟ ≣// Pentakis				
-	ビキユリティ		ラインの長さ								
	吉丰 秋田		詳細のログ				ダイヤモント 四面体				
	インターフェースの設	定	出力座標系				三角形				
			出力のパラメーム				線分				
				J_h			L Daw				
				x-x							
			SILOHDING	X-9							
Japar	nese	~									
47.	2402 個の占 04	因の線分 /	772 個の三角形								

[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。

	L1 3/1	- 1
球の置換モード	Pentakis ~	
🧹 Pentakis 球オプション		2
最小のサイズ	3	
最大のサイズ	3	

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ています。

[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、NxNx60 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。

サーフェー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。

VTS ソフトウェア(株) 2025年2月14日

🔌 F	PDF3DReportGen pymol_sur	Ewrl —		×
(変換		🖹 🖄 🤣 🚺 🧿		
	入出力	設定の適用対象: デフォルトの設定 / オプションを作成 オプションを削除	設定をり	セット
	変換 PDF の 3D ビュー ページのレイアウト 地理空間	 シーンの正規化を実行 デフォルトの両面レンダリングの設定を無効 両面レンダリングを有効 黒色の画像のマスキング 	•	
3	グリッディング	〇一元の法線を使用		
♥ L A ② @	視覚効果 シーンの軸 注釈 アニメーション セキュリティ 詳細 インターフェーフの設定	カラーのオプション □ VCT を有効 カラー ② カラーからテクスチャへの変換のオプション フラグメントの最小サイズ 4 フラグメントの最大サイズ 16 ③ PNG 圧縮を使用 モーフ弾モード 無し		
		□ カラーブレーン探知時限 100 ■ 最適化された出力モデルモード	Ŧ	
		赤のトレランス 0.50		11
		緑のトレランス 0.50	-	
		青のトレランス 0.50	-	
		アルファのトレランス 0.50		
		 ✓ ダイナミックラベルを有効 ✓ 連続更新 ✓ 奥行さ方向のラベルのスケール 一般的なフォントサイズのスケール 	•	2
Japa	anese 🗸 🗸	静的なフォントサイズスケール 1.0000000	\$	
出力	: 3120 個の点, 0 個の線分, 6	242 個の三角形。		

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 gITF 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。

▲ PDF3DReportGen pymol_b&s	wrl	-	- 🗆 X
で 変換 ファイルの追加 出力の指定	 	i	
📑 入出力	設定の適用対象: デフォルトの設定	を作成 オプションを	削除 設定をリセット
🧟 変換	入力ファイル		۲
🔚 PDF の 3D ビュー		• •	000
ページのレイアウト	ファイル名 添付 オプション インターフェース ファイルサイ	ズ	
🌿 地理空間	C:/tmp/pymol_b&s.wrl 🗌 🗍 デフォルト 293.0	1 KB	
ジリッディング	C:/tmp/pymol_surf.wrl ロデフォルト 1.67	MB	
→ 視覚効果			
人 シーンの軸			
		/ 关照	亦甫
1 E41994		, 397AH	2.C
▲ インターフェースの設定		/ 46.077	
		、	変更
	C:/tmp/pymol_b&s_surt.pdf		
Japanese 🗸			
出力:28176 個の点, 0 個の線分, 5	6642 個の三角形。		

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。

入力ファイル						
					O	C
ファイル名	添付	オプション	インターフェース	ファイルサイズ		
C:/tmp/pymol b&s.wrl			デフォルト	293.01 KB		
C:/tmp/pymol_surf.wrl		\sim	Coin Interfa 🗸	1.67 MB		

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。

VTS ソフトウェア(株) 2025 年 2 月 14 日

🔌 PDF3	3DReportGen pyr	nol_b&s.	wrl						_			×
企 変換 フ		大 力の指定	(1) ステートの入力	きまた。 ステートの出力		 ユーザーガイド	していて) 明/暗				
t 📲 🚺	出力	iii	設定の適用対象:	pymol_surf.wrl		~		オプションを作成	オプションを肖	除	設定をし	ルマット
👰 変換	奥		カラーマッピング									
PDF	F の 3D ビュー		カラーマップファイ、	↓を使用						変	更	
-~ ~-	ジのレイアウト		*.clr; *.xml; *.ct	; *.cpal								
🌋 地理	里空間									⊿ テク:	スチャリン	אין
	ッディング		凡例のラベル			Elevation						
🥶 視覚	覚効果		🗌 ภิวิ–マップต	範囲を設定								
レシー	ンの軸		カラーマップの最小	「値		0.0000000						\$
人 注釈	尺		カラーマップの最大	大値		1000.0000000						÷
די 😥 ד=	メーション		🗌 強度の範囲	を設定								
🗎 t‡	コリティ		強度の最小値			0.0000000						÷
▲ 詳約	æ		強度の最大値			1000.0000000						•
AV 🖉	ターフェースの設定		カラーと標高のパ	インディング								
			マ テ リアル									-
			🗌 ディフューズ包	2						カラ	ラーを選	択
			🗌 スペキュラー管	<u> </u>						カラ	ラーを選	択
			□ エミッション色							カラ	ラーを選	択
			□ アンピエント色	2						カラ	ラーを選	択
			🔽 不透明度			0.30000000						\$
			□ 光沢度			1.00						¢
			折り目角度			45.0000000						•
Japanese	e	~										
出力:28	176 個の点,0 個の	の線分,50	6642 個の三角形。									

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。

A 注釈	□ 元の法線を使用		
😧 דבא-צבע	カラーのオプション		
	□ VCT を有効	hラー ~	
	, ☑ カラーからテクスチャへの変換のオプシ	εν (2
	フラグメントの最小サイズ	4	
▶ インターフェースの設定	フラグメントの最大サイズ	15	
	✓ PNG 圧縮を使用		
	モーフ軸モード	無し ~	
	□ カラープレーン数の制限	100	
	✓ 最適化された出力モデルモード		
	赤のトレランス	050	

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。

🛃 F	PDF3DReportGen pymol_b&s	s.wrl	_	
~ 変換		👔 🔥 🐼 🎺 ニ ステートの入力 ステートの出力 設定 ユーザーガイド 製品	〕 について 明/暗	
	入出力	設定の適用対象: pymol_surf.wrl V	オプションを作成 オプションを削除	設定をリセット
Q	変換	一般的な変換の設定		
	PDF の 3D ビュー	出力フォーマット 30	D PDF	\sim
	ページのレイアウト	内部フォーマット しい	13D RHC	\sim
1	地理空間	PRCトレランスは相対的		
-	グリッディング	PRO トレランス 0.0	00001 000000000	×
-	視覚効果	メッシュの品質 1.0	0000000	÷
1	シーンの軸	テクスチャの品質 0.8	8500000	\$
A	注釈	点の置換モード自	3重力	~
6.2	アニメーション	球の置換モード	3重力	~
A	セキュリティ	Pentakis \$K779939		
100	詳細	ラインの長さ 1.0	0000000	Ŧ
	インターフェースの設定		」ログをファイルに保存	
		出力座標系		۲
		出力のパラメータ		۲
		gITFの出力パラメータ		۲
		STLの出力パラメータ		۲
Japa	anese 🗸			
出力	: 325093 個の点, 0 個の線分,	593889 個の三角形。		

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>

gITF 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

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もありますので、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。





$$77971 = 0 (7,920 \text{ MyJ})$$

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。



・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。

2 F	▲ PDF3DReportGen pymol_stick_gltf.gltf									
で変換		ピ で ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・								
	入出力	設定の適用対象: デフォルトの設定 ✓ オプションを作成 オプションを削除	設定をリセッ	ト						
◎ ■ ≫ 人 4	変換 PDF の 3D ビュー ページのレイアウト 地理空間 グリッディング 視覚効果 シーンの軸 注釈	優先インターフェース COMSOL Interface × 共通パラメータ ② 表示 ○ 名前の変更 ドレーピングモード 無効 結合のしまい値 0.00100000 ② アセングリの深さ 2 ○ ハカノードを削除 ○ いたっと ###WW00	~ •							
	アニメーション	□ 出力ノードを削除								
	セキュリティ									
	ヰーキャー インターフェースの設定	□ オブジェクトの向き								
		2Dの描画	(
		画像サイズ <u>1.00000000 × ビューポート</u>	\$							
		メッシュのシェーディング インターフェースごとのお薦め	~							
		 ✓ 線21曲画 ✓ 点を描画 								
		COMSOL インターフェース 結果パラメータファイルを使用する	(
		*bt	変更							
Japa	anese									
出力:12862 個の点, 0 個の線分, 23128 個の三角形。										

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:\u00e4tmp\u00e4out_vrml.py

```
PyMOL > 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フレーム置きのファイルが 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のファイルを指定しています。(開いたファイル・ブラウザ ーで 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。

2	∠ PDF3DReportGen step001.wrl								×			
6			(Å)	1	((P	Û)				
変務	き ファイルの追加	出力の指定	ステートの人力	ステートの出力	設定	ユーザーガイド	製品について	明/暗				
	入出力	i	設定の適用対象:	デフォルトの設定		~		オプションを作成	オプション	を削除	設定	をリセット
	変換		、入力ファイル _									
	PDF の 3D ビュー								0	•	0	0
	ページのレイアウト		771	(ル名	添付	プショ インターフェ	└─ス ファイルサ	·1ズ				
Ż	地理空間		C:/tmp/step00)1.wrl		🔲 デフォルト	370.47	KB				
1	グリッディング		C:/tmp/step00 C:/tmp/step01)6.wrl 1.wrl	\square	デフォルト デフォルト	370.28 370.51	3 KB KB				
	▶ 視覚効果		C:/tmp/step01	6.wrl	Ŏ	デフォルト	370.46	KB				
	、 シーンの軸		C:/tmp/step02 C:/tmp/step02	21.wrl 26.wrl		 デフォルト デフォルト 	370.43) KB				
A	【注釈 】 == / 、、、、			R1 wirl		<u> デ</u> フォルト	370.51	KR				
50	クアニメージョン レート・レート		出力の設定		() 0.				(2.070			<u> </u>
	セキュリテイ		テンプレート PD	トファイルのバス名	(オブショ	ョナル)		開く	参照		変更	
		~ —	*.pdf									
	(インターノエースの影	χ.E	出力ファイルのパ	に名		<u> </u>	変換後に表示	開く	参照		変更	<u> </u>
			C:/tmp/step_a	nim.pdf								
Jap	canese	~										
出力	出力:19936 個の点, 0 個の線分, 38632 個の三角形。											

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。

VTS ソフトウェア(株) 2025 年 2 月 14 日

/ 🖉 F	▲ PDF3DReportGen step001.wrl								
で変換		10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10							
1	入出力	設定の適用対象: デフォルトの設定 · オプションを作成 オプションを削除	設定をリセット						
Q	変換	ダイナミックなシーン							
	PDF の 3D ビュー	✓ シーケンスアニメーション							
	ページのレイアウト								
Ż	地理空間								
3	グリッディング	回単長文((PPM) 0.00 インターフェースアーメーション	•						
	視覚効果	USD アニメーションを使用							
1	シーンの軸	□補間を使用							
A	注釈	代表レイアウト							
52	アニメーション								
	セキュリティ	×軸 0.0000							
		Y軸 0.0000	×						
	1フターフエースの設定	Z軸 1.0000							
		□ 分解							
Japa	Japanese V								
出力	: 19936 個の点, 0 個の線分, 3	28632 個の三角形。	-						

[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。