

生体分子シミュレーションの拡張現実型提示

○森下 裕介、北原 格、大田 友一

筑波大学 大学院システム情報工学研究科 知能機能システム専攻
(〒305-8573 茨城県つくば市 天王台 1-1-1)

【1.はじめに】

たんぱく質や核酸といった生体分子の機能解析は、病気の治療法や新薬の開発、食料や有用物の生産などの様々な分野へ応用が期待される研究テーマである[1]。生体分子の機能解析では、生体分子の構造を正確に把握することが必要である。例えば、たんぱく質同士の作用の様子から、その機能を解析する際、たんぱく質の組み合わせによって決まった反応経路や箇所 [2]の観察が重要となる。

従来、生体分子の構造把握には、構造解析ソフトウェアによってディスプレイ上に表示された3次元モデルをキーボードやマウスなどを用いて操作・観察する作業により行われている。解析対象となる生体分子の構造が複雑になるに伴い、3次元モデルの構造を正確に把握するためには一定の熟練が必要である。Pavlovic[3]らは声と手を用いた操作支援システムを提案したが、操作に一定の制約が存在する上に、依然として熟練が必要なものである。

本研究では、現実世界に仮想空間の情報を重畳提示する拡張現実感 (Augmented Reality : AR) を用いて、生体分子の3次元モデルを提示することで、その構造把握を支援する手法を提案する。提案手法では、ビジュアルマーカ上に拡張現実型提示された生体分子シミュレーションの様子を様々な角度から観察することで、生体分子の構造把握を助けることを期待している。以下、提案手法の概要を説明する。

【2.手法】

本研究で提案するシステムは、図1に示すように、大きく、生体分子データ生成部、CGモデリング部、拡張現実型提示部から構成される。

2.1 生体分子データ生成部

本システムは、Protein data Bank[4]から取得した生体分子の3次元データを構造解析ソフトウェア Visual Molecular Dynamics 以下 VMD [5]を用いて提示・観察することを想定している。VMDで生成された生体分子の3次元情報をVRML形式[6]に変換し、ファイルに出力する。

2.2 CGモデリング部

2.1節で出力されたVRMLファイルで記述された生体分子モデルをOpenGLを用いて描画するために、提示する全てのVRMLファイルを読み込み計算機のメモリに格納する。それらの情報をもとに、3次元仮想空間においてOpenGL関数を用いて生体分子のCGモデルを描画する。

2.3 拡張現実型提示部

カメラで撮影した映像中からビジュアルマーカを検出し、それをトラッキングすることによりカメラの位置姿勢を推定し、マーカ上に生体分子のCGモデルを重畳提示する。

生体分子を拡張現実型提示するにあたり、図2で示すようにモデルの位置はビジュアルマーカと重ならないように、ビジュアルマーカの上部にする。また、3次元モデルの姿勢は、VMD上で表示されている生体分子の座標系とビジュアルマーカとの座標系を一致させ、表示切り替えの可能な座標軸をビジュアルマーカ上に表示する。

2.4 生体分子シミュレーション表示手法

従来の生体分子の研究では、時間的に連続的な複数の3次元モデルを時系列に切り替えるアニメーション機能を用いて、物質や薬品が分子の構造に作用する様子を観察している。反応を詳細

に観察する際には、連続する生体分子モデルをコマ送り再生して、少しずつ動かしながら観察するのが一般的である。本システムにおいても同様のアニメーション機能を実現する。

VMD 上で行われた生体分子シミュレーションを構成する複数の3次元モデルを、時刻毎にVRMLファイルとして出力する。提示前に、あらかじめそれら全てのVRMLファイルを読み込み、計算機のメモリ上に格納する。実際に提示処理を行う際には、読み込んだモデルをビジュアルマーカ上で時刻毎に切り替え、それを拡張現実型提示するによりアニメーション表示機能を実現する。

前述したように、生体分子の機能解析をする際は、アニメーションをコマ送り再生にするか、もしくは、比較的低いフレームレート(速くても毎秒2フレーム)のアニメーションを観測する、本システムでも、キーボード入力により、前後のフレームへの切り替え可能なコマ送り機能を実現している。

【3.結果】

本研究では、従来のディスプレイ上でキーボードやマウスを用いた生体分子の構造把握に一定の熟練を要するといった問題に対して、より直感的な操作で生体分子の構造やシミュレーションの把握を可能にする手法を提案した。

提案システムでは、拡張現実感技術を用いてビジュアルマーカ上に生体分子シミュレーションの様子を可視化し、カメラやビジュアルマーカを把持して動かすことで、自由な視点からの観察を可能とし、生体分子シミュレーションの支援を実現した。

実際に生体分子を扱う研究者に使用してもらったところ、自由な視点から生体分子を観察できるため構造把握しやすいといった意見が得られた。

【4.参考文献】

- [1] Ogawa, Kana, et al. "DOCK5 functions as a key signaling adaptor that links FcεRI signals to microtubule dynamics during mast cell degranulation." *The Journal of experimental medicine* 211.7 (2014): 1407-1419.
- [2] 栗栖源嗣. "タンパク質相互作用を見る." *光合成研究* 19.1 (2009): 31-34.
- [3] Pavlovic, Vladimir I., Rajeev Sharma, and Thomas S. Huang. "Gestural interface to a visual computing environment for molecular biologists." *Automatic Face and Gesture Recognition, 1996., Proceedings of the Second International Conference on.* IEEE, 1996.
- [4] PDB, <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- [5] Humphrey, William, Andrew Dalke, and Klaus Schulten. "VMD: visual molecular dynamics." *Journal of molecular graphics* 14.1 (1996): 33-38.
- [6] Carey, Rikk, and Gavin Bell. *The annotated VRML 2.0 reference manual*

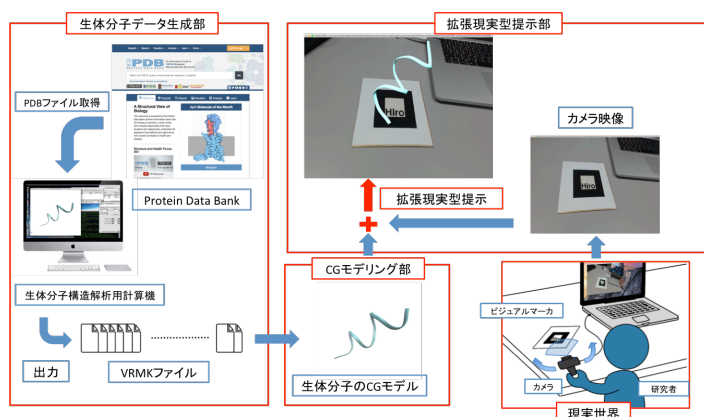


図1 システムの概要図



図2 拡張現実型提示