

AI 予測同期制御技術を用いて対象を自然に操作できる VR 共創環境を目指して

小長谷明彦^{1,a)} Gutmann Gregory Spence^{1,2} 葛谷明紀³ 角五彰⁴

概要 : 2020年7月より始動した, 合同会社分子ロボット総合研究所, 関西大学および北海道大学が参画するNEDOプロジェクト「AIとVRを活用した分子ロボット共創環境の研究開発」において開発中の「VR共創環境」について, その構想と現状について報告する. VR共創環境は2016年8月から2020年3月まで続いたNEDOプロジェクト「次世代人工知能・ロボット中核技術開発/革新的ロボット要素技術分野/生体分子を用いたロボットの研究開発」の一環として東京工業大学小長谷研究室において開発した「ネットワーク型VRシミュレーション」を基盤技術としている. 大規模VRシミュレーションをサーバー上で実行し, ネットワークを介して多地点で共有することにより, 分子ロボットの部品設計を加速化することを開発目標としている. また, AI予測同期制御技術を用いることでネットワーク遅延が生じても自然な操作ができることを特徴としている. 本稿では, VR共創環境の基本構想と将来的な応用の可能性について紹介する.

キーワード : VRシミュレーション, 予測同期, 分子ロボット, DNAオリガミ

Toward Co-creation VR Environment Capable of Natural VR Object Operation with AI Predictive Synchronization Technology

AKIHIKO KONAGAYA^{1,a)} GUTMANN GREGORY SPENCE^{1,2}
AKINORI KUZUYA³ AKIRA KAKUGO⁴

Abstract: This paper describes the concept of “Co-creation VR Environment” which has been under development by Molecular Robotics Research Institute, Ltd., Kansai University and Hokkaido University in the NEDO project since 2020 July. The Co-creation VR environment is a successor project of the network-based VR environment which was developed in Konagaya Laboratory of TITECH as a part of the NEDO “Artificial Molecular Muscle” project started in 2016 fiscal year. The Co-creation VR environment aims to develop multiple-user VR environment in which users can share large-scale VR simulation necessary for the design of molecular robot parts such as DNA origamis. AI predictive synchronization technology plays an essential role to achieve natural VR object operations without feeling network delay. The technologies are so general that the Co-creation VR environment can be applicable to various remote works other than molecular robot design.

Keywords: VR Simulation, Predictive Synchronization, Molecular Robot, DNA Origami

1. はじめに

コロナ禍により, ZOOMをはじめとしてネットワーク会議やテレワークのためのIT技術が注目を集めている. ネットワーク会議はすでに日常となりつつあるが, ネットワーク会議だけで全ての仕事が済むわけではない. また, ビデオやチャットによるコミュニケーションの限界も明らかになりつつある. より進んだ環境として, クラウド型の仮想現実(VR)を用いたアバターの制御や遠隔ロボットの研究が精力的に進められている[1]. しかしながら, 既存のVRプラットフォームでは遠隔操作のオーバーヘッドが大きく, 遠隔の対象を自然に操作し, 多地点で違和感なく共同作業を実施できるようなVR環境は未だ確立したとは言い難い.

VRによる多地点での共同作業の実現が困難な理由はいくつかあるが, 最大の課題はネットワークを介することに

起因する遠隔操作の遅延問題である. 近年, ギガビット毎秒(Gbps)の転送性能を持つ光通信ネットワークの普及により, ネットワーク転送速度に起因する伝送遅延問題はかなり解決されつつある. 通常, VRヘッドセットを利用したVR映像の表示には2Kあるいは4K相当の解像度のイメージデータを90フレーム/秒(fps)で左右二枚にレンダリングする必要がある. したがって, 理論上は12Mbps程度のネットワーク転送速度を常時確保できればVRレンダリング処理は可能となる. また, GPUの著しい性能向上によりPCやノートPCでもVRレンダリング処理は可能であり, 応用によってはネットワーク間でのデータ転送量のさらなる軽減が可能である. また, スマートフォンの描画性能の向上も著しく, 次世代通信網を使ったVR共創環境においては主要なVRデバイスの一つとなることが期待されている.

1 合同会社 分子ロボット総合研究所
Molecular Robotics Research Institute, Ltd., Yokohama 226-8510, Japan

2 東京工業大学
TITECH, Yokohama 226-8503, Japan

3 関西大学
Kansai University, Osaka 564-8680, Japan

4 北海道大学
Hokkaido University, Sapporo 060-0810, Japan

一方、ネットワーク応答速度に起因する伝搬遅延問題は、単に、ネットワーク転送性能が早くなれば解決する問題ではなく、光通信ネットワークや次世代通信ネットワークが整備されても、計算機間でパケットを送受信するために必要な伝搬遅延をなくすことは原理的に困難である。一般に、インターネットを利用したオンラインゲームでは、ネットワーク性能としてネット回線速度 30~100Mbps, ping 値(30~50ms)を推奨している。ここで、ping 値とはローカルにある計算機からリモートにある計算機にむかって ping コマンドを発行したときの返答までの待ち時間であり、何も遠隔で処理をしないときの伝搬遅延時間とみなすことができる。格闘ゲームのように相手との相互作用が必要なゲームでは ping 値は 15ms 以内であれば操作のラグ(遅延)の発生は抑えられ、利用者の意図を反映した遠隔操作が期待できるという。VR 共創環境では、VR カメラを用いて利用者の手の動きを VR 上の仮想ハンドに反映させて VR 上の対象物を操作する。この場合、利用者の手の動きに対する仮想ハンドの動きの遅延を 1 から 2 フレーム程度の時間内(11~22ms)に抑えることができないと、利用者にとって自然な操作にならないことを示唆している。本稿では、AI 技術を活用することにより、実際のネットワーク伝搬遅延時間が大きくても、利用者がその遅延を意識せずに仮想空間上の対象を操作できる AI 予測同期制御技術を用いた VR 共創環境について述べる。

本稿の構成は以下の通りである。2 節では、本プロジェクトが目標とするクラウド型 VR 共創環境の構想について述べる。次に、3 節において、VR 共創環境で利用可能な大規模 VR シミュレーション技術について、4 節において、自然な対象操作を可能とする AI 予測同期制御技術について述べる。そして、5 節において、これらの技術を活かした VR 共創環境の応用について紹介し、6 節で本稿のまとめを記す。

2. クラウド型 VR 共創環境

VR 共創環境は 2016 年 8 月から 2020 年 3 月まで続いた NEDO プロジェクト「次世代人工知能・ロボット中核技術開発/革新的ロボット要素技術分野/生体分子を用いたロボットの研究開発」の一環として東京工業大学小長谷研究室において開発したネットワーク型 VR シミュレーションを基盤技術としている。ネットワーク型 VR 環境では、VR シミュレーションを LAN 上のサーバー計算機で実行し、VR レンダリングを LAN 上のクライアント計算機上で実行することにより、クライアント計算機だけでは困難な大規模 VR シミュレーション環境を実現した[2]。

LAN 環境ではネットワークの通信帯域はほぼ一定であり、外部攪乱要因も少ない。したがって、遠隔 VR シミュレーションによる遅延が 1 から 2 フレーム程度(11~22ms)に収まる場合は、

伝播遅延問題を気にせずに遠隔 VR シミュレーションで実行中の対象を利用者が自然に操作することが可能である。LAN 環境においても、VR シミュレーションの規模が大きくなり、遠隔処理による伝播遅延が 30 ms を超えるようになると利用者の手の動きとサーバー計算機上での仮想ハンドの動きに遅延が生じ、自然な対象物の操作が難しくなる。この問題を解決するために、ネットワーク型 VR 共創環境では深層学習を用いた AI 予測同期制御技術を導入した。AI 予測同期制御技術については後述する。

クラウド型 VR 環境では、LAN 上のサーバー計算機ではなく、クラウド上のサーバーで VR シミュレーションを実行する。クラウドを用いることの最大のメリットは、クラウド共創環境を WAN 上に展開することで、多地点で VR 共創環境を共有できるようにすることである。これにより、VR 上の対象を同時に操作することを可能となる。例えば、分子ロボットの部品である DNA オリガミの原子モデルを共有しながら原子モデルの妥当性や、VR シミュレーションのパラメタを実時間で変更しながら、シミュレーション結果の是非を拠点間で議論することが可能となる。これにより、分子ロボット設計のサイクルを大幅に改善することが期待できる。

ただし、クラウド型 VR 環境においては、WAN を用いて VR シミュレーションサーバーにアクセスするため、ネットワーク性能は LAN と比べて外部攪乱要因が多く、動的に変化する。AI 予測同期制御の最大の利点の一つは、実時間で再学習することでネットワークの動的な変化に対応できることであるが、自然な操作に必要なネットワーク転送速度をどこまで下げることができるか、伝播遅延時間の長さをどこまで延ばせるかが技術的な大きな課題となる。

3. 大規模 VR シミュレーション

分子ロボットでは、DNA オリガミが構造設計の要となっており、正確な DNA オリガミの 3 次元構造の設計と予測ならびに用途に応じた強度の確保が大きな課題となっている[3][4][5]。VR 共創環境では、この課題を解決するために、数十万原子の原子モデルの分子シミュレーションと可視化が可能で大規模 VR シミュレーション技術を開発している。この VR シミュレーションは粗視化シミュレーションの一つであり、通常の分子動力学シミュレーションとは設計思想が大きく異なる。しかしながら、通常の分子動力学シミュレーションでは困難な DNA オリガミのような大規模生体分子の時間発展を実時間で観測することが可能なことから、分子ロボットの部品設計に必須な中核的シミュレーションとして位置付けている。

DNA オリガミは足場となるスキャフォールド DNA に留め具となるステーブル DNA を混ぜ、相補配列となる DNA 断片が二重らせん構造を形成することで約 70~100 ナノメートルのナノ構造体を構築する技術である[6]。スキャフォールド DNA としては、通常、約 7000 塩基の M13 バクテリオファージの単鎖 DNA が利用される。ステーブル DNA は足場 DNA の物理的に離れた

部位に対して相補配列を用いて DNA 二重らせんを形成し、つなぐ役割をする。ここで重要な働きをするのが相補配列の設計である。

相補配列について簡単に記す。DNA は、その構成要素であるアデニン(A)とチミン(T)、グアニン(G)とシトシン(C)が塩基対を形成する。2つの DNA 鎖が互いに塩基対をなす塩基から構成されている場合、このような DNA 鎖は「相補配列」と呼ばれ、自己組織化により DNA 二重らせんが形成される。注意すべき点は、通常の DNA 二重らせんは相補配列となる 2 本の長い単鎖 DNA から構成されるのに対し、DNA オリガミでは、ステープル DNA が 2 本の単鎖 DNA を跨るように 2 つの DNA 二重らせんを形成することである。つまり、スキヤフォールド DNA の前後をステープル DNA 上の異なる部位の相補配列となるように合成することで、ステープル DNA がスキヤフォールド DNA 上の異なる部位を結びつける働きをする。

DNA オリガミでは、このような数十塩基からなるステープル DNA を 100 本から 200 本くらい合成し、スキヤフォールド DNA と一緒に混ぜて自己組織化させる。スキヤフォールド DNA 配列の組み合わせを工夫することで、様々な二次元構造、三次元構造および可動部を持つ DNA オリガミを設計することが可能となる(図1)。

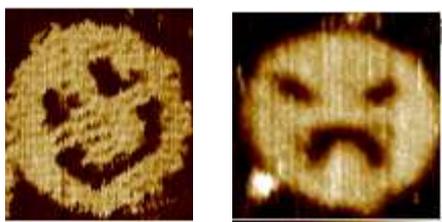


図1 DNA オリガミで作成したスマイリーマークとアングリーマーク (直径約 70 ナノメートル)

DNA オリガミのように 40 万原子もある巨大分子も近年の GPU 計算機の性能向上によりフェムト秒単位での時間発展による分子動力学(MD)シミュレーションを行うことは原理的には可能となってきている(図2)。このような大規模 MD シミュレーションからは時間発展による構造最適化、マグネシウムやナトリウムなどの金属イオンが DNA の構造安定化にどのように影響するか、など、DNA オリガミの設計に役立つ貴重な情報を得ることができる[7]。しかしながら、通常の MD シミュレーションにより DNA オリガミの構造的な変化を確認するための計算量は膨大であり、東工大 Tsubame-3 の 1 ノード(28 コア, 4GPU, 256GB メモリ)を用いても、ある程度の計算結果を得るまでに1週間あるいは1カ月の計算時間を必要とした。このため、適切な MD シミュレーションの初期構造を同定し、シミュレーションパラメータを変えて、実験に役立つ情報を実験系研究者にフィードバックさせるには計算時間がかかりすぎるという問題があった。

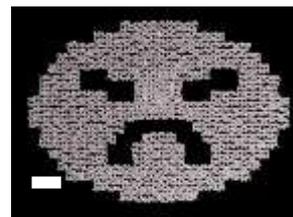


図2 DNA オリガミアングリーマークの全原子モデル (約 40 万原子)

一方、VR シミュレーションでは、シミュレーションの状況を実時間で可視化できるだけでなく、シミュレーションに利用者が介在できるという特徴を活かすことにより、MDシミュレーションとは異なるアプローチで DNA オリガミの設計に役立つ情報を得ることができる。通常の MD シミュレーションではフェムト秒単位の時間発展を用いて構造最適化を行う。これに対して、VR シミュレーションでは、ミリ秒単位の大きな時間発展を用いて、構造最適化を行う。VR シミュレーションではシミュレーションによる構造変化を実時間で確認しながらシミュレーションに用いるパラメータを変化させることができる。別な言い方をすると、人間による現象の目視を指標としたパラメータ最適化が可能となる。通常の MD シミュレーションでは遺伝的アルゴリズム(GA)やレプリカ交換法などメタ探索アルゴリズムを用いたパラメータ最適化が用いられている。しかしながら、このような最適化は自由エネルギー最小化のような「評価関数」が存在する場合にしか適用できない。また、一般にフェムト秒単位の時間発展で予測可能なのは高々ミリ秒であり、MD シミュレーションの結果は正しいかもしれないが、DNA オリガミの自己組織化に必要な分～時間オーダーの現象を現状の計算機で実現することは困難である。

VRシミュレーションで目視できた構造変化が正しいという保証は全くないが、必要があれば最低化された構造を初期値とするようなMDシミュレーションを再度実施することで、構造安定性を確認することは可能である。さらに言えば、実験系研究者が DNA オリガミの設計に必要な情報は必ずしも最終的な立体構造の予測ではなく、設計段階においては、むしろ、どの部位において、どのような力が構造安定に寄与するかという情報で十分な場合も多い。VR シミュレーションはこのような初期設計段階における実験系研究者の直観的な理解を助けることを開発目標の一つとしている。また、このような VR シミュレーション研究の一環として、現在、多数の分子の相互作用による動的な構造の創発について北海道大学と共同研究を進めている。

4. AI 予測同期制御

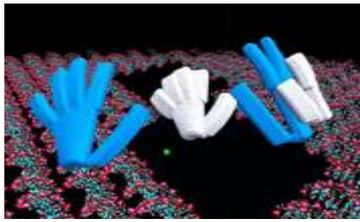


図3 利用者の手(青)と仮想ハンドの手(白)のずれの例

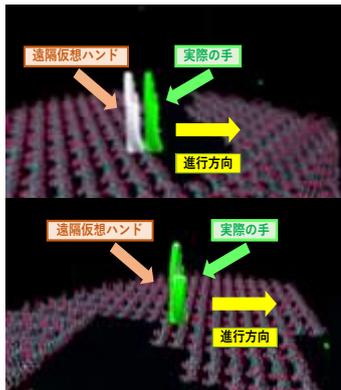


図4 AI予測同期制御技術の効果:
上図(AIなし), 下図(AIあり)

図3に通信遅延が大きい環境下でDNAオリガミを操作したときの利用者の手(青い手)と仮想ハンド(白い手)の位置情報の違いを示す。学習前の状態では、青い手と白い手の位置情報は大きく離れており、青い手でDNAオリガミを操作しようとしても、VRシミュレーションでの仮想ハンド(白い手)の位置は大きくずれているため、利用者の意図通りにDNAオリガミを操作することができない。深層学習で学習すると青い手と白い手が重なり、利用者の意図通りにDNAやDNAオリガミを操作することが可能となる[8]。AI予測同期制御技術の効果を図4に示す。利用者がVR空間で手を動かした際に、AI予測同期制御がない場合は、仮想ハンドの位置は実際の手的位置から遅れた場所にあるため予期せぬ操作をしてしまう可能性がある。一方、AI予測同期制御を用いると通信遅延があるネットワーク環境でも仮想ハンドの位置は常に利用者の手的位置と同期しているため、利用者は自然に対象を操作することが可能となる[9]。

5. VR共創環境の応用

AI予測同期制御技術ならびに大規模VRシミュレーション技術は汎用的な技術であり、分子ロボットの部品設計だけでなく、インターネットや次世代通信網を介した様々な遠隔処理に広く応用することが可能である。ここでは、VR共創環境の応用について簡単に紹介する。

(1) 「タンパク質」などの生体分子の自己組織化シミュレーション

ョン

VRシミュレーションの有望な応用領域の一つとして、タンパク質とDNAあるいはRNAとの自己組織化現象の再現があげられる。例えば、COVID-2020のヌクレオカプシドタンパク質(N-protein)などは、タンパク質だけでは複合体形成に時間がかかるが、RNAを含めて自己組織化シミュレーションすると、興味深い現象を再現することができる。このような自己組織化シミュレーションの結果が正しいという保証はないが、タンパク質の機能を理解するためのヒントを与えてくれる可能性は大きいと考えている。また、クラウド型VR共創環境を構築することができれば、多地点でこの自己組織化シミュレーションを実時間で共有することが可能となるので、実験系研究者と理論系研究者の共創に役立てることが期待できる。

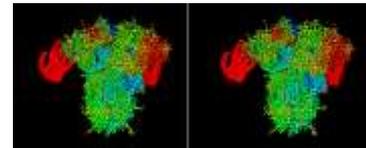


図5 Covid-2020ヌクレオカプシドタンパク質(N-protein)の原子モデル

(2) 屋外の風景と仮想構造物とのMRシミュレーション

次世代通信網を介したVR共創環境を構築することができれば、屋外でVRシミュレーションによるシミュレーション結果と現実世界とを組み合わせたMixture Reality(MR)を利用者に提示することができるのではないかと考えている。例えば、太陽光パネルを屋外に設置する際に、設置する向きや規模によりどれだけ効率的な発電を行えるかのシミュレーションを実時間で提示することも可能となろう。このような用途での応用例は多々あり、費用対効果の問題が解決すれば大きな市場形成が期待できる。



図6 屋外における仮想構造物シミュレーション

(3) 遠隔仮想ハンドを用いた分子内視鏡

VRシミュレーションを多地点で共有できるということは、VR環境を介して複数の利用者が相互作用できるということの意味している。VRシミュレーションの観点からは、相互作用するエージェントが人間であってもロボットであっても同じである。このような遠隔仮想ハンドの応用例の一つとして、関西大学では原子間力顕微鏡(AFM)を用いたナノスケールマニピュレータの研究開発を進めている。ナノスケールマニピュレータでは、利用者がAFMの中に入り込み、自分の手でDNAオリガミを操作する環境の構築を目指している。



図 7 ナノスケールマニピュレータのイメージ図

6. まとめ

VR 共創環境の構想と基盤となる VR シミュレーション技術および AI 予測同期制御技術ならびに将来的な VR 共創環境の応用について述べた。VR シミュレーションをクラウド上で実行することにより、多地点からのアクセスが期待できる。また、AI 予測同期制御技術により、通信遅延が大きいクラウド環境や次世代通信網環境においても自然な対象の操作が実現できると考えている。WAN や 5G 環境では外的攪乱要因が多く、技術的に検証すべき課題は多いが、VR 共創環境を構築することができれば、VR シミュレーションの共有による研究支援、現実世界と VR 世界の融合、遠隔ロボット操作など様々な分野に応用できると確信している。

謝辞 この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の委託業務（JPNP20006）の結果得られたものです。AI と VR を活用した分子ロボット共創環境の研究開発プロジェクトの推進にあたって、有益なご助言を頂いている澤井秀文先生、田中成典先生、山下雄史先生およびプロジェクトに参加いただいている Arif Pramudwiatmoko 氏、Ma Chen 氏、Hu Xiaoran 氏、Zhang Yuhui 氏、近藤洋隆氏、Mousumi Akter 氏に深謝いたします。

参考文献

- [1] 稲邑哲也, 水地良明. 身体的社会的対話経験の収集と共有のためのクラウドプラットフォーム SIGVerse. 情報処理学会インタラクティブセッション 2018, 3A03.
- [2] Gutmann, G., Azuma, R. and Konagaya, A.. A Virtual Reality Computational Platform Dedicated for the Emergence of Global Dynamics in a Massive Swarm of Objects. J. of the Imaging Society of Japan. 2018, vol. 57, no. 6, pp.647-653.
- [3] 小長谷明彦. 分子ロボティクス: 化学エネルギーで駆動する人工物の世界を目指して. 高分子, 2020, vol. 69, no.5, pp.218-222.
- [4] Inoue, D. Gutmann, G. et al.. Adaptation of Patterns of Motile Filaments under Dynamic Boundary Conditions. ACS Nano. 2019, vol.13, no.1, pp.12452-12460.
- [5] Matsuda, K., Kabir A.M.R. et al.. Artificial Smooth Muscle Model Composed of Hierarchically Ordered Microtubule Asters Mediated by DNA Origami Nanostructures. Nano Letters. 2019, vol.19, no.6, pp.3933-3938
- [6] Rothmund, P.W.K.. Folding DNA to create nano scale shapes and patterns. Nature. 2006, vol. 440, pp.297-303.
- [7] Ryuzo Azuma, Sae Kishi, Greg Gutmann, Akihiko Konagaya. All-atom molecular dynamics of film supported flat-shaped DNA origami in water. Chem-Bio Informatics Journal, 2018, vol. 18, pp.96-118.

- [8] Gutmann, G. and Konagaya, A.. Predictive Simulation: Using Regression and Artificial Neural Networks to Negate Latency in Networked Interactive Virtual Reality. arXiv:1910.04703 [cs.HC], 2019
- [9] Gutmann, G. and Konagaya, A.. Real-time Inference and Training of Artificial Neural Network for Adaptive Latency Negation in Distributed Virtual Environment. International Congress on Human-Computer Interaction (HORA2020). 2020, Ankara, Turkey.