

拡張現実感を用いた分子モデル表示システム

A Study of Molecular Model Display System Using Augmented Reality

小林 昭博† 山下 伸一‡ 小島 一成†
Akihiro Kobayashi Shinichi Yamashita Kazuya Kojima

1. まえがき

近年、科学に対して興味を示す人が増えている。特に、化学分野における分子構造の習得は難しい。その理由は、分子構造の空間的配置を理解することが困難である。3次元で配置した分子モデルを視覚表示した教材で学習すれば、より理解が深まると考えられる。筆者らは、現実世界にデジタル情報を重ね合わせ、利用者の活動を支援するユーザーインターフェイス技術である拡張現実(AR)で化学モデルを表示すれば、より理解が深まると考えた。教育分野において、教科書は平面で書かれているため3次元の物体は2次元で描かれている。それを教育者の説明で補うには限界がある。とくに化学分野における分子構造には平面では表現できない情報があり、現在はその理解を助けるために分子モデルがある。現在の分子モデルはパソコンの画面上で動かす為、直感的に操作を行う事ができない。

そこで本研究では、拡張現実感を用いた化学モデル表示システムの開発を目的とする。利用者は、入力センサーで対話的な学習情報を取得し、空間に配置した分子モデルをHMDで閲覧する。分子モデルを自然な興味で自由に動き回りながら視聴するために、利用者の位置検出として光学式モーションキャプチャシステムを用いる。これにより対話的かつ直感的に分子構造の理解が容易になる。

2. 分子モデル

分子モデルとは、化学の分子構造の立体視を手助けするものである。原子をあらわす球体と結合を表わす棒で構成し、おもにプラスチック製である。他にもCGで3次元化された分子モデルを表示させるソフトウェアが存在する。それらのソフトウェアはPDBファイルを用いて、3次元モデルを表示する。図1に分子モデルの例を示す。

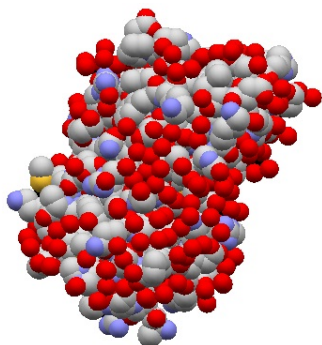


図1 分子モデルの例

2.1 PDBファイルとは

PDBとはProtein Data Bankの略であり、米国RCSB・BMRB,

† 神奈川工科大学

‡ 株式会社トライアクシス

欧州PDBe、日本PDBjなどが生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化した規格である²⁾。PDBファイルには立体構造を構築するための各原子の座標、各原子が結合している原子の番号を記録している。PDBファイルの記述の一部を図2に示す。PDBファイルには、立体構造座標のほか様々な情報が含まれる³⁾。項目は行の先頭7文字までに示される。該当する情報がない場合、それぞれの項目を省略することが可能である。HETATM行は、行番号、原子名、X座標、Y座標、Z座標の順番で記載されている。CONNECT行は行番号、結合している行の番号の順に記述されている。

```
HETATM 115 H -1.228 -6.280 0.722
HETATM 116 H -1.208 -6.166 -1.087
HETATM 117 H -2.613 -5.631 -0.152
HETATM 118 H 1.002 -6.299 0.817
HETATM 119 H 2.448 -5.735 -0.017
HETATM 120 H 1.060 -6.242 -0.993
CONNECT 1 2 5 9
CONNECT 2 1 3 11
CONNECT 3 2 4 6 61
CONNECT 4 3 5 8 62
CONNECT 5 1 4 12
CONNECT 6 3 7 13
CONNECT 7 6 8 10
```

図2 PDBファイル(DMC[5]U)の一部

3. 分子モデル表示システム

本研究では、拡張現実感を用いて分子モデルを表示するシステムを開発する。本システムはモーションキャプチャシステムとPDBARアプリケーションで構成されている。システム全体図を図3に示す。

3.1 PDBARアプリケーション

PDBファイルより分子モデルを自動構築し、HMDに分子モデルを描画する。PDBアプリケーションは読み込み処理部と描画処理部で構成されている。

3.2 読み込み処理部

分子モデルを自動構築するためには、PDBファイルに含まれる項目を1行ずつ抽出し、データを格納する構造体を作成する。抽出した項目がATOM行及びHETATM行であるとき、行番号、原子名、構造座標(x, y, z)の順に格納する。抽出した項目がCONNECT行であるとき、行番号、結合分子番号を格納する。描画するにはATOM行及びHETATM行で読み込んだ1行の原子名を用いて大きさや色を決定し、構造座標より原子の座標を決定する。CONNECT行で読み込んだ行番号と接続番号をHETATM行で読み込んだ行番号をもとに構造座標決定し結合線を描画する。

3.3 描画処理部

読み込み処理部で格納した分子構造を読み出し、描画処理を実行する。カメラのビューボリュームの情報を読み込み、描画するために必要なバーチャルカメラの画角を決める。バーチャルカメラとは、HMDに映像を投影する際に現実空間のマーカ位置と描画するCG空間のマーカ位置を合わせ、オーバレイに用いる仮想的なカメラの事である。マーカ情報とスケ

ルトン情報の位置より分子構造の位置を決定する。PDB ファイルより読み込んだ分子構造を分子モデルで表示させるスケルトン位置に描画をする。

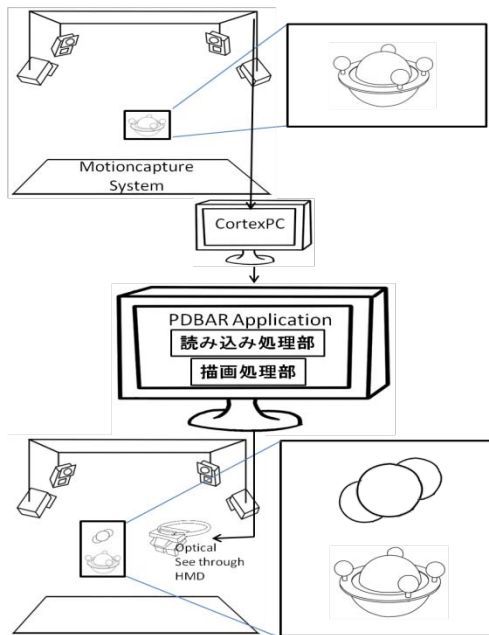


図3 システム全体図

3.4 キー操作説明

PDBAR アプリケーションの実行することにより以下の機能が実行可能となる。キーと各機能の一覧を表1に示す。

表1 使用キーと機能

キー	機能
A	Cortex に撮影を開始させる
S	Cortex に撮影を停止させる
Z	描画スケールの拡大
X	描画スケールの縮小
Q	セグメントの表示/非表示
W	マーカの表示/非表示
R	ワイヤーフレーム切り替え
F	フロアの描画切り替え(チェック ー, ワイヤー, 表示なし)
C	カメラボリュームの表示/非表示
G	バーチャルカメラ切り替え
P	Cortex のマーカ ID のリセット
左ドラック	描画の回転
右ドラック	描画中心の移動

4. 実験と考察

本研究では、化学構造を記述している PDB ファイルを読み込み、拡張現実で化学モデルを光学シースルーHMD に投影するシステムを開発した。モーションキャプチャシステムを用いることで、空間位置と HMD の方向ベクトルを算出することで、プラスチック製の分子モデルと同様に取り扱う事が可能であることを実証した。HMD に投影される黒は透明になるため、分子モデル以外を黒で表示させることで分子モデルのみが投影される。投影する化学モデルを図4に示す。光学シー

スルーHMD に表示される分子モデルの例を図5で示す。本研究では、拡張現実感を用いた分子モデル表示システムを構築した。システムの問題点として、PDB ファイルの記述する方法の種類が異なるファイルは読み込みが出来ない。PDB ファイルは内容の省略が可能のため、ファイル判断が不可能であるため、内容の判断を可能とする方法を検討する必要がある。

表示する分子モデルを変更するには、ファイル読み込みのソースコードを直接変更する必要があるため、プログラムを一旦終了しなければならない。プログラムを終了せずに表示する分子モデルを変更可能とする必要がある。

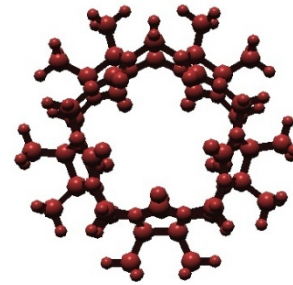


図4 投影するモデル(DMC[5]U)

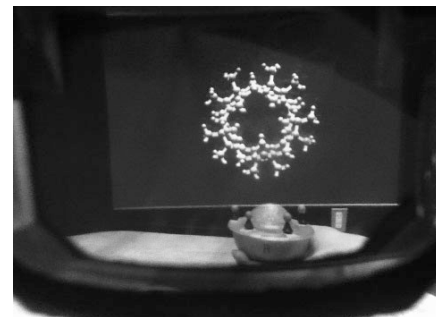


図5 光学シースルーHMD に表示した分子モデルの例

5. むすび

本研究では、拡張現実感を用いた分子モデル表示システムを開発した。PDB モデルを読み込み、処理する過程を構築した。本システムでは、分子モデルを手の操作で動かすことにより直感的になり分子構造の理解が容易にした。また、ネット上で配布されている PDB ファイルを用いて大量の情報を取り扱うことを可能とした。

今後の課題として記述されている項目の情報量が多い PDB ファイルや項目の情報量の少ない PDB ファイルに対応可能なシステムを構築し、PDB ファイルの内容に関係なくネット上から取得したすべての PDB ファイルに対応したシステムを目指す次第である。また、原子の電子殻のアニメーションや各原子の固有振動数を表示する。次に、アニメーションを用いて HMD を通して見る分子構造を化学反応させ新しい教材を製作することを検討する。

参考文献

- 1)日経コミュニケーション(2009),『ARのすべて』,日経BP社
- 2)PDBj(2011), Welcome to PDBj, http://www.pdbj.org/index_j.html, [2011.07.01]
- 3)前田美紀(1997), NIAS DNA Bank About PDB, <http://www.dna.affrc.go.jp/misc/mm/pdb>, [2011.07.01]