

Mixed Reality を用いたタンパク質構造描画システムの開発

坂本亘[†] 関嶋政和^{‡, §}[†] 東京工業大学工学部情報工学科 [‡] 東京工業大学情報理工学院

§ 東京工業大学科学技術創成研究院スマート創薬研究ユニット

1 背景

新たな薬を開発する創薬産業にかかるコストは年々上昇しており、現在では一つの新薬を開発するためのコストが約 30 億ドルとも言われている [1]。そのため、情報技術を活用した創薬支援システムの需要が高まっている。また、近年では構造情報を活用する SBDD (Structure-based Drug Discovery) が盛んに行われており、タンパク質とリガンドの相互作用を確認しながら化合物の最適化が行われている。

SBDD において、タンパク質や化合物の立体構造の可視化は不可欠なプロセスであるが、現在の分子構造描画システムでは、本来 3 次元である分子構造を 2 次元のディスプレイ上に表示させるのが主流である。しかし、技術の向上により、ヘッドマウントディスプレイを用いた Virtual Reality (VR) と呼ばれる仮想現実や、Mixed Reality (MR) と呼ばれる複合現実の表現力が向上している。さらに、それらのデバイスを安価で入手し、開発できる時代になった。VR や MR の技術を用いることで、現実世界では本来 3 次元であるものを、現実世界に近い形で見ることが可能になる。分子構造についても同様で、3 次元の構造は、3 次元で見て、その立体構造や相互作用を確認することが理想である。

既存の研究として、VR 向けのヘッドマウントディスプレイである Oculus Rift を対象に開発されたソフトウェアとしては Molecular Rift [2] があり、タンパク質やリガンドを Oculus Rift 上に表示させたり、Kinect を用いてジェスチャーで操作する機能が実現されている。しかし、視界がふさがりため周囲との議論がしばらく、手元の資料を見るためには一旦ヘッドマウント

表 1: 開発環境

環境	詳細
OS	Windows 10 Pro
ゲームエンジン	Unity5.5
統合開発環境	Visual Studio 2015
ヘッドマウントディスプレイ	Microsoft HoloLens

ディスプレイを外さなければならない。また、PC との接続や Kinect が必要で、持ち運びにくいという問題がある。一方で、MR では現実世界にホログラムを重ねるため、VR と違い視界が開けており周囲とコミュニケーションを取りやすく、手元の資料なども同時に見ることができる。また、その中でも HoloLens はホログラムを複数人で共有したり、PC と接続することなく単体で動作することができるという特徴がある。本研究では、遠隔での利用、ホログラムの周りを歩きながらの構造の確認などの利用法を想定しており、デバイスの特徴から HoloLens を対象にした分子構造描画システムを開発した。

2 手法

2.1 ヘッドマウントディスプレイ

本研究では、Microsoft の開発している HoloLens と呼ばれる MR 用のヘッドマウントディスプレイを対象に開発を進めた。

2.2 開発環境

ゲームエンジンには、現状の VR、MR 開発におけるデファクトスタンダードとなっている Unity を用いた。Unity のバージョンは、標準で HoloLens に対応している 5.5 を用いた。

3 特徴

本研究で開発したシステムの特徴

- クラウドに連携したファイルの読み込み 分子を構成する原子の空間配置を示す三次元の座標ファ

Visualizing Protein Structures in Mixed Reality.

Wataru SAKAMOTO[†], Masakazu SEKIJIMA^{‡, §}[†]Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology, 152-8550, Tokyo, Japan[‡]Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology, 152-8550, Tokyo, Japan

§Advanced Drug Discovery Unit, Tokyo Institute of Technology, 152-8550, Tokyo, Japan

sakamoto.w.aa@m.titech.ac.jp, sekijima@c.titech.ac.jp

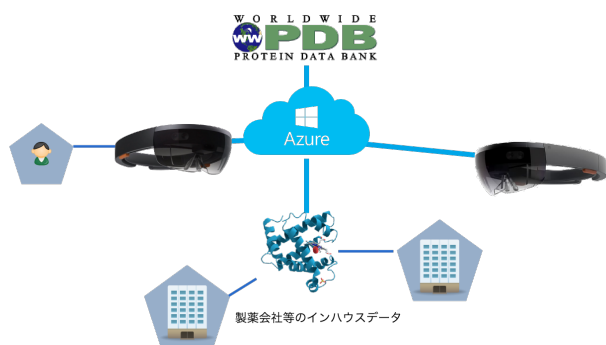


図 1: 概念図

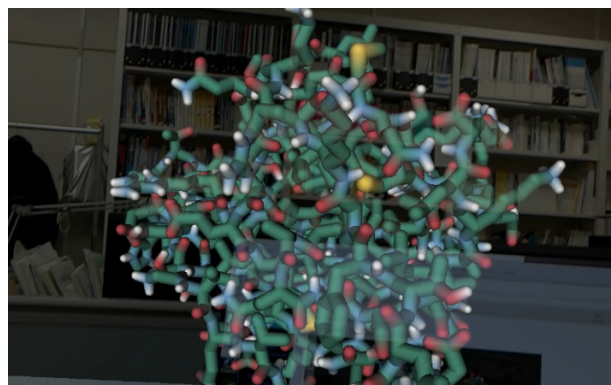


図 2: 実行画面

イルである PDB ファイルをあらかじめローカル、または Microsoft Azure 上や Microsoft OneDrive 上に配置することで、タンパク質の 3 次元構造を表示。

- **タンパク質の動作** 読み込んだタンパク質やリガンドは、自由に動かしたり回転したりすることが可能。
- **ホログラムの共有** Azure 上のインスタンスを介して、複数台の HoloLens でホログラムを共有し、表示する。タンパク質の位置なども共有することができる。

4 想定される利用法

- **対面での利用** 視界がふさがらないために、タンパク質やリガンドのホログラムと同時に手元の資料を見ながらの議論が可能。また、ホログラムを複数人がホログラムを共有し、周囲から歩き回ったり覗き込みながらタンパク質の立体構造やタンパク質とリガンドの結合様式を理解し、リガンドの最適化についての議論が可能。
- **遠隔での利用** 製薬企業におけるタンパク質の立体構造やリガンドの情報は社外秘であることが多く、現在は、関係する研究者が 1 カ所に集まり議論を行うことが多いが、本研究で開発したシステムではクラウドと連携し、離れたサイト間でホログラムや他者のホログラムに対しての視点の共有も行うことが可能。

5 課題

HoloLens は PC を使わず単体で動作するのがメリットであるが、同時に処理能力が低いのがデメリットである。HoloLens を快適に動作させるには、1 秒あたり

に描画されるフレーム数 (FPS) を 60 以上に保つ必要がある。3 次元モデルのポリゴン数でいうと、1 万ほどまで落とす必要がある。しかし、今回巨大な分子構造を描画した際に、もっとも単純なタンパク質やリガンドの 3 次元構造でもポリゴン数が 2 万を超えてしまったため、動作が重くなるケースが見られた。また、HoloLens では外部プロセスを呼べないため内部で PDB ファイルの読み込みから描画まで行っている。この処理では大量の分子モデルを内部で生成、読み込みするため、同様のデメリットから描画完了までに時間がかかってしまう。

6 まとめ

本研究では Mixed Reality を用いた、特に HoloLens を対象とした分子構造描画システムを開発した。HoloLens では処理に時間がかかる部分はクラウドで処理するようにすることで、タンパク質の Surface を求める計算や、Surface をそのまま表示するとポリゴン数が大きくなりすぎるために、ポリゴン数を削減するプログラムなどを動かせるようになれば創薬において本研究はより有用なものになると考えられる。

参考文献

- [1] Mullard, A.: New drugs cost US \$2.6 billion to develop, *Nature Reviews Drug Discovery*, 13:12, 877 2014.
- [2] Norrby, M.; Grebner, C.; Eriksson, J.; Boström, J. Molecular Rift: Virtual Reality for Drug Designers. *J. Chem. Inf. Model.* 2015, acs.jcim.5b00544.