



## AIとVRを活用した 分子モデリング環境

A Molecular Modeling & Simulation Environment Using AI & VR

VR/AI

Virtual Reality / Artificial Intelligence

(株)分子ロボット総合研究所・関西大学・京都大学

### 研究開発の概要

#### ● 背景

分子ロボットVR共創環境プロジェクトでは、分子ロボット(生体分子で構成されたロボット)の設計支援環境の構築を目指しています。

#### ● VR共創環境

DNAやタンパク質などの生体分子をVR可視化することで、平面では理解しにくい深さ方向の動きや、水素結合の様子も洞察することができます。生体分子に触れることでダイナミクスを直観的に理解できます。

GPGPUを用いた実時間予測シミュレーションにより、様々な分子間相互作用を再現し、実験に先立ち、どのような条件が現象の実現に必要なかを予測します。クラウド上で複数拠点からVR上の分子を共有し仮想手で操作することもできます。

#### ● ネットワーク型VRシステム(特許取得)

遠隔サーバー上でシミュレーションするネットワーク型VRシステムではネットワーク遅延により仮想手と実際の手の動きがずれるという問題が生じます。本特許はこの遅延問題を実時間推論と学習機能(Real-Time Inference and Training; RTIT)技術で解消します。【特許第7572066号】

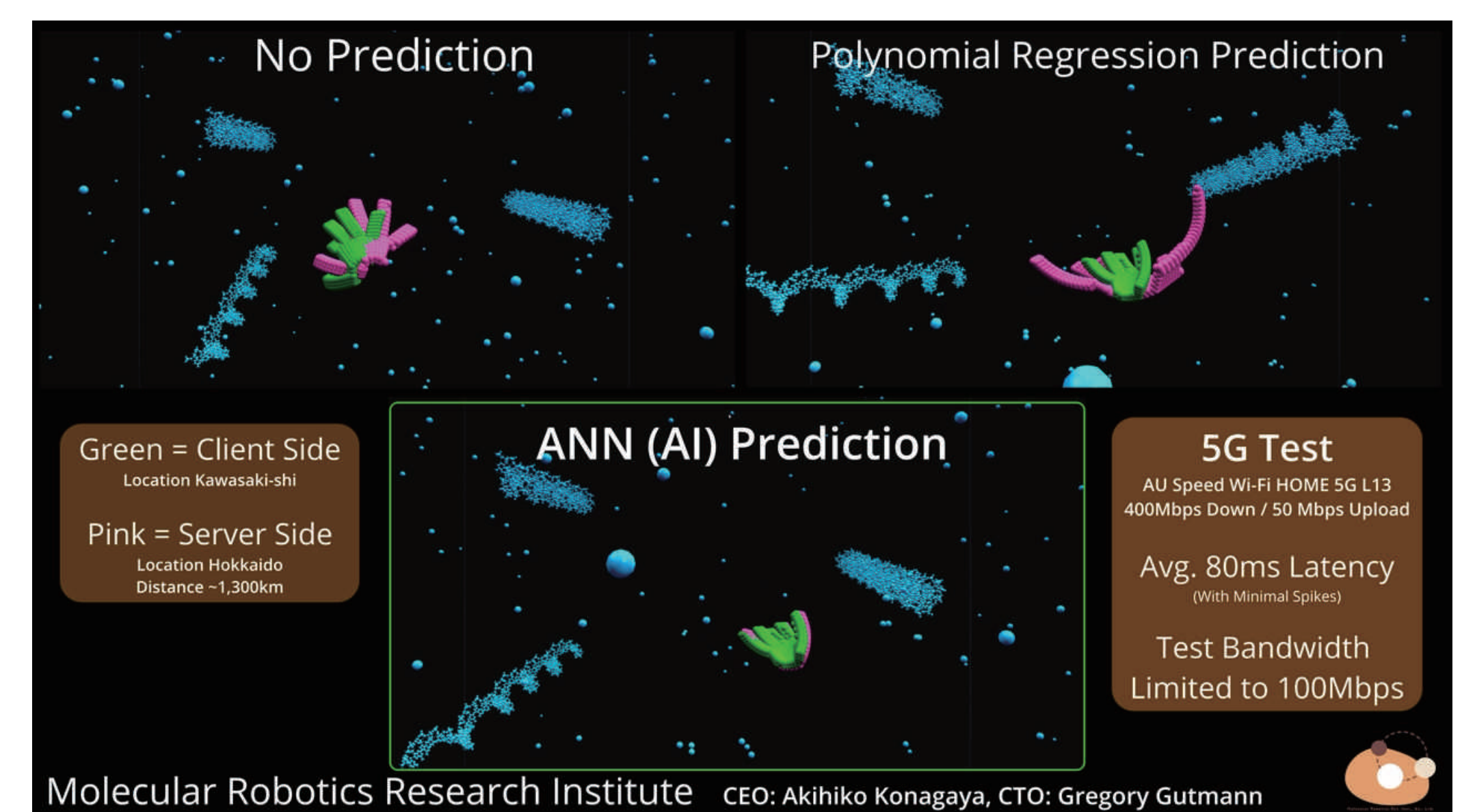
#### ● 超解像処理方法(特許取得)

原子間力顕微鏡(AFM)を用いて撮影し取得した画像を生成AI技術と仮想原子間力顕微鏡を組み合わせることで、超解像画像に変換することができます。

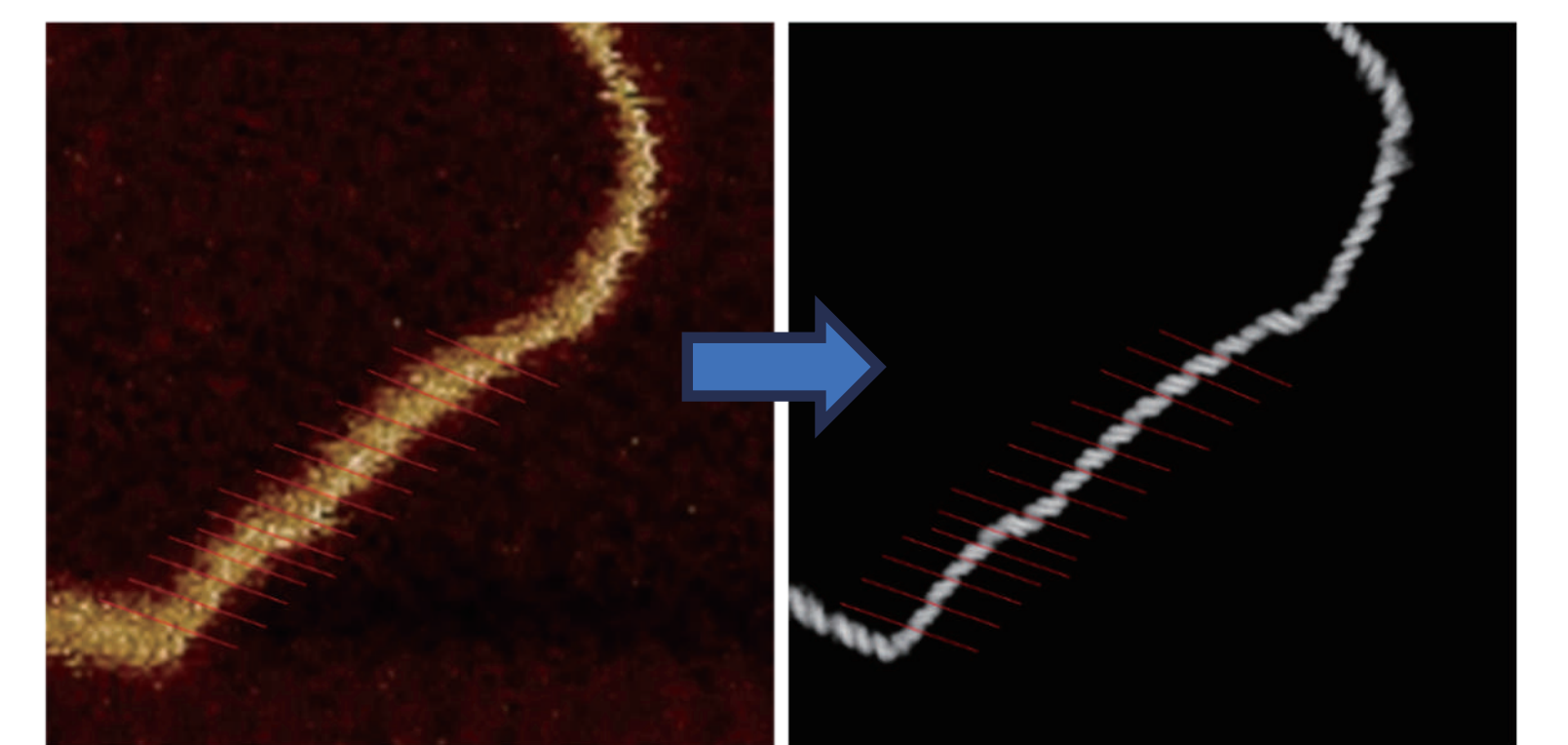
【特許第7583475号】

#### ● 生成AIを用いた分子モデリング支援環境

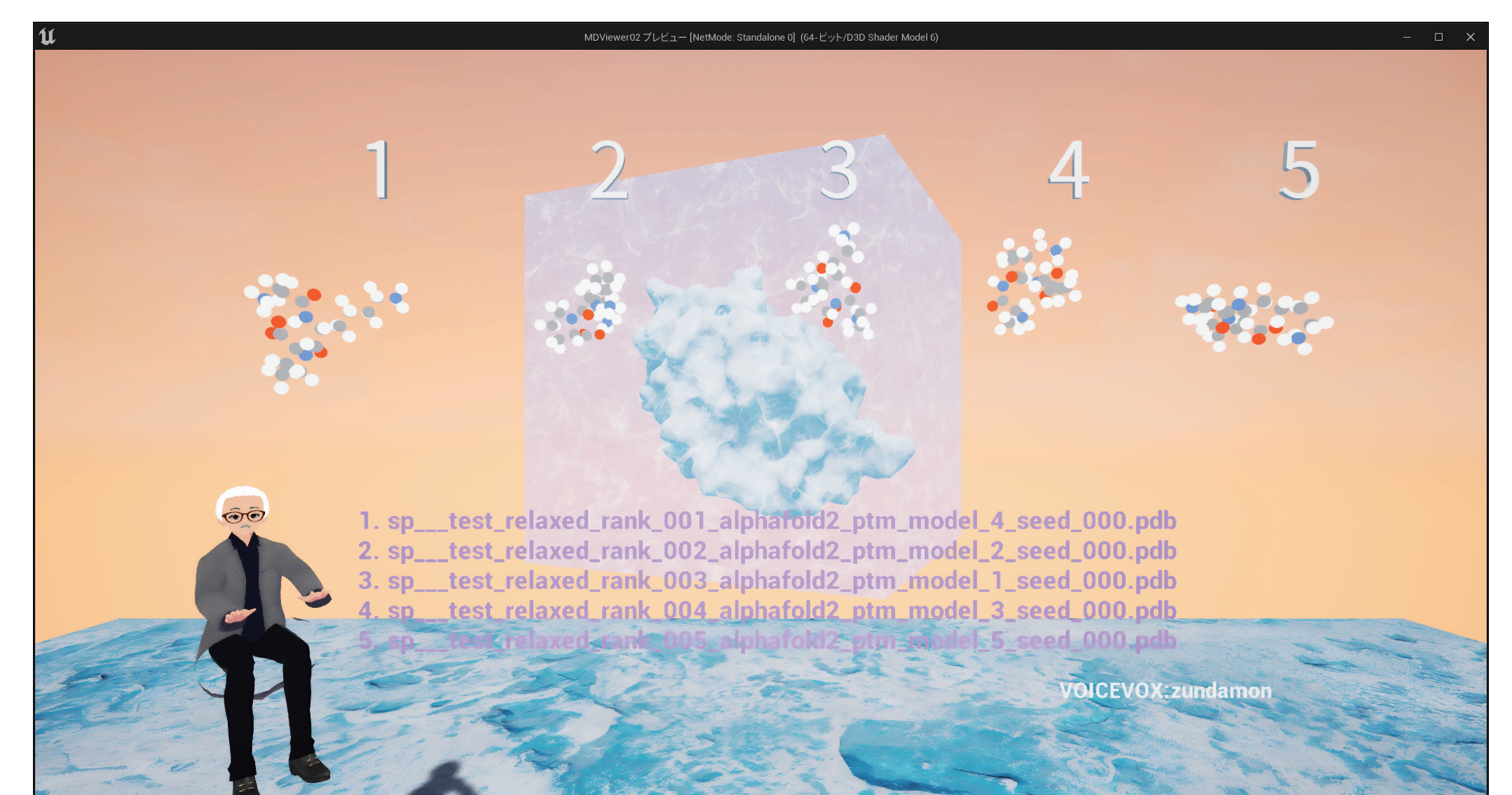
生成AIを用いたアシスタントが分子設計をお手伝いします。分子設計の経験がなくても、AlphaFoldを用いてアミノ酸配列からタンパク質の構造を予測したり、Gromacsを用いて分子動力学シミュレーションを実行し、結果を可視化することができます。



5G環境(50-100Mbpsでも動作検証済)



AFMで撮影したDNAを超解像処理



音声入力によるアシスタント

### 来場者へ向けて

生体分子のde novo分子設計が注目を集めています。分子ロボットVR共創環境プロジェクトでは、AIとVRを活用して構造設計するだけでなく、VR空間上で設計した分子をオブジェクト化することで直観的な理解を支援します。

### 関連サイト紹介

●株式会社分子ロボット総合研究所HP  
<https://molecular-robot.com>



●分子ロボットYouTube動画  
<https://www.youtube.com/@molecularrobot>



NEDOプロジェクト名

人と共に進化する次世代人工知能に関する技術開発事業

お問い合わせ先

株式会社分子ロボット総合研究所 E-mail:info@molecular-robot.com