

# MolCollaboのSDKを活用した COVID-19関連 VR可視化教材の作成

防衛大 萩田  
フィアラックス 棚橋、勅使河原

2020.12.18 11:50～12:20

JSST Workshop & 2020年度核融合科学研究所一般共同研究(研究会)  
先進的描画技術を用いた可視化情報の研究会 (VR2020)

- 公開用に向け、発表資料の抜粋を作成しています。
- それに伴い、左上のページ番号に抜けがあります。

# Open Science / Open Data

- PDBj

English 日本語

20 Year Anniversary

Worldwide Protein Data Bank Foundation

Search [pdbj.org](#) (PDB/BMRB/EMDB)

[wwPDB](#) [RCSB\\_PDB](#) [PDBe](#)

**COVID-19 featured content**

This page is also available in: [日本語](#) [简体中文](#) [繁體中文](#) [한국어](#)

The recent outbreak of the Novel Coronavirus disease (**COVID-19**) is a serious threat to people all over the world. In order to understand and develop an effective drug against this

- <http://www.charmm-gui.org/>

**CHARMM-GUI**  
Effective Simulation Input Generator and More

[about us](#) :: [input generator](#) :: [Q&A](#) :: [archive](#) :: [charmm](#)

Some [lectures](#), [job postings](#), and [FAQ](#) are now available. See [upload log](#) for updat

**Archive**

- Individual Lipid Library
- Lipid Bilayer Library

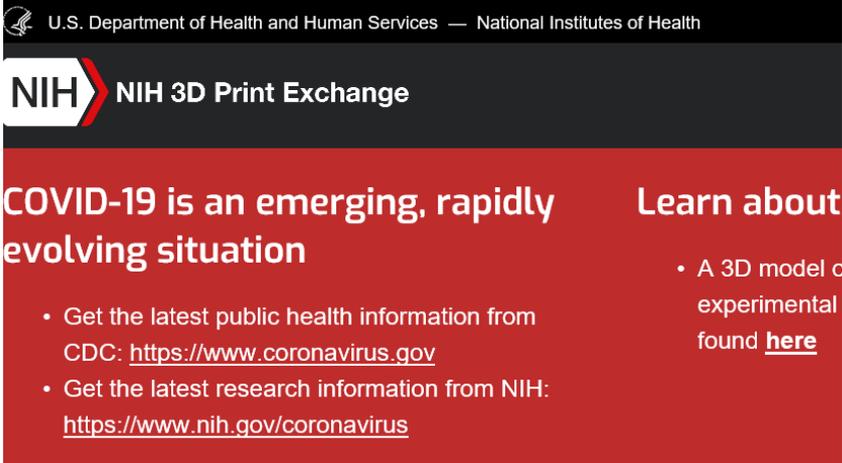
**CHARMM-GUI Archive - COVID-19 Proteins Library**

This archive currently contains simulation systems related to COVID-19 proteins.

# Open Science / Open Data

- NIH

- さまざまな、取り組みがある。
- 3D Print Dataも。



U.S. Department of Health and Human Services — National Institutes of Health

NIH > NIH 3D Print Exchange

COVID-19 is an emerging, rapidly evolving situation

Learn about

- A 3D model of experimental found [here](#)

- Get the latest public health information from CDC: <https://www.coronavirus.gov>
- Get the latest research information from NIH: <https://www.nih.gov/coronavirus>

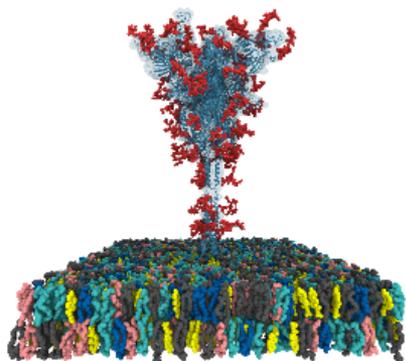


# MDのOpen Data

- Charmm GUI

- MDのトラジェクトリデータが公開されている。

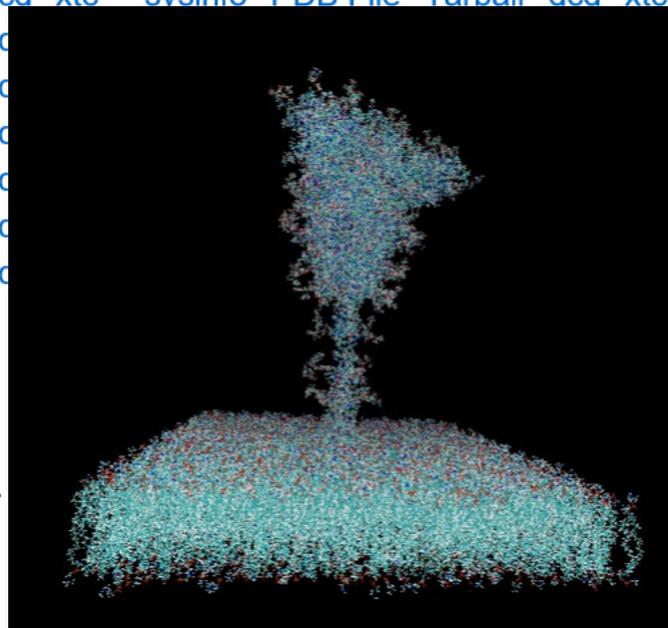
- Fully-glycosylated full-length S protein models (read the above reference and watch this [video demo](#) first!) 



6VSB

1_1_1	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
1_1_2	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
1_2_1	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
1_2_2	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
2_1_1	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
2_1_2	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
2_2_1	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc
2_2_2	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc	sysinfo	PDB File	Tarball	dcd	xtc

6VXX



VMDで可視化した結果  
(332,712原子)

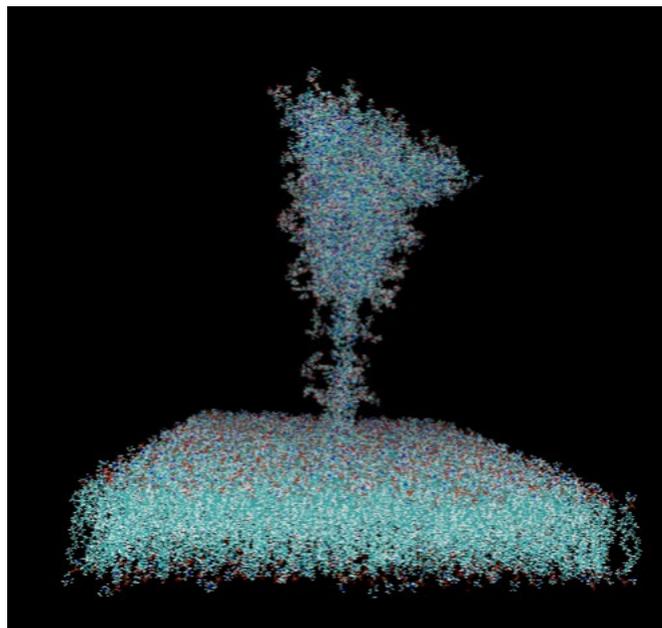
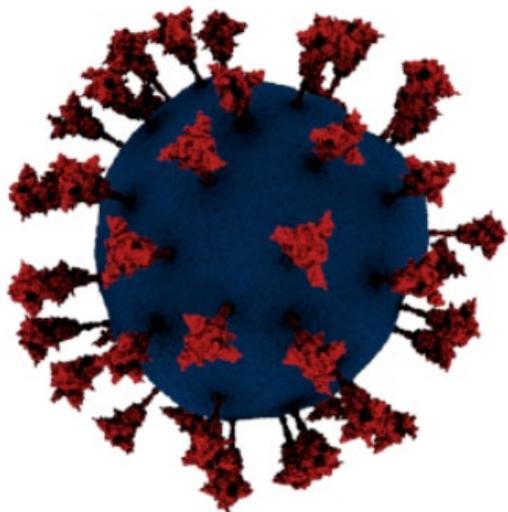
# 動くMDとポリゴン表示のVR

- 材料(高分子)の現場のプレゼン用途では、動くMDと、ポリゴン表示を併用した VRコンテンツを作りたい。
- 選択肢
  - ① Unity でフルスクラッチで作れる。
    - プロトは作ったが、ユーティリティ作成が面倒。
  - ② 何らかのSDKを使って、簡単に作りたい。
    - MolCollabo(フィアラックス)が、開発支援のSDKを提供するという話があった。  
**<今、ここを確かめているところ。>**
  - ③ VMDやPyMOLを、AVR(EasyVR)経由で表示。
    - AVRのPyMOL対応は、開発途中のリリース直前版。
    - VMDでMDとポリゴンの表示はできそう。未確認。

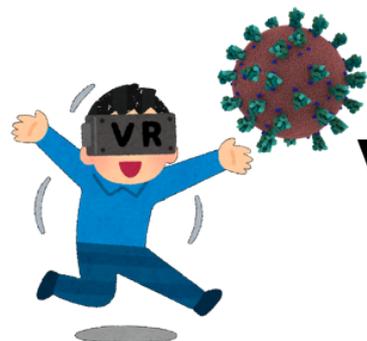
# COVID-19のコンテンツ作成へ

---

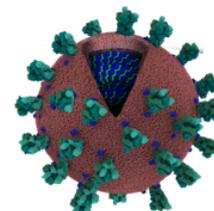
- COVID-19のMDを紹介するコンテンツも、「ポリゴン」+「動くMD」の構成がbetter。
- 「では作ってみよう！」という話。



# 教材資料のイメージ①



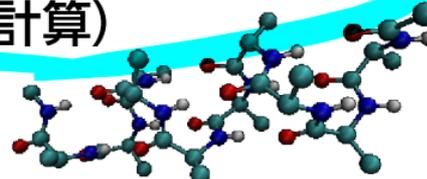
COVID-19/SARS-CoV-2



## VRで観察する分子 とシミュレーション

バーチャルリアリティ  
(仮想現実；VR)

分子動力学シミュレーション  
(MD計算)



「両眼立体視」 + 「位置センサ」  
→ 没入感 (サイバー空間に居る感覚)

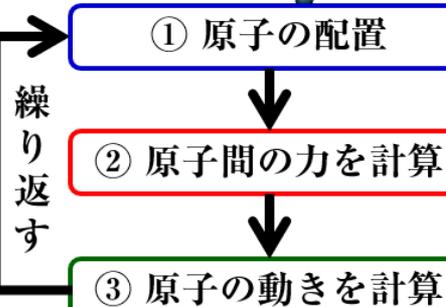
6軸位置センサ  
(位置と向き)



左目の像 右目の像



2つの画像が、脳で融合し、  
立体的に見える (感じる)



$$m_i a = F_i = \sum_j F_{i,j}$$

一般向けの  
ゆるい  
内容

フォントも  
読みやすく  
(モリサワフォ  
ントなど)

いらすと屋  
の利用

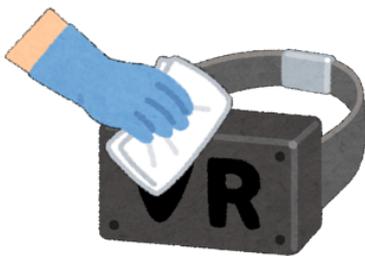
# 教材資料のイメージ②

## VR装置利用時の注意（感染予防）

① 除菌シートを取る



② VR機材を消毒する



③ VRを楽しむ



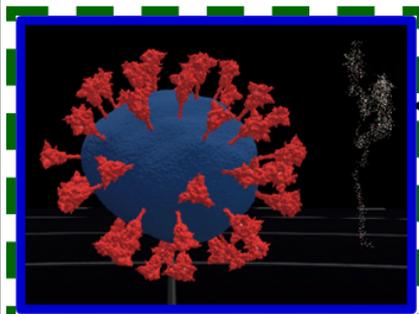
感染予防  
も重要！

コンテンツは  
装置固定

装置 1 :  
SARS-CoV-2の全体像

装置 2 :  
Spikeタンパクの動き

装置 3 :  
Spikeタンパクの動き



6VSB 19744原子

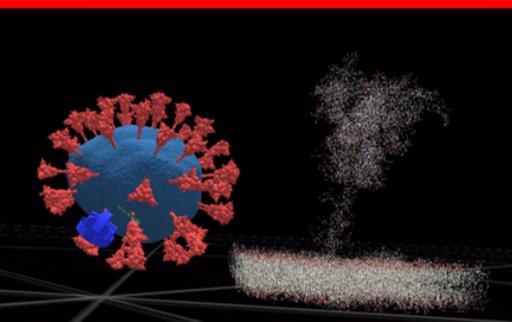
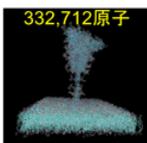
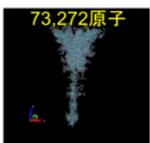
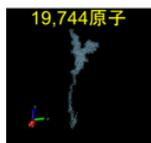
<https://3dprint.nih.gov/discover/3DPX-014820>



19,744原子

73,272原子

332,712原子



332712原子

<http://www.charmm-gui.org/?doc=archive&lib=covid19>

VIVE focus plus 2台



VIVE 1台



# MolCollaboについて

- フィアラックスのホームページ
  - **Unity用の開発キット(Asset)**が付属しており、**ユーザー側で機能拡張**



# MolCollaboについて

- フィアラックスのホームページ

Unity で使う開発キット ( Asset ) が付属

ゲーム開発エンジン Unity 用の開発キットが付属しており、  
ユーザー側で機能拡張できるため、

教材の作成や研究素材など、幅広い用途に活用できます。

VR デバイスは HTC VIVE/Oculus Rift/Oculus Go/

Gear VR に対応しており、PC が不要な無線のヘッド

マウントディスプレイでも使用できます。

教育コンテンツの作成

研究・開発

研究成果の展示

コミュニケーション



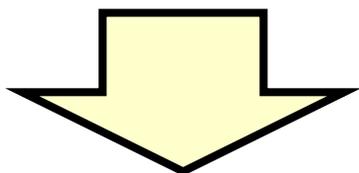
# MolCollaboについて

---

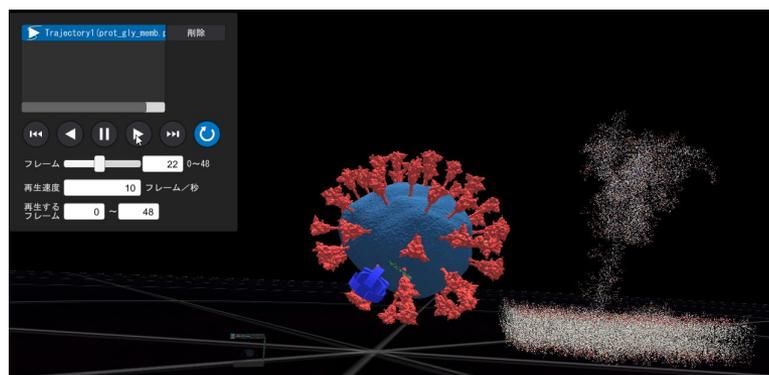
- MDデータのVRビューアとしての基本はできている。
  - ユーティリティは、作られている。
    - 生体分子のMD結果は、そのまま、VR表示。
    - VRコントローラーで、各種機能ボタンが売り？
- HTC VIVE (PC) と、HTC VIVE focus plus (Android) のアプリを同時開発できる。(Buildのみ、異なる。)
- 複数デバイス間での通信機能
  - まあ、あると良い面もある。
    - 表示オブジェクトの調整
    - 他ユーザーの視点の位置合わせ

# MolCollaboについて

- 開発のチュートリアル の 整備状況 (マニュアル)
  - 画像の保存機能の追加
  - 選択したオブジェクトのデータのテキスト出力機能
  - モデルデータの「全選択」機能の追加

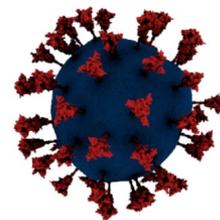


- もう少し、踏み込んだ、開発事例がほしい。
  - Unityベースでポリゴンデータを表示する機能追加  
(今回の検討内容)

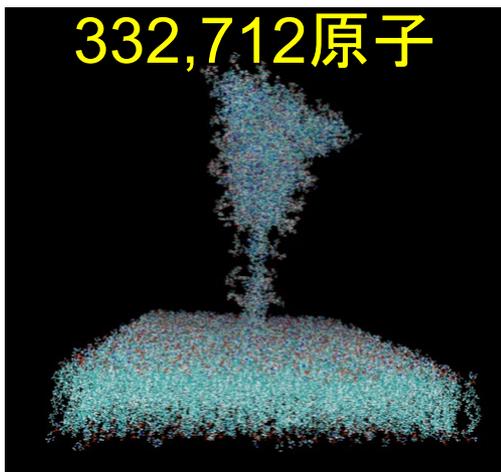


# 今回の検討事項

- Unityでの機能拡張の作成
  - 「ポリゴン」を、MolCollabo上に表示させる。
    - MD機能は、MolCollabo-nativeを利用。
- MolCollaboのMDトラジェクトリ再生の性能評価
  - Stickのみを、ポイントスプライトで表示。
    - ビルボード上のスティックの絵を、フラグメントシェーダーで立体的に見えるように描画



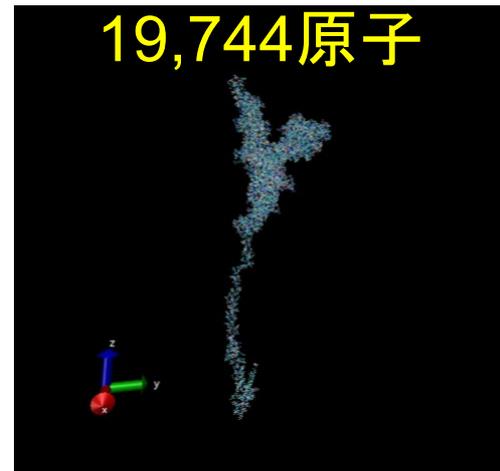
332,712原子



73,272原子



19,744原子



# 検討機材の状況

- 手元にある機材で評価。(GPUが性能主要因と仮定)



単体のみ



GPUカード

ノートPC  
on board

- GeForce 1060
- GeForce 1060 with max Q
- GeForce 2070
- GeForce 2060 SUPER
- GeForce 2070 SUPER
- GeForce 2080 SUPER
- GeForce 3070
- GeForce 3080
- GeForce 3090

Thunderbolt 接続のeGPU



# 検討機材の状況

- 機材のリスト
  - 当初、デスクトップは対象外と考えたが、、、

	CPU	メモリ	GPU
機材1	i7-7700HQ 2.8GHz	64GB	GTX 1060
機材2 Dell G7	i7-8750H 2.2GHz (4コア)	64GB	GTX 1060 with max-Q
機材3 MSI GP75	i7-10750H 2.6GHz (6コア)	16GB	RTX 2070
機材4 デスクトップ	i9-9900 3.1GHz (4コア)	16GB	RTX 2060 SUPER
機材5 デスクトップ	AMD 3990X 2.9GHz (64コア)	64GB	GTX 1650 SUPER RTX 2060 SUPER (RTX 3070)

# ポリゴン表示機能追加

---

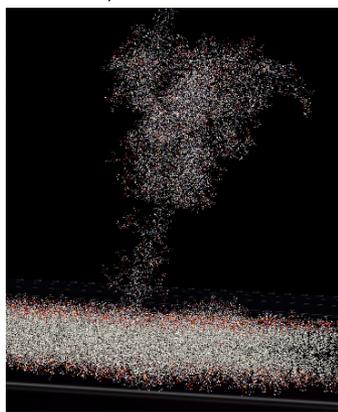
- Unity スクリプトの構成
  - EditShowCovid19.cs (ポリゴンの表示操作)
  - ShowCovid19Toggle.cs (表示の制御/イベント待ち)
  - FileCanvas.prefab (VR空間内のGUIの設定)
  - FilePanel.prefab (デスクトップ画面内のGUIの設定)
  - Editor.cs (Unityスクリプトの登録ファイル)
- ポリゴンのファイル
  - Obj + Mtl ファイル (NIH 3D Print Ex. のデータ)

# 動作のイメージ

- 2つのスクリプトの動作イメージ

MolCollaboのProject

↓ MDデータの表示

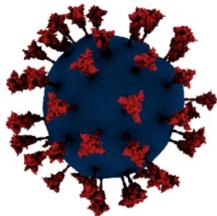


EditShowCovid19.cs

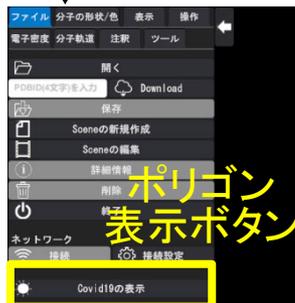
情報の同期

ShowCovid19Toggle.cs

↓ 表示のON/OFF



↑ 表示のON/OFF



FilePanel.prefab

デスクトップのUI

↑ 表示のON/OFF



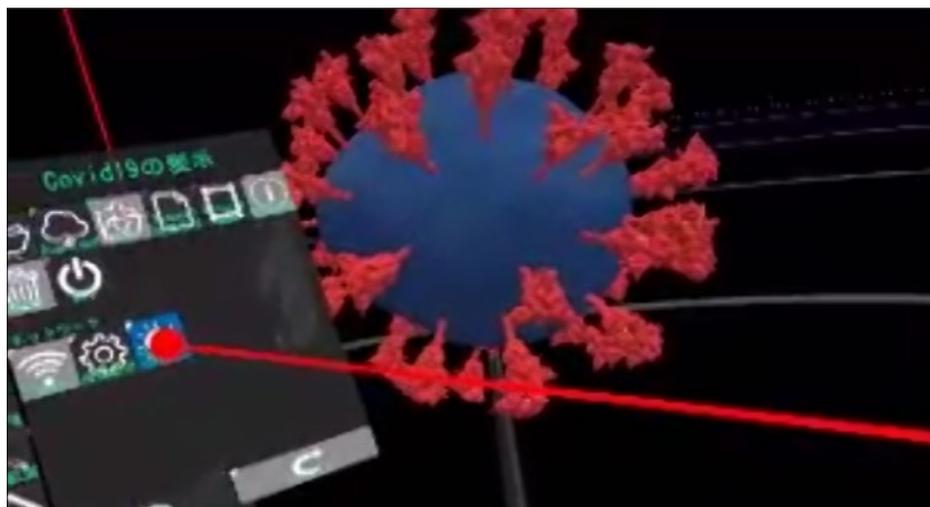
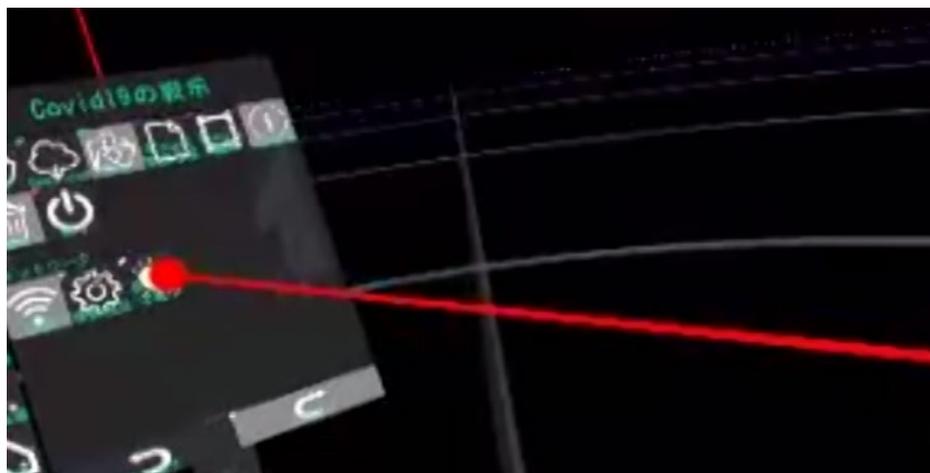
FileCanvas.prefab

VR空間内のUI

※表示処理の際に、表示オブジェクトの位置調整も実施。

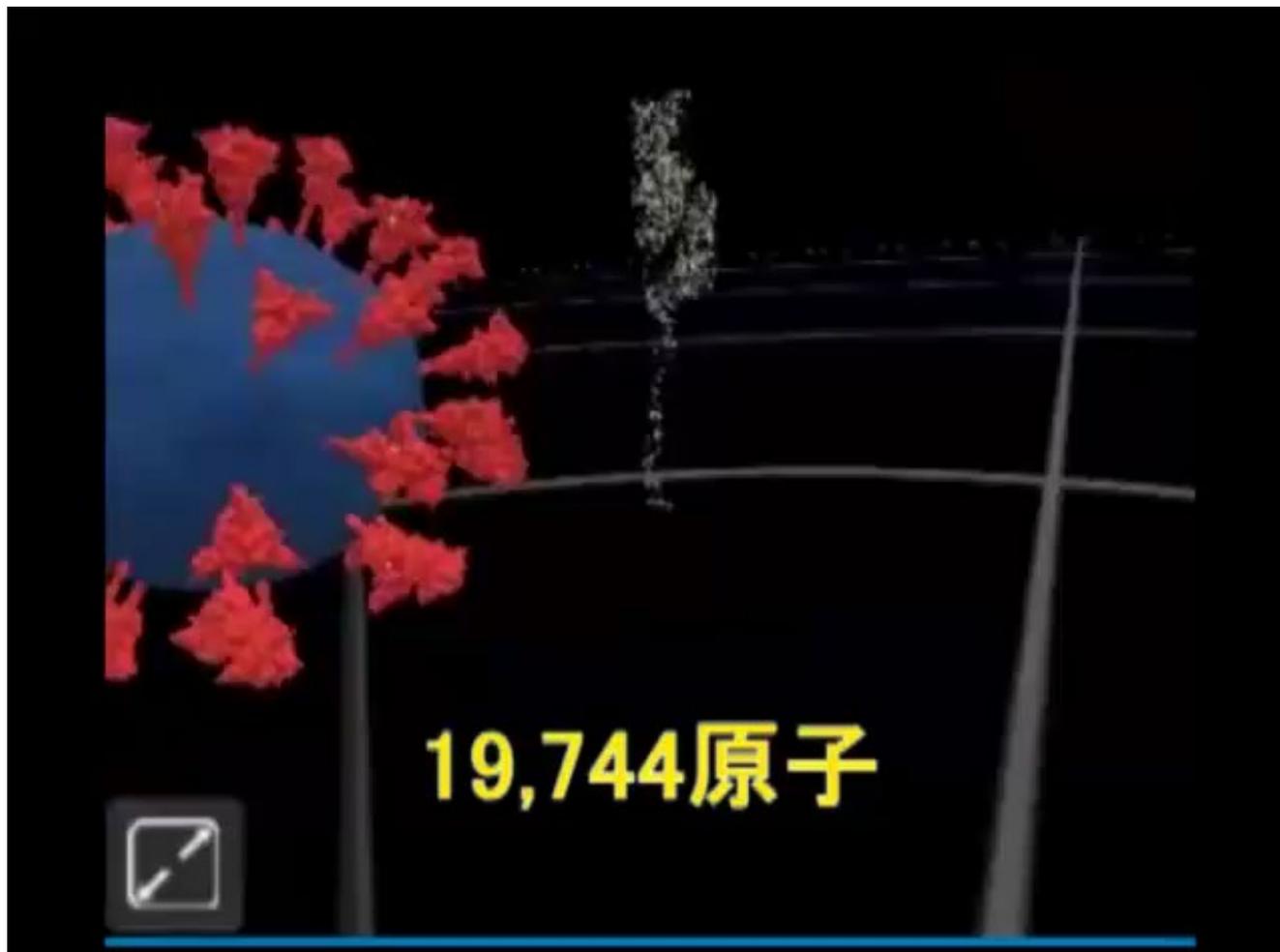
# ポリゴン表示ON/OFFの様子

- VR空間のキャプチャ動画



# VR可視化の様子

- VR空間のキャプチャ動画



# VR描画性能の評価

- 原子数の異なるモデルで、静止時と、動画時のFPS値を評価。



## 処理負荷の主要因

- ・静止画：  
VRトラッキング + UI処理
- ・動画：  
データ転送 + VRトラッキング + UI処理

	静止画	動画
19,744原子	約 30 fps	約 18 fps
73,272原子	約 10 fps	6~7 fps
332,712原子	(メモリ不足)	(メモリ不足)

# VR描画性能の評価



ベースのPCの性能が  
fps値を決定している。

		19,744原子		73,272原子		332,712原子	
		静止画	動画	静止画	動画	静止画	動画
機材1	1060	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 50 fps	約 45 fps	約 15 fps
機材2	1060mQ	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 60 fps	約 45 fps	約 20 fps
	2060 S	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 60 fps	約 45 fps	約 20 fps
	2070 S	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 60 fps	約 45 fps	約 20 fps
機材3	2070	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 70 fps	約 55 fps	約 25 fps
機材4	2060 S	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 80 fps	約 90 fps	約 25 fps
機材5	1650 S	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 80 fps	約 45 fps	約 20 fps
	2060 S	約 90 fps	約 90 fps	約 90 fps	約 80 fps	約 90 fps	約 25 fps

# 332,712原子の性能分析

- 動画の場合、CPUが性能限界？

	静止画	CPU	3D	V. Enc.	メモリ	CPU	3D	V. Enc.	メモリ
機材2	1060mQ	28%	58%	12%	1.5GB	90%	25%	5%	1.7GB
	2060 S	45%	37%	21%	1.8GB	90%	15%	5%	2.1GB
	2070 S	42%	39%	23%	1.8GB	90%	7%	4%	2.1GB
機材3	2070	32%	28%	20%	1.8GB	74%	9%	6%	1.8GB
機材4	2060 S	17%	34%	22%	1.9GB	61%	11%	6%	1.9GB
機材5	1650 S	3%	50%	18%	2.1GB	35%	18%	5%	2.1GB
	2060 S	3%	48%	19%	2.1GB	35%	17%	6%	2.1GB

# AVRでの性能評価

- VMDとPyMOLについて、AVR経由での性能評価。
  - PyMOLは、シェーダ対応なので高速化を期待。
  - 332,712原子の系
    - Stickの場合、GPUのメモリをオーバーして性能出ず。

AMD 3990X  
2.9GHz (64コア)  
RTX 2060 SUPER

VMD1.9.3	静止画	動画	PyMOL	静止画	動画
Lines	45 fps	45 fps	lines	89 fps	89 fps
Bonds	× (1-6)	× (0-5)	sticks	89 fps	20 fps
VDW	× (0-3)	× (0-2)	ball	89 fps	89 fps
NewCartoon	30 fps	30 fps	cartoon	89 fps	89 fps

AMD Ryzen 5  
3600 (6コア)  
RTX 2060

VMD1.9.3	静止画	動画	PyMOL	静止画	動画
Lines	44 fps <sup>*1</sup>	44 fps	lines	89 fps	75-85
Bonds	× (1-6)	× (0-5)	sticks	55-70	0.8-8
VDW	× (1-5)	× (0-4)	ball	89 fps	89 fps
NewCartoon	40 fps <sup>*2</sup>	40 fps	cartoon	89 fps	89 fps

\*1 再生を停止し、Frameを0に戻した時、急に89 fps出るようになる。詳細分析中。

\*2 分割数を下げると、89 fps出るようになる。

# まとめ

---

- COVID-19/SARS-CoV-2関連のVR教材コンテンツを作成してみた。
- MDのVRソフトである MolCollabo のSDKを用いて、Unityで、ポリゴン表示の機能拡張をした。
- MDのトラジェクトリ再生（動画）での表示性能を様々なGPUカードで評価した。
  - PCの性能の影響が大。（Unityのmulti-thread化に期待。）
  - PyMOLの評価から、GPUのキャッシュの利用が高速化に重要と判明。（今後改良予定）
- VIVE focus plus単体での性能評価もした。
  - デモには使えそう。（今なら、Oculus Quest 2？）