

分子ロボット倫理研究会

開催日： 2025年3月7日 午後1:30~5:00

開催場所： 北陸先端科学技術大学院大学知識科学棟 K1K2 講義室

主催： CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所

講演アブストラクト：

小長谷明彦（恵泉女学園大学, CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所, (株) 分子ロボット総合研究所)

「分子ロボットの過去、現在、未来」

2010年より日本から始まった「分子ロボット」の研究は、科研費新学術領域研究「分子ロボティクス」・学術変革領域研究「分子サイバネティクス」、JST「分子ロボット倫理」、NEDO「分子人工筋肉」・「VR 共創環境」などの支援を経て「分子ロボティクス」という研究分野として定着しつつある。CBI 学会では2024年4月から「分子ロボティクス研究会」が、CBI 研究機構では2024年11月より「生体分子デザイン研究所」が発足し、DNA やタンパク質などの生体分子に化学修飾を加えた de novo 分子設計による人工分子システムの構築が視野に入るようになってきた。アメーバ型分子ロボットを端緒とするこれまでの分子ロボット研究を振り返り、分子ロボットの社会実装に向けた取り組みならびに分子ロボット倫理の意義について論ずる。

小野喜志雄（CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所）、小長谷明彦（恵泉女学園大学, CBI 研究機構先端領域 ELSI 研究所)

「分子ロボット医療応用ガイドライン（案）」

近年の分子ロボット技術の進歩は目覚ましく、さらに新しい技術開発も次々と出てこようとしており、医療分野や環境分野への貢献も間近という状況になりつつある。そのような中、医療分野で分子ロボットを開発するためには、患者や一般の人々にも信頼を得る必要があり、安全性と有効性、品質の確保が重要であることは当然のことである。また倫理面での配慮も重要である。すなわち、ある疾患に用いる場合はその疾患が良くなることが当然に必要なとともに、安全性も確保されなければならない。また、倫理的にも特別な問題ないことが要求される。このような分子ロボットを開発するのにどのようなことが必要になってくるのかということを示していくために本ガイドラインを作成した。なお、分子ロボットの分野は進歩が早く、次々と新たな技術が開発されてくることが予想されるために、個々の技術について詳述しても将来的には本ガイドラインでは役に立たなくなってくることも起こりうると考えられることから、今回はできるだけ原則に従って基本的な考え方に焦点を置いて記載していくことにした。また、個々の分子ロボット治療用製品の開発において、詳細な技術が本ガイドラインには掲載されていないこともあり得るの

で、医療用に活用する場合にはできるだけ早急に PMDA との協議を始めること。また、今回、本ガイドラインの中で分子ロボットの定義や分類なども新たに策定していくことにしており、さらに現在開発中のナノ関係の治療法を分子ロボット治療として分類する試みもしている。本ガイドラインが今後の医療分野のみならず、多くの分野で分子ロボットの発展に貢献することができれば幸いである。

Gregory Gutmann (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Akihiko Konagaya** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.)

"Unlocking Constrained Interactive Molecular Simulation: Harnessing GPU, Cloud, VR, and AI"

This presentation marks the culmination of a multi-year research endeavor to develop a Constrained Interactive Molecular Dynamics Simulation environment aimed at uncovering previously unknown forces that govern molecular structures and interactions. Leveraging this environment, our team successfully generated a double DNA crossover using an in-house 3D DNA sequence alignment tool, demonstrating the capacity to discover novel structural formations.

To enable interactive, human-in-the-loop molecular simulations, we harness a suite of advanced technologies—GPU acceleration, cloud-based computation, 5G connectivity, HCI principles, VR immersion, and AI for latency mitigation. As a result, researchers can directly observe and manipulate large molecular assemblies, gaining deeper insights than static visualizations allow. We also introduce a scalable VR platform, along with a custom controller featuring internal tracking for diverse hardware configurations. By increasing capabilities and lowering barriers to exploration, our system provides a promising avenue for advancing molecular understanding, fostering scientific collaboration, and supporting micrometer-scale device design—ultimately transforming the study, simulation, and engineering of complex molecular dynamics.

Ma Chen (Science Tokyo, Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Masayuki Yamamura** (Science Tokyo), **Gregory Gutmann** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Akihiko Konagaya** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.)

"Hand Motion Tracking for VR Controllers Using a Single IMU, ToF Sensor, and Deep Learning"

Virtual Reality (VR) technology has rapidly advanced in recent years, and one of the critical factors influencing the user experience is the interaction with the VR environment. Conventional VR controllers, while functional, often fail to provide the level of immersion and

intuitive feedback required for a truly engaging experience. For example, most VR controller tracking systems rely on multiple external devices—such as base stations (Lighthouse) or built-in camera arrays—which can be expensive and not universally applicable. To address these issues and create a low-cost, widely compatible solution, we have designed a VR controller that uses only one IMU (Inertial Measurement Unit) sensor and one ToF (Time of Flight) distance sensor. However, IMU-based tracking faces a significant challenge due to drift from double integration of acceleration data. Even minimal sensor noise can accumulate into significant positional errors. Existing IMU tracking solutions for foot or body motion offer some insight, but hand motion is more complex and variable, making it particularly difficult to track accurately. In addition, real-time constraints limit the data buffer size available for drift correction. To overcome these issues, we propose a novel VR controller that incorporates AI algorithms to enhance real-time user interaction, and provide adaptive feedback based on user behavior and environmental changes.

Han Quihan (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Sae Kishi** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Gregory Gutmann** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Akihiko Konagaya** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.)

“3D DNA sequence generator for interactive constrained molecular dynamics simulations”

Designing curved DNA double helix structures is a non-trivial challenge in DNA origami modeling. Most DNA origami models struggle with the lack of curved DNA double helix structures, primarily due to the complexity of calculating the helical structure necessary for base-pair alignment. To address this issue, we have developed a simple yet effective tool called the 3D DNA Sequence Generator. This tool compiles aligned DNA sequences into corresponding 3D DNA models for interactive, constraint-based molecular dynamics simulations. Its effectiveness is demonstrated through successful modeling of circular DNA double helices, DNA double crossovers, and other structures.

中田登志之 ((株) 分子ロボット総合研究所), **Gregory Gutmann** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **小長谷明彦** ((株) 分子ロボット総合研究所)

「CUDA と MPI を用いた分子動力学シミュレーションのハイブリッド手法の研究」

本研究では、CUDA と MPI を活用した分子動力学シミュレーションのハイブリッド手法について述べる。CUDA を用いた GPU アクセラレーションと MPI による並列計算を組み合わせることで、シミュレーションの計算効率を大幅に向上させることを目的とする。400 万個の NaCl 分子を対象に、弊社所有の A100 × 8 台の GPU クラスタで評価を行った。その結果、1 プロセス+CUDA では、500 タイムステップの平均実行時間は 1 タイムステップあたり 1.200 秒であったが、8 プロセスでは 0.179 秒となった。この結果、1 プロセス

に対して 6.703 倍の速度向上が得られた。また、筑波大学計算科学研究センターの「学際ハブ拠点スパコンお試し制度」を利用し、H100 搭載のスーパーコンピュータ Pegasus でも評価を行った。その結果、1 ノードでの 1 ステップあたりの計算時間は 1.103 秒となったのに対して 8 ノードでの 1 ステップあたりの計算時間は 0.148 秒となった。この結果、1 プロセスに対して 7.25 倍となった。

廣井聡一郎（東京大学大学院総合文化研究科・特任研究員）、**豊田太郎**（東京大学大学院総合文化研究科）、**小長谷明彦**（(株)分子ロボット総合研究所）

「合成データセットを活用した深層学習によるジャイアントベシクル 3 次元画像の鮮明化」

ジャイアントベシクル (GV) は、細胞膜と同様のサイズと構造をもつ分子集合体であり、その 3 次元形態は、細胞膜モデルとしての機能評価にとって極めて重要である。一方、従来の撮像法では、GV の 3 次元画像の鮮明度に課題があった。本発表では、合成データセットを活用した深層学習により、GV の 3 次元画像における空間的不整合を補正し、鮮明度を向上させる手法について報告する。

近藤洋隆（関西大学）、**葛谷明紀**（関西大学）、**小長谷明彦**（(株)分子ロボット総合研究所）

「生成 AI を活用した分子モデリング支援環境の開発」

分子設計の共創環境において、直感的な理解を促進する VR 環境が魅力的なアプローチとして注目されている。一方、従来の VR コントローラーやハンドジェスチャーを用いた操作には、複雑な手順や習熟の難しさという課題が残されている。近年、自然言語処理は特に音声認識の分野で目覚ましい進展を遂げ、大規模言語モデルの発展により実用化の域に近づいている。VR と音声ベースのインタラクションの融合は、ユーザーの操作負担を軽減し、観察への集中力を向上させ、より深い没入体験をもたらす可能性がある。本研究では、VR シミュレーション環境内で自然な音声指示により操作可能な生成 AI を活用した分子モデリング支援環境を提案する。システムは、音声認識、大規模言語モデル、音声合成の各技術を統合し、ユーザーがアミノ酸配列からタンパク質の三次元構造予測、MD シミュレーションの実行、さらにはその結果の可視化といった一連のプロセスを、会話形式で計算化学の非専門家でも直観的に操作できる環境の実現を目指している。

Zhang Yuhui (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Gregory Gutmann** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.), **Akihiko Konagaya** (Molecular Robotics Research Institute Co., Ltd.)

“Researcher-friendly VR Molecular Dynamics Viewer: Unity3D Apps for Massive VR Molecule Rendering”

Modern game engines, such as Unity3D, are often optimized to strike the perfect balance

between raw performance and ease of development. Such design goals make it ideal for a Molecular Dynamics (MD) research platform with Virtual Reality (VR), where researchers can easily implement desired functionalities. However, MD software often utilizes highly-customized rendering logic, as MD scenes often contain many individual, simple objects (e.g., atoms), significantly differentiating them from typical rendering scenes. Therefore, game engines are not optimized for MD, and MD softwares often use lower-level graphics APIs.

In this work, we present a novel system for MD research in VR, based on Unity3D. Starting from a customized rendering pipeline with GPU culling and instancing, our system provides trajectory animation renderings, intuitive VR interface for navigation and MD workflows, and tools for real-time visualization of running server-side simulations. We will also discuss our future work improving the rendering capacity of our system, ultimately enhancing research at a molecular scale.

以上