

Дополненная реальность для демонстрации белковых структур

Введение

Одной из важных задач биоинформатики является докинг —стыковка малой молекулы — лиганда к выбранному месту на белке с целью изменения его активности: катализатор - усиление, ингибитор — ослабление. Этот процесс необходим для разработки лекарств. При докинге очень важна именно третичная структура белка и его форма в пространстве. Зачастую перед докингом биологу необходимо её рассмотреть с разных сторон для более полного представления. Для этого применяются системы виртуальной и дополненной реальностей с использованием компьютерного зрения.

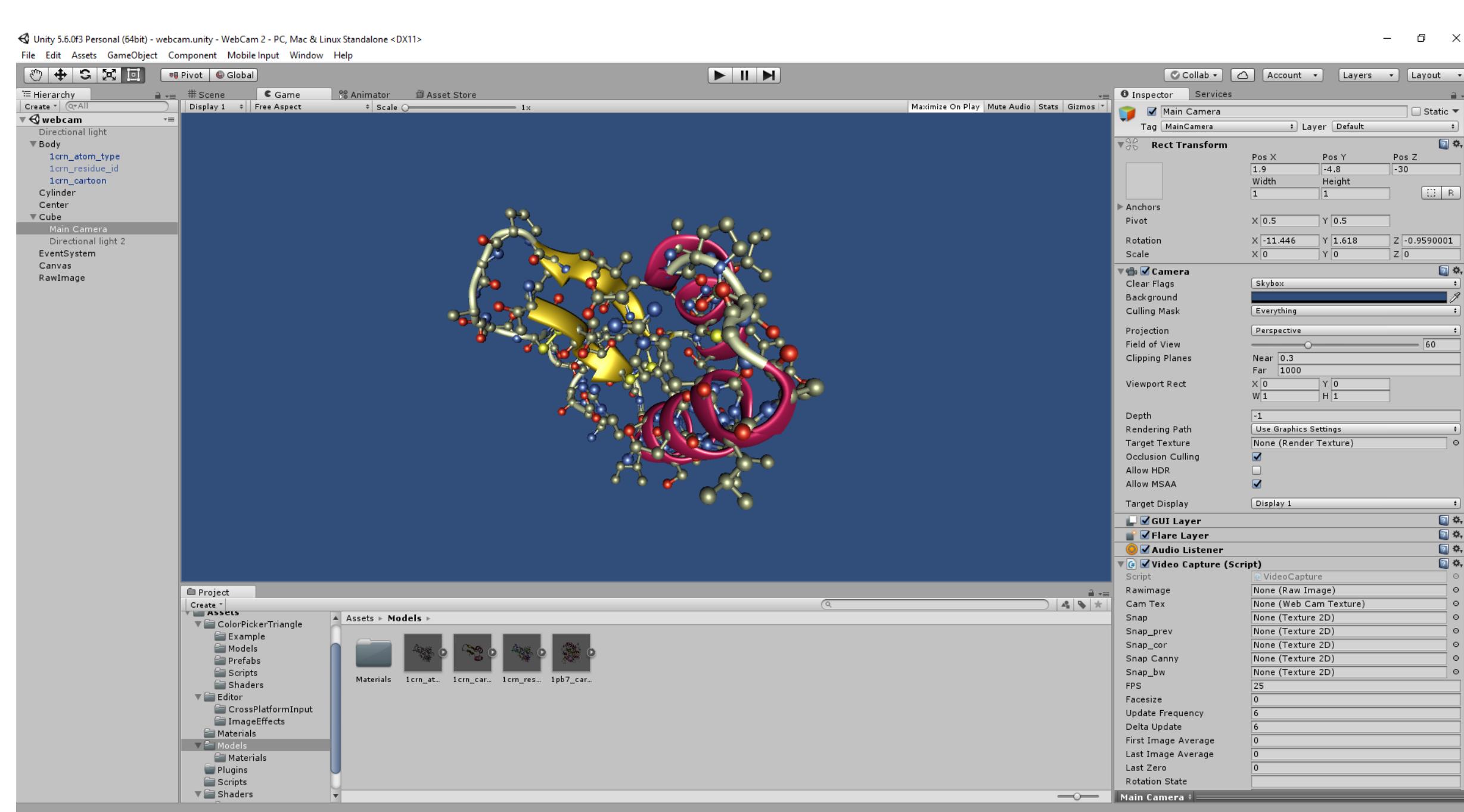
Компьютерное зрение — молодое, однако разнообразное и динамично развивающееся направление. Область применения компьютерного зрения весьма обширна: от распознавания текста до создания автопилотов.

Цели и задачи

- Создание алгоритма, отслеживающего перемещение лица на статичном фоне.
- Не должно требоваться наличие дополнительного оборудования или маркеров.
- Применение алгоритма в приложении, которое должно демонстрировать 3D-модель белковой структуры, поведение которой на экране зависит от движений человека перед компьютером.

Инструменты

- Программа для разработки трехмерных приложений Unity 3D.
- Язык программирования C#.
- Среда разработки Microsoft Visual Studio.



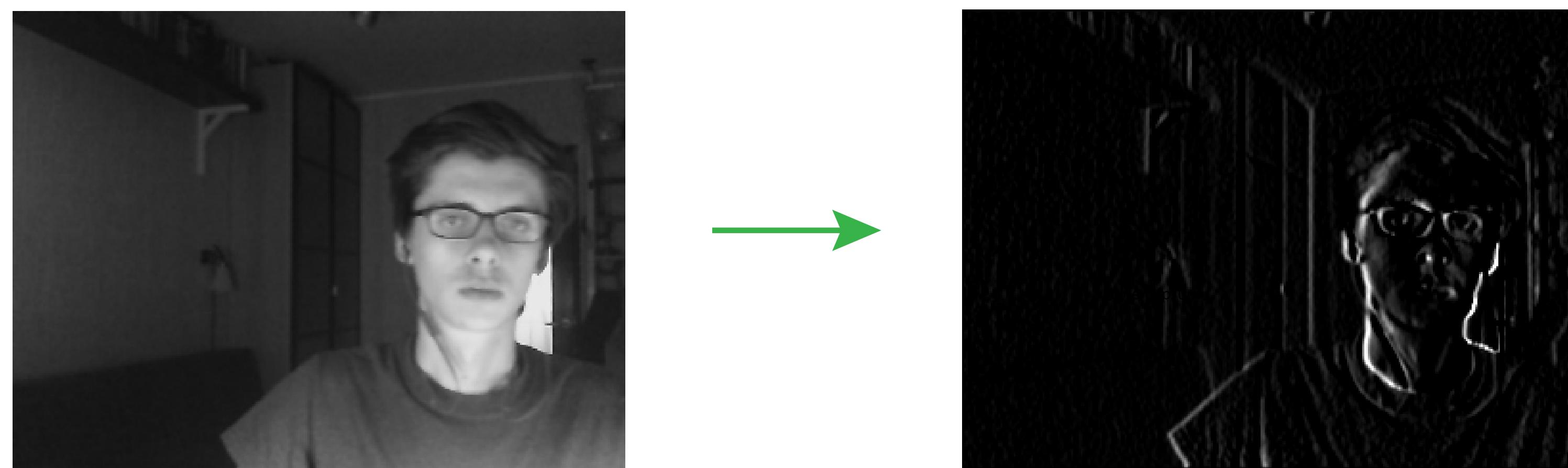
Интерфейс Unity 3D (на сцене растительный белок 1CRN)

Аналоги

Изначально работу планировалось выполнить с использованием OpenCV — одной из самых популярных библиотек компьютерного зрения. Данная библиотека весьма обширна и спектр ее возможностей очень широк, в частности она позволяет отслеживать положение лица. Однако впоследствии выяснилось, что использование библиотеки влечет за собой необходимость в слишком большой вычислительной мощности. Еще одной программой, имеющей схожие функции, является Intel RealSense. Однако, для работы с ней нужна специальная камера глубины, а требовалось создать приложение с использованием только веб-камеры, причем независимо от ее качества.

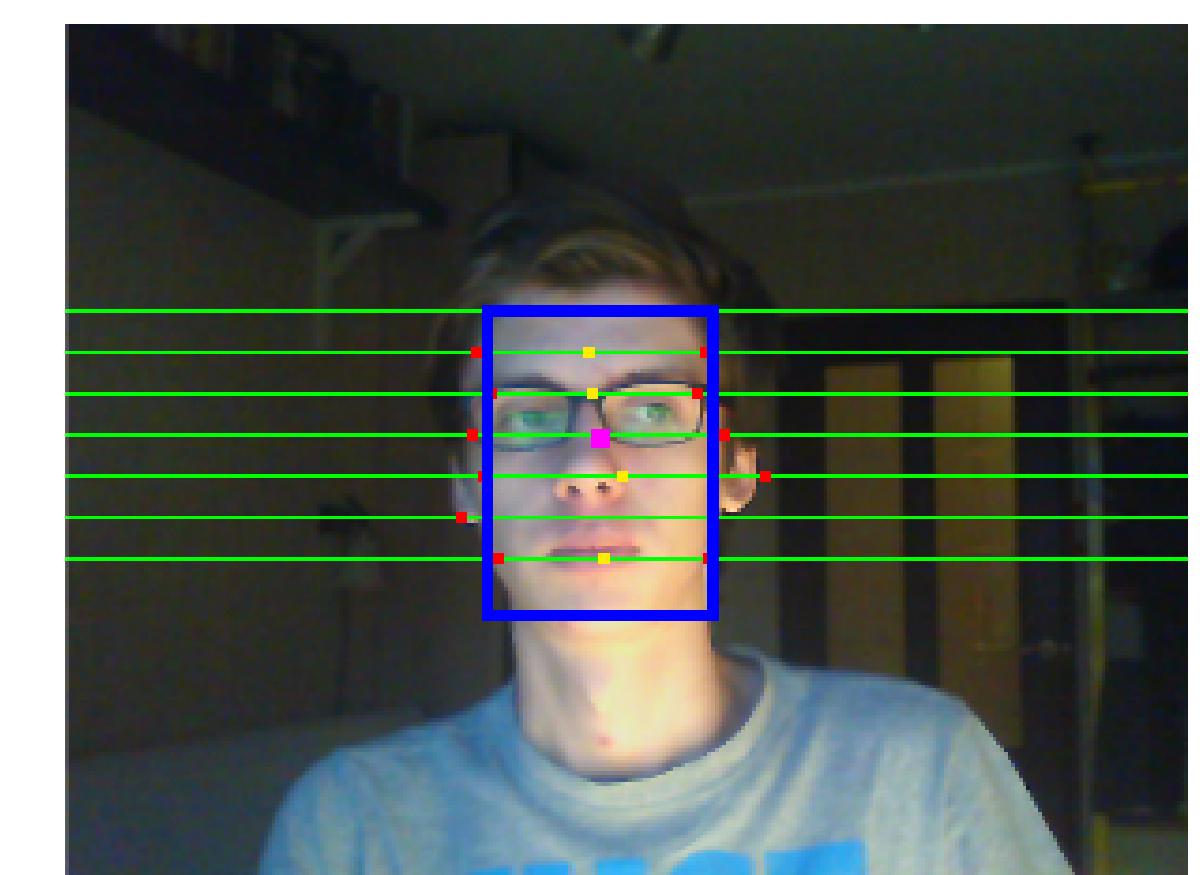
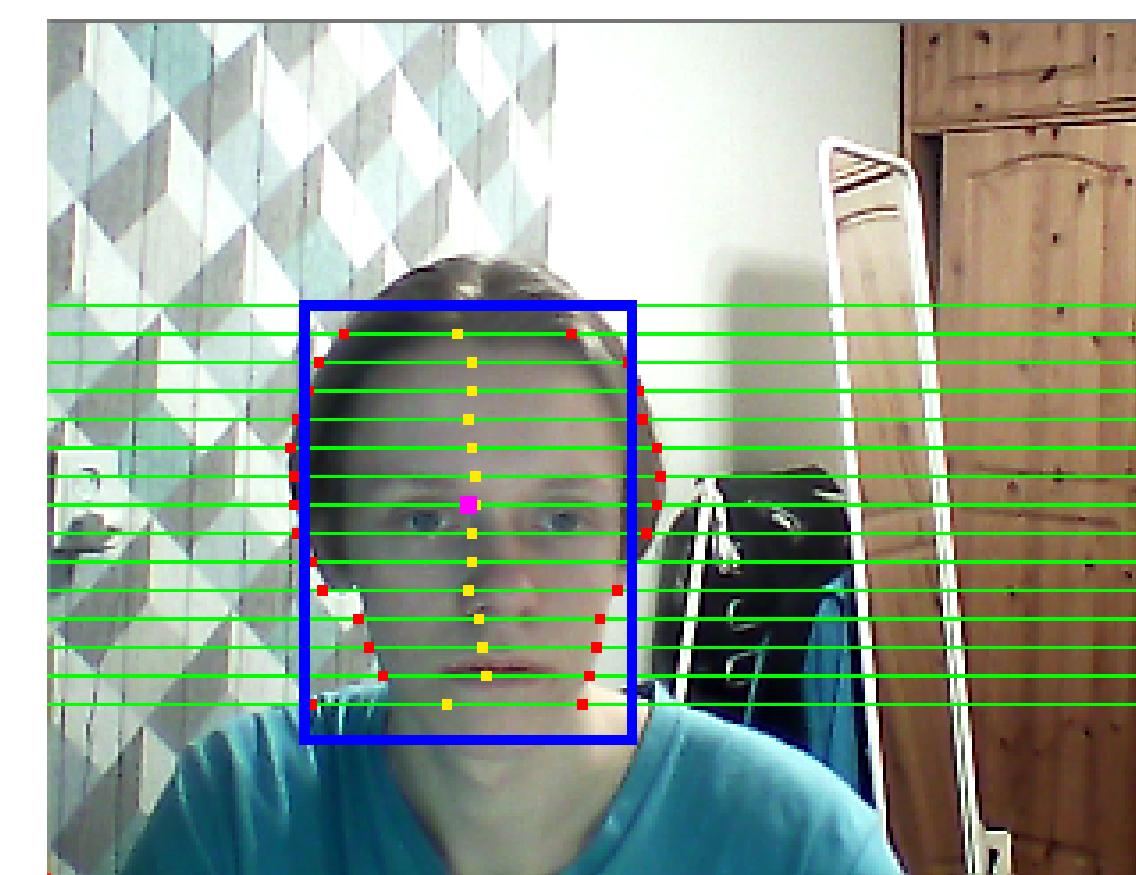
Подход к решению

- Основной идеей стал анализ изображения на контуры.
- Мы выбирали несколько горизонтальных прямых и на них применяли оператор Собеля, выделяющий резкие переходы по яркости на



Пример работы оператора Собеля

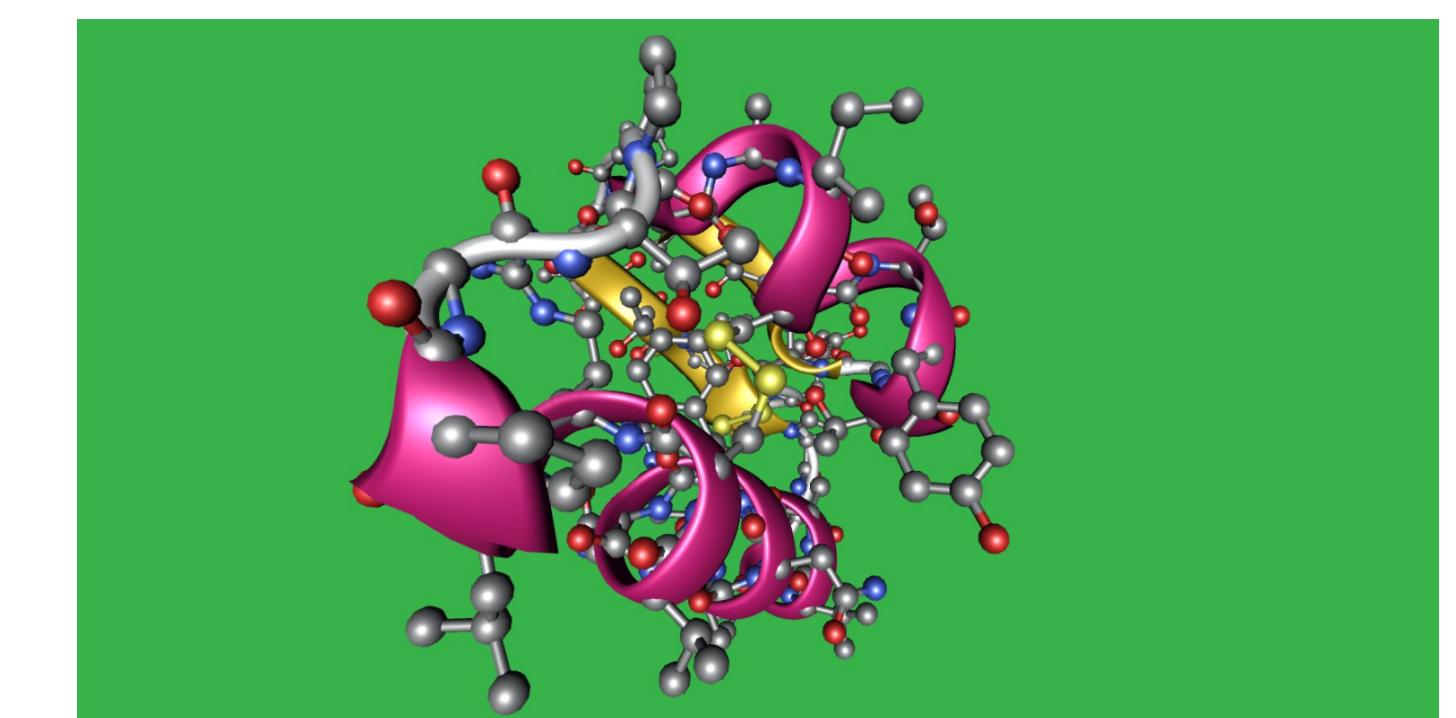
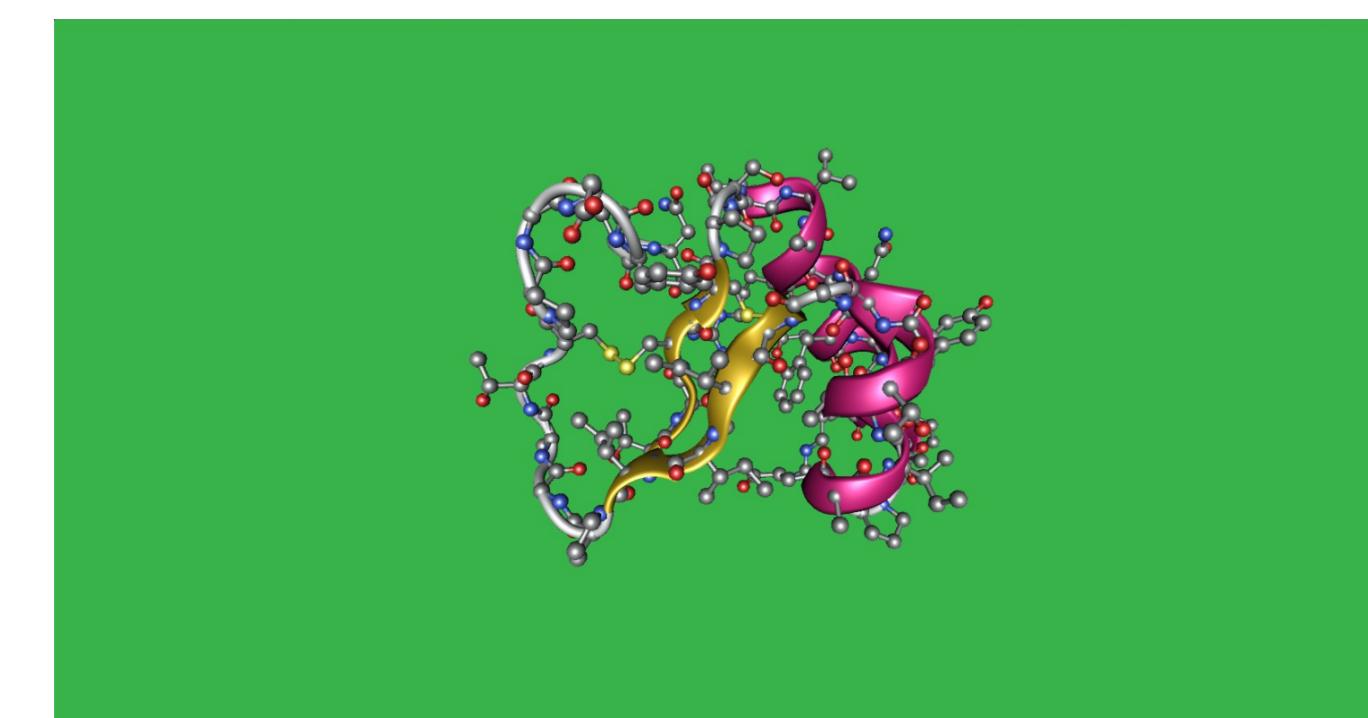
- Затем мы искали самые резкие переходы по яркости, после чего подвергали их проверке, чтобы оставить только максимумы, лежащие на границах лица (по одному максимуму на каждую сторону).
- Чтобы избавиться от максимумов, лежащих на фоне, мы создали несколько фильтров.
- Для оставшихся пар максимумов считалось среднее, которое тоже подвергалось фильтрации. Затем среднее по этим значениям мы считали центром лица.
- На основе расстояний между максимумами мы считали ширину лица, а затем его высоту в соответствии с пропорциями лица человека. Таким образом мы заключали лицо в прямоугольник.
- Далее прямые могли находиться только в нем и двигались вместе с ним.



Красные точки — максимумы; желтые точки — средние; розовая — центр лица.

Приложение

- В качестве объекта использовалась 3D модель третичной структуры белка.
- Из двух значений положения лица (текущего и предыдущего) вычислялось куда и на сколько следует поворачивать модель.
- Были добавлены дополнительные инструменты, для облегчения работы с программой (поворот, перемещение, отдаление, настройка веб-камеры).



Результаты и пути развития

В результате поставленные задачи были выполнены.

- Создано приложение для взаимодействия с 3D моделями.
- В основе лежит алгоритм, отслеживающий положение лица.
- Не требуется большая производительность.

Проект доступен по ссылке: <https://github.com/fastrazor/unityfacetect>

Идеи для улучшения нашего приложения и алгоритма:

- Добавление распознавания частей лица поможет точнее определять его положение.
- Оптимизация алгоритма позволит улучшить производительность.
- Добавление технологии *Level of Detail*.
- Перенос приложения на мобильные устройства.

Вывод

- Мы изучили способы анализа изображений нахождение объектов.
- Мы познакомились с программой Unity 3D и языком программирования C#.
- Мы усовершенствовали навыки поиска информации и работы с документациями.
- Мы набрались опыта работы в команде впервые поработали над подобным проектом с научным руководителем.

Литература

- <habrahabr.ru/post/142818>
<youtube.com/watch?v=uuhBwtPIBxM&t>
<youtube.com/watch?v=sRFM5IEqR2w>
<docs.unity3d.com/Manual/index.html>
en.wikipedia.org/wiki/Sobel_operator