



VR-MD: スマホ VR で実施する分子動力学計算による 化学教育効果の検証

Verification of the Chemistry Educational Effect of Molecular Dynamics Simulation
in Smartphone Virtual-Reality System

松田健郎¹⁾, 吉川信明¹⁾, 梶田晴司¹⁾, 佐藤宗太²⁾, 谷川智洋³⁾

Kenroh MATSUDA, Nobuaki KIKKAWA, Seiji KAJITA, Sota SATO and Tomohiro TANIKAWA

1) 株式会社豊田中央研究所 (〒 480-1192 愛知県長久手市横道 41-1, Kenroh.Matsuda.es@mosk.tytlabs.co.jp)

2) 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻 (〒 277-0882 千葉県柏市柏の葉 6-6-2)

3) 東京大学次世代知能科学研究センター (〒 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)

概要:

化学教育現場における VR 技術活用の期待が高まっている [1][2]. 専門家と初心者の円滑なイメージ共有・理解度向上を目的に, スマートフォンで動作する分子動力学 (MD) 計算を内包した化学教育用アプリケーション「VR-MD」を試作した. MD 計算によって分子座標はリアルタイムに更新される. また体験者が分子に触れて動かすことも可能である. さらに授業内容に合ったコンテンツの作成, 安全性を考慮した改良を行った上で高校での出張講義で実用した. 授業後に実施した 7 段階評価アンケートおよび自由記述アンケートの結果から理解度や学習意欲向上の効果が確認できた.

キーワード: 化学授業, スマホ VR, 分子動力学計算

1. はじめに

近年の VR 技術の発展を受け, 教育現場での期待も高まっている. 化学教育では様々な物質を構成する分子の特性を理解するため, その構造を理解することが重要である. 中学では分子を単純な二次元構造で学ぶことが多いが, 高校～大学に進むと複雑な三次元構造や化学結合, 経時変化する動きを学ぶこととなる. そのため, 教科書のような二次元媒体だけでは理解が困難となり, 化学に対して苦手意識を持ってしまうことが課題となっている.

そこで本研究では, スマートフォンで動作する分子動力学 (MD) 計算を内包した化学教育用アプリケーション「VR-MD」を試作した. MD 計算によって分子座標はリアルタイムに更新される. また体験者が分子に触れて動かすことも可能である. さらに授業で必要となる機能を実装した上で, 高校での出張講義で使用した内容について報告する.

2. 化学教育用アプリケーション「VR-MD」

共同研究を行った東京大学佐藤宗太特任教授は毎年, 高校での出張講義を実施している. 2021 年のテーマは「分子間の水素結合」であり, 以前の授業では実験をベースに実施されていた. そのときの課題として, 実験で生じた現象をもとに教科書などの図や口頭で説明しても, 先生の頭の中にある分子イメージを生徒たちに伝えることが困難であったことが挙げられる. そこで, 直感的な体験を得意とする VR で「分子を目で見て触る」ことで生徒たちの理解を補助

できるのではないかと考えた.

2.1 VR 利用の要件

出張講義への VR 利用にあたり, 本研究では以下のような要件を定めた.

- 授業に参加する生徒全員が体験できる
- 体験中も周囲の状況を簡単に確認でき, 危険なときには直ちに中断できる
- ネットワークを利用せず, スタンドアロンで動作する
- 分子を自由に観察でき, 触って動かすことができる

出張講義には約 30 名の生徒が参加する. ここで体験人数を制限すると, VR 体験の有無によって各生徒の学習内容に差が発生してしまう. そのような不公平を無くすため, 全員が体験できることが望ましい.

生徒たちは同じ教室に集まり, 教室に固定された机を最大 3 名が横並びで利用する. 椅子を机の下に戻した状態であれば, 多少の距離を移動することも可能である. しかしながら, 生徒全員が一斉に体験するため, 生徒同士や机, 椅子にぶつかって怪我をするリスクを伴う. そのため, 体験中も周囲の状況を簡単に確認でき, 危険なときには直ちに中断できることが望ましい.

教室で安定したネットワーク利用が可能であるかは出張講義当日まで不明である. このことから, PC 上で VR 映像を生成して遠隔で表示するといった方法は授業不可とな



図 1: 出張講義で使用した手持ち型スマホ VR.

るリスクを伴う。そのため、使用する VR デバイスはスタンドアロンで動作することが望ましい。

2.1.1 VR デバイス

本研究では、上記の要件を満たす VR デバイスとして、スマートフォンを手持ち型の VR ゴーグルに取り付けたスマホ VR を採用した (図 1)

近年、様々な VR デバイスが一般販売されているが、授業用に人数分を保有している学校は稀である。また出張講義のために VR デバイス約 30 台を準備するのは困難である。そこで中古のスマートフォン (Apple 社製 iPhone7) を再利用し、予備を含めた約 50 台を準備することで、授業に参加する生徒全員が体験可能とした。

また頭に固定するヘッドバンド型の VR ゴーグルと異なり、手持ち型の VR ゴーグルは即座に着脱でき、目の周りを覆うカバーもないため、体験中も周囲の確認がしやすい利点がある。没入感には劣るものの、夢中になりすぎて先生の指示を聞き逃すような状況も軽減できると期待される。

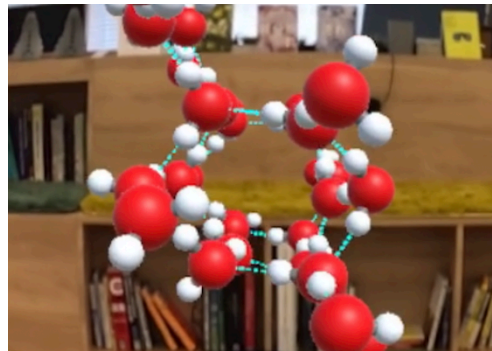
2.1.2 ハンドトラッキングによる直感的操作

スマートフォンのセンサや背面カメラを利用した 6DoF およびハンドトラッキングシステムを導入した [3][4]。スマートフォンには外付けのコントローラが付属していない。そのため、体験者位置が固定される 3DoF や視点による操作が一般的である。しかし、分子の立体構造の確認や位置を動かすといった体験には不向きなため、VR ヘッドマウントディスプレイと同様の操作方法を導入した。加えて、手モデルと分子モデルとの距離感を補強するため、それらの間に白色の破線を表示した。

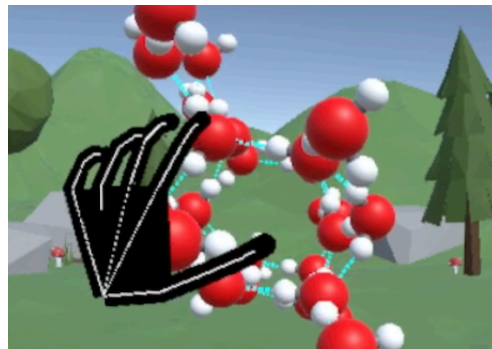
2.1.3 VR/AR の自動切り替え

本研究では、周囲を把握しながら安全に移動して分子構造を観察できる AR モードと、分子を実際に触る際に操作に集中できる VR モードを、2.1.2 による手認識に基づいてシームレスに切替える機能を実装した (図 2)。

VR のみである場合、手持ち型の VR ゴーグルを利用しても、VR 空間で前が見えにくい状態で移動することは危険が伴うと考えた。そこで、アプリケーション起動時はスマートフォンのカメラで撮影した周囲の映像を背景に表示して AR とした。これにより、分子構造を確認するだけであれば周囲の状況を把握しながら移動することができる。



(a) 手認識なし: AR



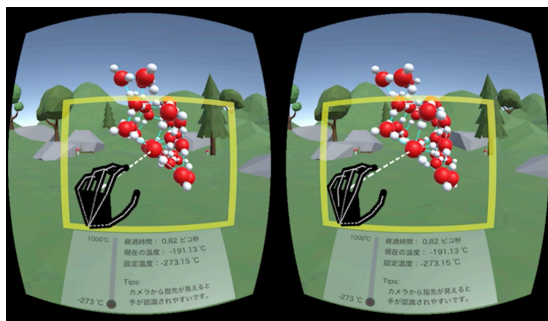
(b) 手認識あり: VR

図 2: AR/VR 切替機能. (a) 分子構造を観察するときは周囲の映像を背景に表示. (b) 分子に触れるときは VR 空間を表示.

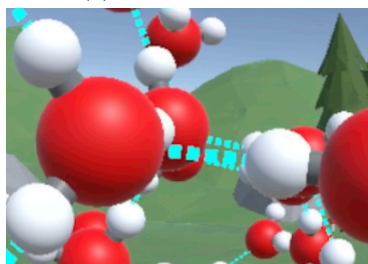
AR のみである場合、分子に触れようとして手を伸ばすと体験者の手と手モデルが重なって表示される。作成途中に数名で試行したとき、上記のような表示に違和感を覚える場合があった。体験者の手が表示されていると、そちらに意識が向いてしまい、体験者の手で分子に触れようとしてしまう。加えて、位置補正などの処理が常時実行されているため、手モデルは体験者の手よりもわずかに遅れて移動する。これらによって、分子に触れる・掴む動作にズレが生じてしまうことが主な要因であった。そこで、体験者の手を認識しているときは VR に切替えることで手モデルだけが見えるようにした。

2.2 授業に合わせたコンテンツ

本研究では、「核酸塩基対」「水分子クラスター (図 3a)」「分子ベアリング [5]」の 3 コンテンツを作成した。これらのコンテンツでは、原子を各色の球、原子の結合を灰色の円柱、分子間の水素結合を水色の点線として表示した (図 3b)。これらの表示方法は専門家には一般的であるが、初心者にはそれぞれの意味を説明する必要がある。本研究では、先生の講義中に CG オブジェクトの意味合いや学ぶポイントの説明を行った上で体験することにした。また、MD 計算で分子座標を制御することで実際の分子の動きを再現した [4]。さらに、温度による水素結合の変化を学ぶため、温度変更用スライドバーや現在の温度などを表示するパネルを下部に配置した。



(a) 水分子クラスター



(b) 水分子周辺の拡大図

図 3: 出張講義用コンテンツ。図中は水分子クラスターを例示。



図 4: 出張講義の様子。32名の生徒がVR-MDを体験中。

3. 出張講義における検証

3.1 VR-MDを使用した授業

2021年11月に開催された出張講義（講義時間が約60分、質疑応答・アンケート記入が約20分）で、試作した化学教育用アプリケーション「VR-MD」を使用した（図4）。授業は高校1～2年生の32名が参加し、佐藤先生の講義とVR-MDの体験（5～10分間程度）を交互に行う形式で進めた。また初めての試みであるため、体験時の混乱によって授業に遅延が発生することを想定し、初回体験時や困った際の補佐として6名が待機した。しかしながら、生徒達の適応力が高く、VR-MDの操作にも短時間で慣れていたため、授業は遅延なく進行的した。

3.2 授業後のアンケート

VR-MDによる教育的効果を確認するため、授業後に7段階評価アンケート（表1）と自由記述アンケートを実施した。後者は例年実施されており、同様の授業内容のアンケート結果（2018年、VR未使用）があったことから感情分析を用いた比較も実施した。

表 1: 7段階評価アンケート。全9項目で1-1～5は理解度、2-1～3は操作性、3-1は期待度を評価する項目。

1-1	今回のVR教材を使用することで、化学に対する学習意欲が湧いた
1-2	今回のVR教材を使用することで、水素結合を理解しやすかった
1-3	今回のVR教材を使用することで、分子の3次元構造を理解しやすかった
1-4	今回のVR教材を使用することで、分子の温度変化を実感しやすかった
1-5	今回のVR教材を使用することで、分子の世界を身近に感じた
2-1	今回のVR教材では、簡単に分子を触ることができた
2-2	今回のVR教材では、簡単に分子を掴むことができた
2-3	今回のVR教材では、簡単に温度を変更できた
3-1	今回のVR教材を、授業でも使用して欲しい

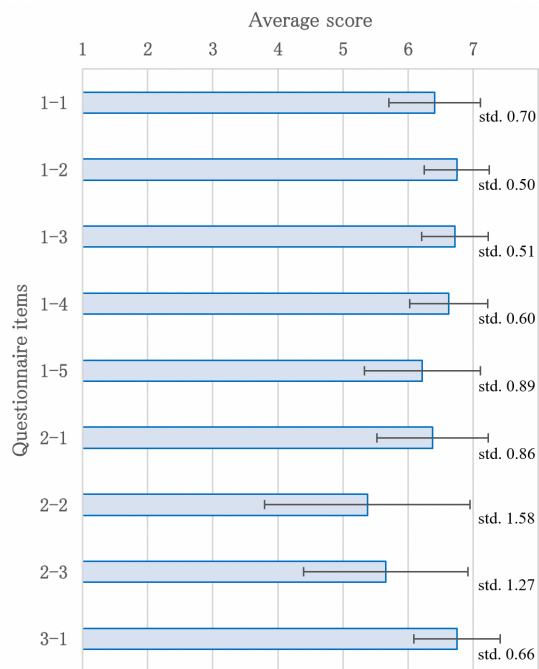


図 5: 7段階評価アンケートの平均スコアと標準偏差 (std.)。スコアは値が大きいほど高評価を意味する。

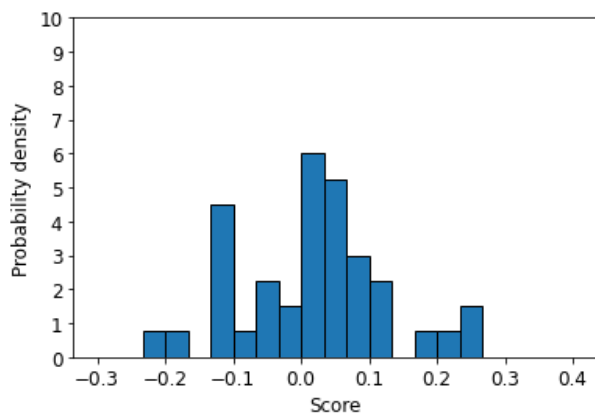
3.2.1 7段階評価アンケートの結果

回答があった32名分の評価結果から平均スコアと標準偏差を求めた結果を図5に示す。どの項目も平均スコアは5以上と高い評価が得られた。特に理解度に関する項目では多くの人が最高点に近い評価であったことから、専門家である先生の分子イメージを初心者である高校生と共有できたと考える。

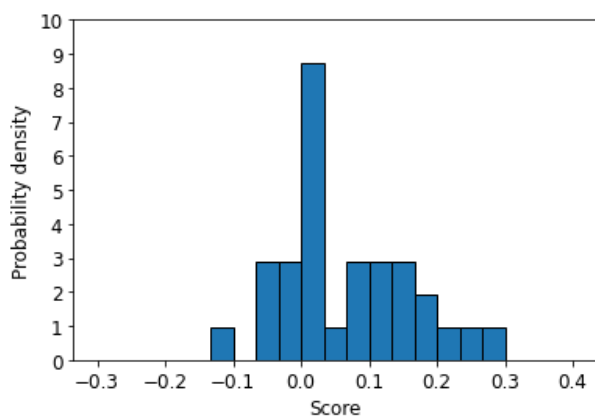
3.2.2 自由記述アンケートの結果

回答があった31名分（1名未回収）の内容から一例を示す。

- 水素結合はずっと教科書を読んでもよく分からなかったので今回やっと理解することができて感動しました



(a) 2018年, VR未使用



(b) 2021年, VR使用

図 6: 感情分析のスコア分布。値が小さいほどネガティブ、大きいほどポジティブであることを表す。単語感情極性対応表からスコアが-0.95 以下および 0.95 以上の単語を使用。

他の生徒も同様の意見が多い印象であり、7段階評価アンケートの結果とも一致する。

本アンケートと2018年のアンケートの記載内容を比較するため、感情辞書ベースの感情分析を実施した。その結果を図6に示す。2018年と2021年の分析結果を比較すると、後者の方がポジティブな意見を書いた人が増えているように見える。これらに有意な差があるかを確認するため、二群間の比較を実施した。

2つのアンケート結果は独立であるため、正規性を Shapiro-Wilk 検定で確認した結果、図 6a は $p=0.695$ で「正規性あり」、図 6b は $p=0.185$ で「正規性あり」となった。次に

等分散性を F 検定を確認した結果、 $p=0.597$ で「等分散性あり」となった。最後に二群比較として Student の t 検定で確認した結果、 $p=0.0497$ で「平均値に差がある」となったことから、2つのアンケート結果には有意な差があると考えられる。

4. 結論

本研究では、化学教育用アプリケーション「VR-MD」を試作し、高校生 32 名が参加する出張講義で使用することで教育的効果を検証した。授業後に実施した7段階評価アンケート結果を集計したところ、特に理解度関連の項目で高い評価が得られた。このことから、専門家である先生の分子イメージを初心者である高校生と共有できたと考える。また自由記述アンケートは、授業内容に近い2018年のアンケートとともに感情分析を実施した結果、VRを使用した今回(2021年)の方がポジティブな意見を持つ人が増え、学習意欲が向上したと考える。

今後は、複数人で同じ課題を議論しながら解決していく学習方法にもVRによるイメージ共有が有効と考えるため、安定して利用可能なネットワーク機能導入を検討する。

謝辞 出張講義の実施では、東京都立武蔵高等学校にご協力を頂いた。

参考文献

- [1] Concannon, B.J., S. Esmail, and M. Roduta Roberts.: Head-mounted display virtual reality in post-secondary education and skill training., in *Frontiers in Education*. 2019. Frontiers
- [2] Kamińska, D., et al.: Virtual reality and its applications in education: Survey., *Information*, 2019. 10(10): p. 318
- [3] <https://github.com/NON906/HandMR>
- [4] 吉川信明, 松田健郎, 他: VR-MD: スマホ VR で実施する分子動力学計算の実装, 第 27 回日本バーチャルリアリティ学会大会
- [5] Isobe, H., et al.: Molecular bearings of finite carbon nanotubes and fullerenes in ensemble rolling motion., *Chemical Science*, 2013. 4(3): p. 1293-1297