



VR-MD: スマホ VR で実施する分子動力学計算の実装

VR-MD: Molecular Dynamics Simulation in Smartphone Virtual-reality System

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

Nobuaki KIKKAWA, Kenro MATSUDA, 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, kikkawa@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バーチャルリアリティ (VR) 技術の活用を目的に、Unity を用いてスマートフォン上に分子動力学 (MD) 計算のアプリケーションを実装した。本アプリケーションでは実際の研究現場で使用される MD 計算と同等の分子運動を再現しており、利用者のリアルな分子運動の理解を助ける。スマートフォンと簡易 VR レンズ、スマートフォン搭載のカメラのみで六次元自由度 (6DoF) の分子表示とハンドトラッキングシステムを実現しており、VR 空間上に表示された手モデルと分子の間に相互作用を導入することで分子に『触る』『掴む』などの操作が可能である。

キーワード: 化学教育、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、教育現場における VR 利用の期待も高まっている[1,2]。特に三次元構造の理解が重要となる分野への応用が顕著であり、分子の立体構造の理解が重要となる化学の分野でもアプリケーション開発が進んでいる[3-5]。分子運動の理解度向上のため、VR 上で分子動力学(MD)計算をリアルタイムに表示し、ハンドトラッキングで操作できるインタラクティブ MD (iMD) システムも構築されており[6,7]、実際に大学の講義に取り入れる試みもなされている[8]。

iMD システムを講義に取り入れる際に表示装置の調達コストは大きな問題となる。特に MD 計算を実施する場合、分子の動きとハンドトラッキングの時差を小さくするため計算機クラスターとの近距離通信が不可欠となり、専用の実習室が必要となる。装置の習熟コストも大きく、過去の実施例では各学生が専属のアシスタントの下 10 分程度の実習を実施するにとどまっている[8]。

VR 教材の実利用を考えると 30 人規模の教室での一斉利用が望ましく、現実的なハードウェアはスマートフォンに簡易の VR レンズを取り付けた簡易 VR 装置以外に選択肢はない。これは大きな制約だが、MD 計算のフレームレートは 1-10 ms であり、動画表示に必要な 30-60 fps に比べて十分に短い。これはスマートフォンを用いた簡易 VR 装置でも粒子数を限れば MD 計算が実施可能なことを示している。そこで本研究では、スマートフォン上に MD 計算プログラムを直接実装し、スマートフォンのカメラを用いたハンドトラッキングシステム

と連携することで簡易な iMD システム (VR-MD) の構築を試みた。

2. システム

計算化学の研究現場でよく利用される GAFF 力場[9]を用いた MD 計算プログラムをスマートフォンに直接実装した。Unity の物理エンジンでは分子動力学計算を実現可能な時間発展演算の精度が得られず、分子がばらばらに壊れてしまうため、MD 計算で使用される時間発展演算を実装し、研究者の感覚と一致する分子運動を画面上に再現した。長距離の弱い相互作用を無視するカットオフ法やフーリエ変換を用いた長距離相互作用の計算手法である Ewald 法は用いず、全相互作用を計算する簡易な実装で関数のインライン化、演算の最適化を徹底し iPhone7 上で 60 fps のフレームレートを達成した。また、分子が操作者の手の動きに反応するよう、スマートフォンに搭載されたカメラを用いたハンドトラッキングシステム[10]を導入した。そのままでは手座標に飛びが発生し分子のハンドリングが困難であったため、ロバストカルマンフィルタ[11]を導入し手座標の飛びを抑制した。ハンドトラッキングシステムにより画面上に表示させた手モデルには表示されている各原子と相互作用する引力点、斥力点 (図 1) を配置した。手モデルと各原子の距離ベクトルに依存する外力を定義し、MD 計算の時間発展演算に組み込むことで、フレームレートを保ちつつ表示分子に触れたり、掴んだりできるようにした。指定温度を実現する時間発展演算[12]も導入し、VR 空間内に配置したスライドバーを動か

すことで温度パラメータをリアルタイムに制御し、分子集団の状態変化を体験できる VR 教材とした。

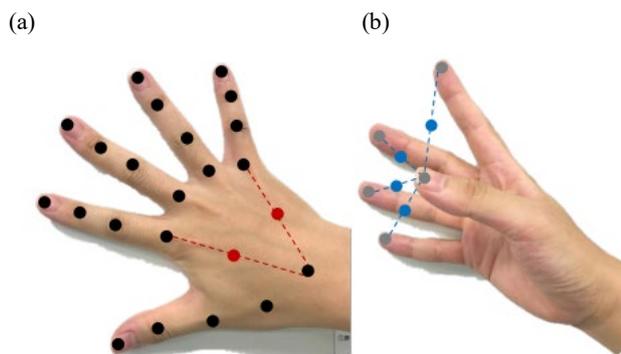


図 1 相互作用点。(a) 黒点と赤点が引力点、(b) 青点が斥力点。黒点と灰色点はハンドトラッキングシステム [10] により取得。赤点と青点は点線の両端点の中点。

3. 結果

VR-MD で水分子クラスターを表示した例を図 2 に示す。表示原子数は 100 原子ほどでこの原子数なら iPhone 7 で約 5 分間 60 fps での VR 表示が可能である。図 2a は低温時のスナップショットであり、クラスターサイズが小さいため完全な結晶系とはなっていないが、低温時は水の六方晶系の構造が見られる。温度を一方常温にすると (図 2b)、六方晶系は完全に崩れ、水分子がランダムに水素結合をする状態となる。さらに温度を上げた図 2c 高温では水素結合は完全に切れ水分子がばらばらに分離する。各図内の黄色の枠はハンドトラッキングの認識範囲であり、この範囲内に操作者が手をかざすと図 2d のように分子と相互作用する手モデルが VR 上に表示される。(a) から (c) への状態変化は図 2e に示す手元のスライダーを低温から高温へスライドさせることで VR 画面内で再現できる。

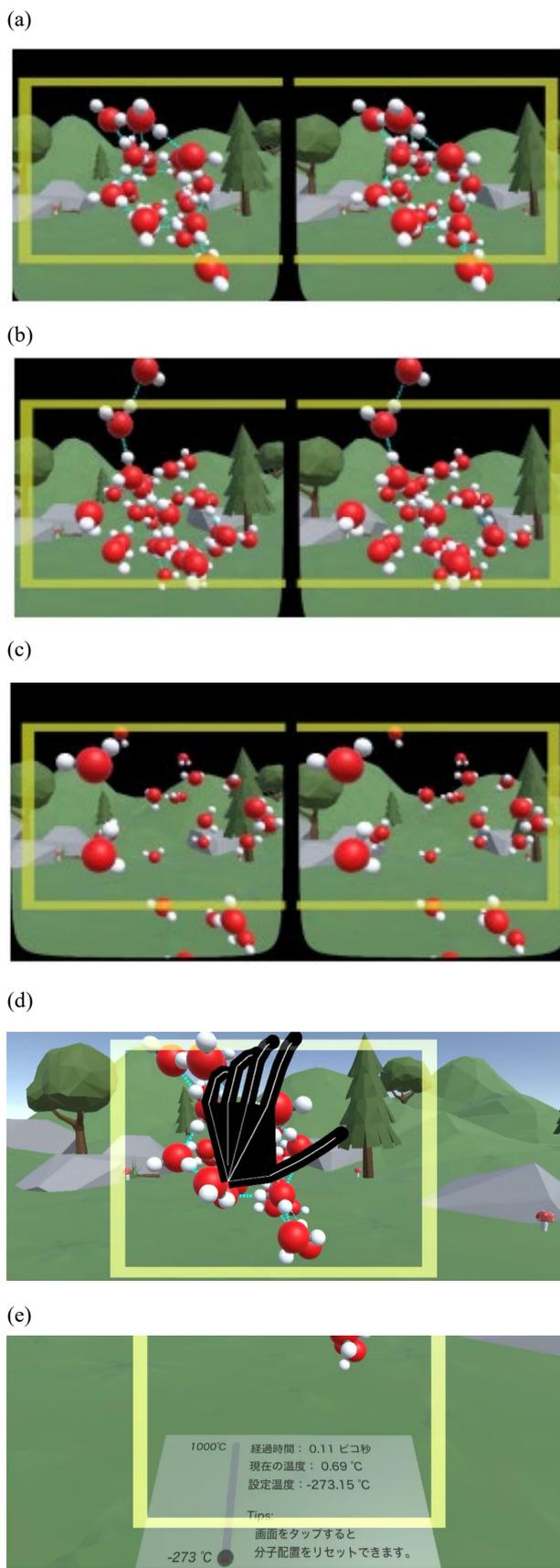


図 2 水クラスターの表示例。(a) 低温 (氷様構造)、(b) 常温 (水様構造)、(c) 高温 (水蒸気様構造)。(a-c) は複眼表示でレンズを介して左右の画面が焦点で合成されることで VR 表示が実現される。

4. 結論

本研究では MD 計算エンジンを直接スマートフォン上に実装することで、スマートフォンのみの簡易な iMD システムを構築した。本システムは新規のユーザーでも 5 分ほどで操作を習得でき、高校で 30 人規模の出張講義も実現している[13]。

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] Norrby, M., et al., Molecular rift: virtual reality for drug designers. *Journal of chemical information and modeling*, 2015. 55(11): p. 2475-2484.
- [4] Taçgin, Z., N. Uluçay, and E. Özüağ, Designing and developing an augmented reality application: A sample of chemistry education. *Turkiye Kimya Dernegi Dergisi Kısım C: Kimya Egitimi*, 2016. 1(1): p. 147-164.
- [5] Edwards, B.I., et al., Haptic virtual reality and immersive learning for enhanced organic chemistry instruction. *Virtual Reality*, 2019. 23(4): p. 363-373.
- [6] O'Connor, M.B., et al., Interactive molecular dynamics in virtual reality from quantum chemistry to drug binding: An open-source multi-person framework. *The Journal of chemical physics*, 2019. 150(22): p. 220901.
- [7] Seritan, S., et al., InteraChem: Virtual Reality Visualizer for Reactive Interactive Molecular Dynamics. *Journal of Chemical Education*, 2021. 98(11): p. 3486-3492.
- [8] Bennie, S.J., et al., Teaching enzyme catalysis using interactive molecular dynamics in virtual reality. *Journal of Chemical Education*, 2019. 96(11): p. 2488-2496.
- [9] Wang, J., et al. (2004). "Development and testing of a general amber force field." *Journal of computational chemistry* 25(9): 1157-1174.
- [10] <https://github.com/NON906/HandMR>
- [11] https://www.jstage.jst.go.jp/article/iscie/27/2/27_49/_pdf-char/ja
- [12] Bussi, G., et al. (2007). "Canonical sampling through velocity rescaling." *The Journal of chemical physics* 126(1): 014101.
- [13] 松田、吉川 他 『VR-MD：スマホ VR で実施する分子動力学計算による教育効果の検証』第 27 回日本バーチャルリアリティ学会大会