

AR 技術を用いた分子構造表示システムの開発

○武田伊織[†] 山岸賢司[‡]
 日本大学大学院工学研究科[†] 日本大学工学部[‡]

1. 緒言

AR (Augmented Reality: 拡張現実) とは、カメラを通じて得た現実世界の対象を認識し、ディスプレイ上において、その対象の上に付加情報などを加え、現実世界を拡張する技術である。この技術は1960年代から研究が行われており、近年はコンピュータの発達によってモバイル端末などにおいても活用が可能となった。そのため、現在極めて注目が集まる技術である。

このような状況の中、近年では化学分野において、このAR技術を学習活動に活用する動きが高まりつつある。化学の学習では、物質を構成する分子の構造についての理解することが重要である。何故ならば、物質の持つ様々な性質（密度や沸点など）は、構成する分子の立体構造と密接に関わっているためである。通常、分子の構造は平面上に構造式や擬三次元構造式を用いて表現されることが多い。しかしながら、化学の初学者にとって平面に描かれた構造式から分子の立体的な構造を理解することは容易ではない。例えば有機化合物の立体構造では、立体配座によって分子の安定性は大きく異なるため、ニューマン投影式を用いることで二面角の違いを表現する工夫が用いられている。しかし、このニューマン投影式では、実際の分子の形を直接的にイメージすることは難しい(図1)。

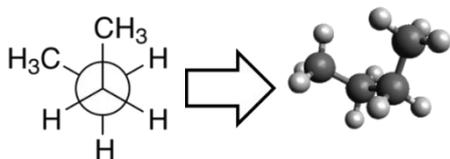


図1. ニューマン投影式と実際の分子の形

このような分子構造学習上の課題に対し、分子模型や分子モデリングソフトウェアなどによって可視化することで、分子構造の理解を補助することが、現在の分子構造学習の基本となっている。しかし、分子模型を用いる場合、多種類の分子について模型を組み立てるには時間が多くかかるだけでなく、

そもそもある程度、分子の三次元の構造を理解していることが必要となり、化学の初学者にとっては困難である。一方で、コンピュータを用いた分子モデリングソフトウェアでは、初学者には操作が複雑で、かつ利用時にコンピュータの起動などに手間を取られ、不便である。

そこで我々は、より手軽に分子の立体構造をイメージできる新たな道具として、このAR技術に着目した。先行研究¹⁾を参考としつつ、我々はこれまで、分子の構造式をマーカーとして、認識すると立体化された分子モデルが投影されるシステムの開発を行ってきた(図2)。

そして本発表では、これまで開発してきたARによる分子構造表示システムを元に、より学習教材として利用することを指向して発展させ、新たなAR学習システムの開発を行った。本発表では、開発システムについて発表し、また実践的な運用を行った結果についても報告する。

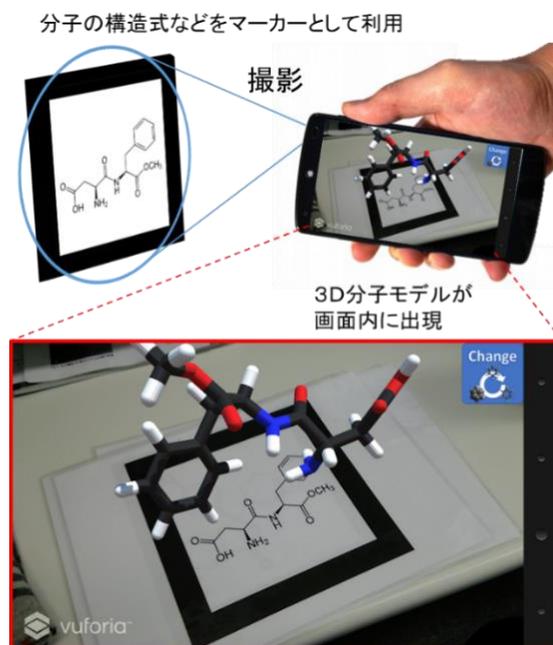


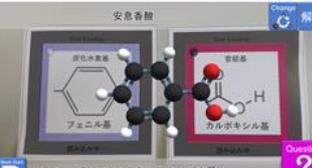
図2. 分子構造AR表示システム

Development of molecular structure indicate system using AR technology

[†]Iori Takeda · Nihon University Graduate School of Engineering

[‡]Kenji Yamagishi · Nihon University College of Engineering

図 3. 開発した AR 学習システム

<p>① 拡張型分子構造 AR表示システム</p>	<p>分子の性質などが描かれた プレートがマーカー上に表示</p> 
<p>② 組換型分子構造 AR表示システム</p>	<p>ピース型マーカーを組み立て て3D分子モデルを表示</p> 
<p>③ 照合型分子構造 AR表示システム</p>	<p>マーカーを正しく照合させて 3D分子モデルを表示</p> 
<p>④ クイズ型分子構造 AR表示システム</p>	<p>提示された問題をマーカーの 組み合わせによって回答する</p> 

2. システムの開発

これまでの研究において、開発した AR 学習システムを図 3 に記載した。各システムの開発環境は Unity2018. 2. 18 を使用し、AR ライブラリには PTC 社の Vuforia を利用し開発を行った。以下、それぞれのシステムについて説明する。

①拡張型分子構造 AR 表示システムでは、表示している分子に対し、その名称や特性、利用例などの性質が描かれたプレートがマーカー上に重なるように同時に表示されるよう設計することで、利用者が観察した分子に対して知識がない場合でも、辞典のように利用することを可能とした。

②組換型分子構造 AR 表示システムでは、原子を模したマーカーをパズルの様に組み立てることを可能とし、正しく分子が作れた場合にのみ、3D 分子モデルが空間上に表示されるようにすることで、利用者が自らの手で分子の構造を作成する中で、炭素に付けるべき水素の数などに対して直感的な理解を深めることを可能とした。

③照合型分子構造 AR 表示システムでは、かるた遊びのような照合するゲーム性をシステムに取り入れ、正しい組み合わせ以外では 3D 分子モデルが表示されないようにすることで、分子の構造式と名称の繋がりをマーカーの組み合わせによって、分子への理解を深めることを可能とした。

④クイズ型分子構造 AR 表示システムでは、クイズの様な問題に対して回答する要素を取り入れ、掲示された分子を制限時間以内に炭化水素基・官能基を模したマーカーの組み合わせによって導き出すことで、有機化合物の構成についての直感的な理解を深めることを可能とした。

3. 実践的な運用と結果

これまでに開発を行った AR 学習システムは、学会やオープンキャンパスなどの場において、多くの方々実際に触れる機会を設けた。その結果、本システムに対して以下に記した所見や所感を得ることができた。

まず、学会などの学術発表の場では、「サーバーとの通信を行い、リアルタイムで分子モデルの構築を行うことはできないか」、「マーカー同士を近づけることで分子が結合する様子を AR で表せないか」などの教員の立場からの提案が主であった、また、システムに実装してほしい提案として、「表示される 3D 分子モデルの大きさを変えることはできないか」、「正解以外の場合に対する判定を追加できないか」などといった改善案をすることができた。こうした改善案についてはその後のシステム改良にて実際に実装を行った。

また、大学のオープンキャンパスや、高校での展示会、付属高校の文化祭での研究紹介などの様々な場においては、高校生・中学生らの利用者の視点から、「3D 分子モデルで表示されるとわかりやすい」、「モバイル端末で利用できるのが使いやすい」、などといったシステムの仕様面に対する感想が主であり、また一方で、「マーカーの上に表示されるだけでもとても興味深い」、「単純に分子を表示させる以外にも、AR にはまだまだ可能性があるように感じる」などのような、AR 技術そのものに関心を示す所感が多く上がった。

以上より、「手軽に分子の立体構造をイメージできる新たな道具」という本システムの目的の一つは、達成できた。今後としては、より学習を指向したシステムの構築を目指したいと考える。

参考文献

- 1) 浅井紀久夫, 近藤智嗣「拡張現実感を利用した分子構造観察システム」, Journal of Multimedia Aided Education Research 2008, 4(2), 37-43 (2008)