

拡張現実感を利用した分子構造観察システム

浅井紀久夫¹⁾²⁾・近藤 智嗣¹⁾²⁾

生化学や生物学では、分子構造を詳細に観察する三次元可視化ツールが利用されるようになった。しかし、伝統的な学習として印刷教材が使われることが多く、三次元構造を提示する学習環境とは物理的に別けられてきた。本論文では、拡張現実感を利用して紙とデジタル・コンテンツを組み合わせた分子構造観察システムについて記述する。本観察システムでは、印刷物などに三次元分子構造をシームレスに重畳提示することができる。カメラ映像の中に配置されたマーカが検出され、そこに分子構造が表示される。マーカという物理的板を手で操作することにより分子構造の姿勢を変更できるので、分子構造の直感的な観察が可能である。本観察システムに搭載した機能とユーザ・インタフェースとしての特性を確認するため、被験者実験による主観評価を実施した。その結果、本観察システムの各機能が円滑に動作すること及び拡張現実感インタフェースの特性が有効に働いていることが示唆された。

キーワード

拡張現実感, 学習環境, マルチメディア, 3Dインタフェース, 分子構造

1. はじめに

近年、マルチメディアを利用したコンテンツが教材として使われるようになった。生化学や生物学の分野でも、分子構造を視覚的に閲覧するための三次元可視化が行われるようになった。しかし、系統的な学習として印刷教材が使われることが多く、三次元構造を提示するマルチメディア学習環境とは物理的に不連続であった。つまり、映像音声によるマルチメディア教材と紙媒体による印刷教材はそれぞれ別の学習環境となっており、学習者はそのメリットを別々に受け取っていた。そこで、マルチメディア教材と印刷教材との隔たりを埋め、両学習環境の併用に留まらず、両者を融合することができれば、その相乗効果が得られるのではないかと考えられる。

これを解決する方策の一つとして、こうした学習環境を拡張するという考えから拡張現実感が利用されるようになった (Kondo, 2006)。拡張現実感とは現実世界をコンピュータによって拡張、強化しようというアプローチを取り、現実の日常環境にコンピュータの機能を組み込もうとしている (Wellner, Mackay, & Gold, 1993)。印刷物と仮想物体とを融合させるシステムは、実物の本のページにCG (コンピュータ・グラフィックス) を重畳提示した MagicBook (Billinghurst, Kato, & Poupirev, 2000)

として提案されている。

拡張現実感とは現実空間に仮想物体を重畳提示することにより、物理的な空間と仮想空間とのインタラクションに連続性を持たせている。そのため、現実空間に存在する実物体を手で扱うことによる触覚を伴って、仮想物体の操作を行うタンジブル・インタフェースを提供している (Kato, Billinghurst, Poupirev, Imamoto, & Tachibana, 2000; Regenbrecht, Barattoff, & Wagner, 2001)。タンジブル・インタフェースは直感的で、触覚による存在感を持ったインタラクションを実現することから、多くのアプリケーションに採用されてきた。そのいくつかは、教育を対象にした拡張現実感システムとして開発されている。

Earth-Sun Relationship (Shelton & Hedley, 2002) は光と気温の季節の移り変わりを表示し、手に持った板で仮想の太陽及び地球を操作することにより利用者の視点で現象を再現する環境を構築している。Construct3D (Kaufmann, 2002) は数学や幾何学を教えるための三次元幾何学構築ツールで、単純な幾何形状を構築する基本機能を提供している。Augmented Chemistry (Fjeld, Juchli, & Voegtli, 2003) は仮想化学実験室を構築し、利用者は単純な原子を見たり、合成分子モデルに従う複雑な分子を構成したりすることができる。こうしたシステムは教育の現場で使われることを目的にはしているが、拡張現実感を利用したインタフェースの有用性を示す手段としての側面が強い。

開発した分子構造観察システムでは MagicBook と同じアプローチを採用し、分子構造を学習する環境としてマ

¹⁾ メディア教育開発センター

²⁾ 総合研究大学院大学

ルチメディア教材と印刷教材を組合せ、両者の内容が空間的に関連付けられるようにした。本分子構造観察システムは学習用に自由に使えるツールとして提供されることを前提とし、教授者は学習素材を作成しやすく、学習者はこれを学習に活かしやすい環境を提供することを目指している (Asai, Kobayashi, Kondo, & Takase, 2007)。そのため、研究者が研究発表用に準備する分子構造データを、教材の素材として流用しやすい仕組みを取り入れている。また、分子構造を観察するための基本機能を搭載しており、学習環境の拡張として三次元分子構造を簡便に観察することを可能にしている。

本論文では、以下の三つの特徴を持つ分子構造観察システムについて利用の枠組み及び設計、機能、構成、実装の詳細を記述し、本観察システムに搭載した機能とユーザ・インタフェースとしての特性を確認するために実施した被験者実験による主観評価について述べる。

- 印刷物と仮想物体を融合させる
- タンジブル・インタフェースを提供する
- 学習素材を作成しやすい仕組みを提供する

2. 利用の枠組み

利用の枠組みとして、教授者は商用などの可視化ツールを使って研究発表のための素材を元に学習コンテンツを作り、学生は閲覧ツールとして本分子構造観察システムを使って最新の研究を含めた学習を行うというシナリオを想定した (図1)。研究者は、研究発表のために研究対象の分子構造に説明や注釈などの情報を付与する。こうした情報は、分子構造を解釈する上で重要になる。研究者が研究発表用に準備する分子構造データを、教材の素材として流用する。

従来、生化学や生物学の研究現場では、タンパク質や核酸の複雑な三次元構造のデータを可視化したり、編集したりするツールが利用できるようになった (Viewer-Pro, PyMOL, CueMol, Chime, MOLDA など)。しかし、一般に拡張現実感システムに対応したコンテンツを作成

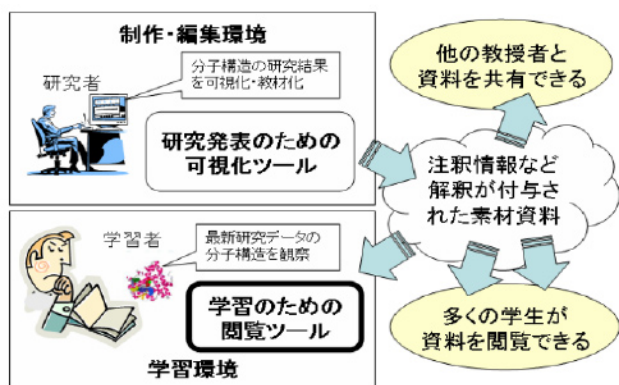


図1 利用の枠組み

するには、CGの専門知識やコンピュータ・プログラミングのスキルが必要とされることが多い。生化学や生物学の研究者が三次元構造可視化ツールで作成したデータを、拡張現実感システムに対応したデータに作り直すのは煩雑な作業となる。

一方、学習者は分子構造に関する研究結果や分子データの情報をインターネット上で入手できるようになった。例えば、PDB (タンパク質構造データバンク) は実験的に測定されたタンパク質と核酸の三次元構造の国際的公共データベースであり、上記のような可視化ツールを使って分子の三次元構造を見ることができる。しかし、こうしたツールの多くは研究用に複雑な機能が搭載されており、必ずしも学習用として簡便に利用できるわけではない。また、注釈情報など分子の構造に関する解釈が分子構造データに付随していなければ、そのままでは学習に役立てることは難しい。

そこで、本分子構造観察システムに、1) 可視化ツールで作成したデータのインポート機能及び2) 簡便な観察機能を搭載することにより、研究者が作成する分子構造の可視化データを学習コンテンツとして提供してもらい、学習者は本観察システムでデータを閲覧し最新研究結果を学習するという枠組みを構成できるようにする。本論文では、学習環境における閲覧ツールとしての分子構造観察システムに的を絞って以降議論する。

3. システム

分子構造観察システムは、CGとして描画される分子の立体構造をカメラ映像に合成して表示する (図2)。以下、設計、機能、構成、実装について述べる。

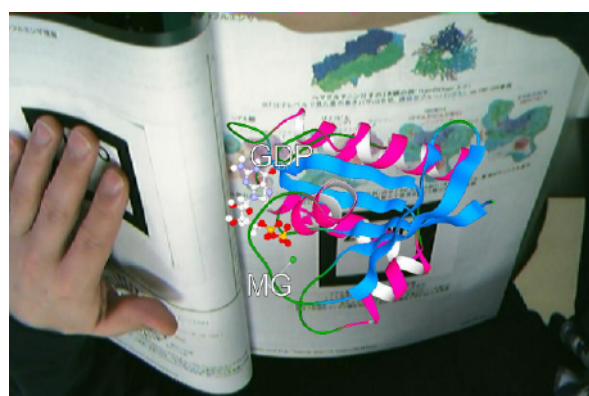


図2 印刷物への分子構造モデルの重畳提示

3.1 設計

三次元モデルの分子構造を実写映像上に合成して表示するには、現実空間中の物体を識別する必要がある。その識別に物理的なマーカを利用し、マーカを四角い枠として定義するものとした。枠内の模様と分子構造の種類

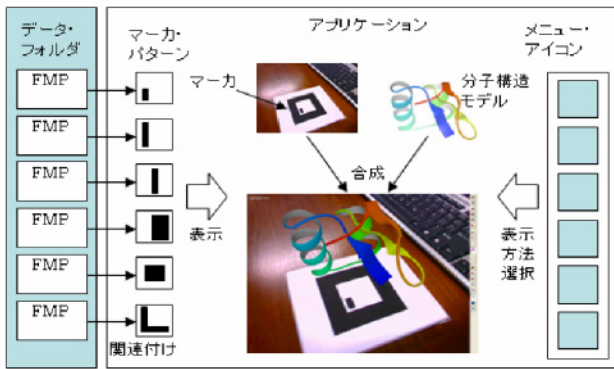


図3 データの関連付けと表示方法の選択

とを関連付け、マーカーがカメラに提示された際にその模様によって異なる分子が表示される(図3)。利用者はマーカーを手に持ち、好きな視点から分子構造を眺めることができる。マーカーの視認性と視点の柔軟性を改善するために、五つのマーカーが立方体の外側に配置されたマルチ・マーカーを用意した。五つの内どれか一つのマーカーが映像に映っていれば、そのマーカー・パターンは認識される。また、カメラの視点をマーカーの斜め下に取れば、分子構造を下の方から眺めることができる。

分子構造データをマーカーに関連付けるには、予め決められたフォルダに分子構造データのファイルを置くものとした。アプリケーションは起動時、そのフォルダに存在する分子構造データのファイルを名前順に読み込み、順番にマーカーに割り当てる。使用できるマーカーは、必要に応じて利用者が変更(マーカーの追加や削除など)できるようにした。

分子構造の表示状態(リボン表示やボール表示など)は、メニュー・バーから選択するものとした。映像提示画面はフルスクリーン表示とし、メニュー・バーは通常時は表示せず、マウス・カーソルを画面端に位置させるとスライドするようにした。拡張現実感インタフェースを制御コマンドとして利用することもできたが、複数のマーカーを同時に手に持って分子構造を観察するのは煩雑になるため、拡張現実感インタフェースの制御コマンドは採用しなかった。

本分子構造観察システムでは、研究者から提供される分子構造データが面倒な修正や追加のプログラミング作業を伴うことなく、学習者の学習を支援する教材的役割を果たすための枠組みを考慮している。そのため、分子生物学等で使われる分子構造可視化ツールなどで作成される分子構造のデータ形式に対応する必要がある。

そこで、本観察システムが対応する分子構造データの形式として、商用可視化ツール“MolFeat”のデータ形式FMP(FiatLux MolFeat Presentation)をサポートした。MolFeat(FiatLux)は分子構造に特化した三次元イメージ編集ソフトウェアで、研究論文や発表資料に掲載する

分子構造のイメージやモデル・アニメーションを作成できる。PDBなどの分子構造データを読み込んで、分子表現形式の編集や三次元空間での注釈情報の付与など分子構造可視化に必要な機能が搭載されている。






本分子構造観察システムでは、FMPファイルに基づく分子構造の表現形式の変更や分子構造に設定されているキャプション及びコメントの表示が分子構造を説明する機能として提供される。

3.2 機能







学習者が分子構造を簡便に観察できるようにするため、分子構造を観察する上で必要とされる基本的機能として a) 原子を選択するための選択操作, b) 分子構造を観察しやすくするための表示方法の変更, c) 構成原子を観察しやすくするための色の変更, d) 電荷の分布具合を示す静電ポテンシャル面の表示, e) 構成原子の名前や分子構造の説明などの注釈情報を表示する注釈表示, f) 分子構造モデルの相対的大きさを調整するための表示サイズの調整といった機能を備えた。

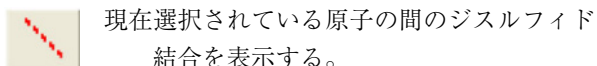
メニュー・バーに、分子構造データに対する以下の各機能を実装した。各アイコンはメニュー・バー中に入力インタフェースとして提示され、凹み表示により選択状態が確認できる。これらの機能は、映像内に表示されている分子構造に対して即時的に反映される。

a) 選択操作

-  現在画面に表示されている分子のすべての原子を選択する。
-  現在画面に表示されている分子のすべての原子を非選択にする。
-  現在画面に表示されている分子のタンパク質に含まれる原子を選択する。
-  現在画面に表示されている分子の核酸分子に含まれる原子を選択する。
-  現在画面に表示されている分子のリガンド分子に含まれる原子を選択する。

b) 表示方法の変更

-  現在選択されている原子を黄色でハイライト表示する。
-  現在選択されている原子をVDW半径の球で表示する。
-  現在選択されている原子を球で、それらの原子間の結合をスティックで表示する。
-  現在選択されている原子の間の結合をワイヤーフレームで表示する。
-  現在選択されている原子のCa原子を結んでリボンで表示する。
-  現在選択されている原子の間の水素結合を表示する。



現在選択されている原子の間のジスルフィド結合を表示する。

c) 色の変更



現在選択されている原子を残基の種類別に色づける。



現在選択されている原子を原子種類別 (CPKカラー) に色づける。



現在選択されている原子を、各残基が持つ酸性・中性・塩基性の属性別に色付けする。



現在選択されている原子を、各残基が持つ極性・非極性の属性別に色づける。

d) 静電ポテンシャル面の表示



現在選択されている原子で、静電ポテンシャル値で色づけした分子表面を表示する。

e) 注釈表示



読み込んだデータに注釈が含まれる場合、それらを表示する。

f) 表示サイズの調整



現在表示されている分子を拡大する。



現在表示されている分子を縮小する。

3.3 構成

分子構造観察システムは、画像処理、分子データ・ローダ、分子データ・レンダリング、メイン制御、ユーザ・インタフェースの各モジュールから構成される (図4)。画像処理モジュールでは、映像中に含まれる四角いマーカを検出して、マーカの位置と方向を導出する。マーカ内の模様を同定し、これに割り当てられた分子構造データが読み込まれる。画像処理ライブラリとしてOpenGLをベースにしたオープンソース・ライブラリARToolkit (HITLab) を利用しており、マーカ認識や姿勢情報の導

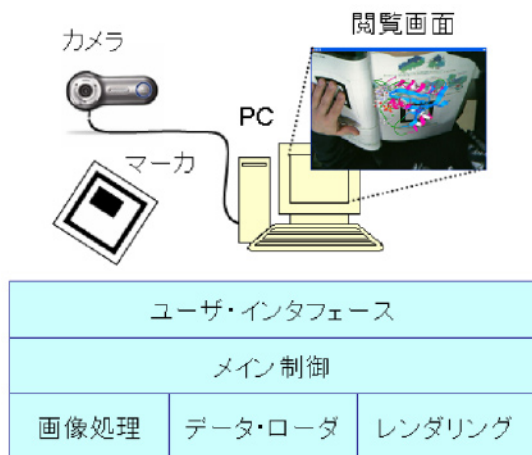


図4 システム構成

出の他、ビデオ映像の取得や描画などの処理のとき画像処理モジュールから呼び出される。

分子データ・ローダは、MolFeatの分子構造データFMPファイルを読み込む。分子データ・レンダリング・モジュールは、分子構造データを描画する。ユーザ・インタフェース・モジュールは、メニューを含むGUI (グラフィカル・ユーザ・インタフェース) を提供する。メイン制御モジュールは、GUIで入力された情報を基に分子データ・レンダリング・モジュールを制御する役割を担う。

アプリケーション起動時に読み込まれる設定ファイルで、FMPファイルが置かれているパスを指定する。また、ビデオ映像のアスペクト比、分子構造モデル表示のスケール、マーカのサイズ、マーカ・パターン・ファイルなどの指定を行う。マルチ・マーカの立方体の一辺の長さを適切に指定しておく、隠蔽処理が考慮され、マルチ・マーカよりも分子形状が奥に配置されるとき、その形状がマーカに隠れて表示される。

3.4 実装

分子構造観察システムが、USBカメラ (Qcam Fusion, Logicool) を装着したWindows PC (2.6 GHz Pentium IV CPU, 1 GB RAM, NVIDIA FX5700 series GPU) に実装された。カメラ映像中の物理物体を同定するのに使われる四角いマーカは印刷教材の紙面に貼付されることを想定しているが、ここでは印刷教材とは独立したマーカを用意した。

FMPファイルには複数の分子構造シーンを登録できる仕様になっているが、アプリケーションに読み込まれるシーンは最初のシーンのみとなる。また、シーンに含まれる大気 (フォグ) 効果、照明 (ライト)、背景色などの情報は無視される。

図5及び6は、分子構造観察システムで分子構造を提示した様子である。図5はあるタンパク質が静電ポテン

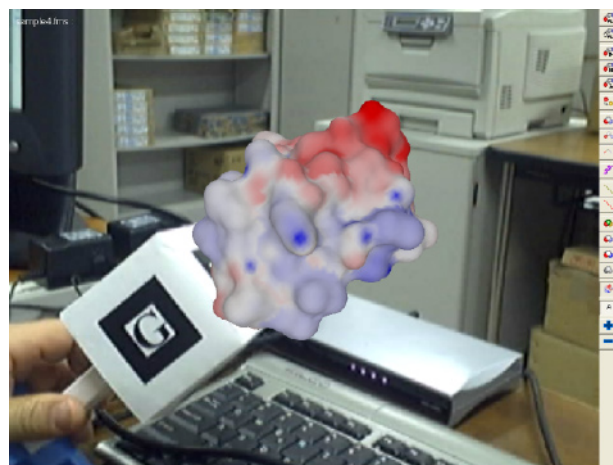


図5 静電ポテンシャル面表示モード

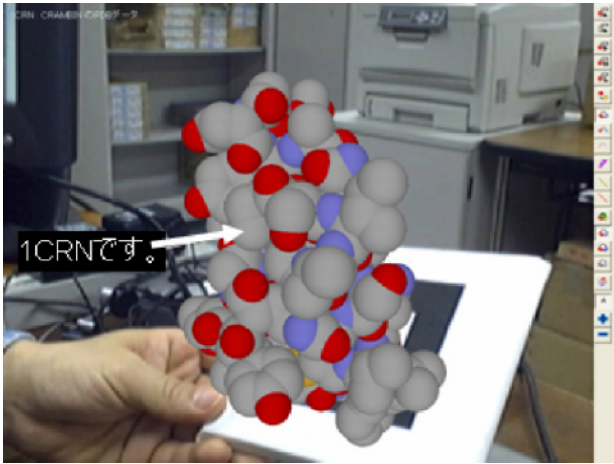


図6 原子球表示モード

シャル面表示モードで提示され、図6はあるタンパク質が原子球表示モードで注釈付きで提示された例を示している。学習者は好きな視点から三次元幾何学モデル及びその注釈情報を見ることにより、タンパク質の分子構造を詳細に観察することができる。

4. 実験

開発した分子構造観察システムの機能及びユーザ・インタフェースの特性を確認するため、被験者実験による主観評価を実施した。本実験では分子構造に関する教材を用意したわけではなく、被験者は分子構造を観察する上でのシステム特性を評価した。

4.1 方法

4.1.1 被験者

生化学や生物学を専門としない学部生及び大学院生39人（男性11人、女性28人、年齢幅19～39歳）が実験に参加した。

4.1.2 課題

課題として、完了作業や時間制限を設定しなかった。被験者は分子構造観察システムを利用し、好きなだけ分子構造を観察し、機能及び使い勝手を確認した。

4.1.3 測定

質問紙を用意し、各質問項目に対して五段階評価（1：全くそう思わない、5：とても思う）で回答を求め、印象を取得した。質問項目を、表1に示す。また、問題点や気付いた点など自由記述による意見を求めた。分子構造観察システムに関して分子構造表現形式の変更や注釈情報の提示などの機能に不具合等があれば、自由記述欄で指摘してもらうこととした。実際の回答の入力は、リアルタイム評価支援システム（REAS）を利用した。

4.1.4 装置

カメラ映像及び分子構造の提示は液晶モニターを利用

表1 質問紙における質問項目

番号	質問項目
1	システムは安定していた
2	システムの応答は円滑だった
3	三次元情報は見やすかった
4	三次元情報は操作しやすかった
5	慣れは必要なかった
6	疲れは感じなかった
7	操作は面白かった
8	違和感はなかった
9	長時間利用に向いている
10	物体が存在しているように感じた

し、一般の学習者にはあまり馴染みのない頭部装着型ディスプレイ（HMD）は利用しなかった。三脚に固定されたカメラは被験者の斜め背後に設置し、被験者の視点に近い方向から映像を取得した。マーカとして、7.5cm角の四角い枠を貼り付けた板及び4.5cm角の四角い枠を貼り付けた立方体を用意した。

4.1.5 手順

被験者は分子構造観察システムの使い方及び質問紙への回答の仕方を説明された後、実際にシステムを操作した。被験者はマーカを持ち、マーカ上に重畳提示される分子構造を観察した。観察システムの各機能や使い勝手を調べるように指示された。操作終了後、質問紙への回答を行った。

4.2 結果と考察

図7に、主観評価の結果を示す。太棒は分子構造観察システムに関する質問への回答の平均値を示し、誤差棒はその標準偏差を示す。用意された各質問項目に対して、平均値が4前後となる得点を得た。

特に、三次元情報の見やすさ及び疲れに関する質問項目(3)及び(6)に対して平均値が4.5近くに達しており、多くの被験者は三次元分子構造が適切に観察でき、三次元情報を映像に重畳提示したインタフェースが強いスト

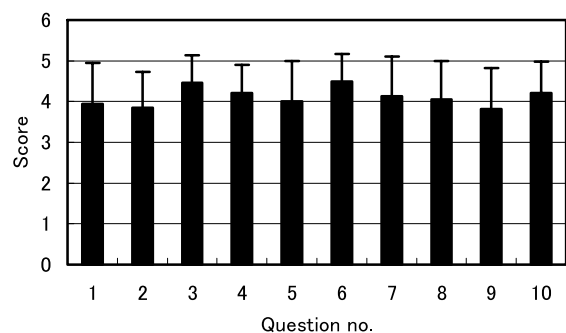


図7 主観評価の結果

レスを与えるものではないという印象を持っていたことがわかる。

一方、システムの応答及び長時間利用に関する質問項目(2)及び(9)に対して平均値が4を下回った。分子構造の静電ポテンシャル面を表示する表現形式では、実時間で静電ポテンシャル値を計算しており、その計算時間による遅延が発生する。この遅延が応答に関する印象に影響した可能性があると考えられる。また、被験者は実際に長時間にわたって分子構造を観察したわけではなく、長時間利用に対して明確な判断が付かないため、「どちらとも言えない」と回答した被験者が多くなったと考えられる。

分子構造観察システムに搭載した各機能の不具合は報告されておらず、各機能が問題なく動作していたことが示唆される。また、自由記述欄に記述された意見には、分子構造観察システムに対するいくつかの共通的な長所と短所が以下のように指摘された。

長所として、「マークを手で直接操作するので操作が簡単で、分子構造を色んな角度から観察できるのはわかりやすい」こと、「マークという物理物体を手を持っていることで、分子の直感的操作と実在感が得られる」ことが指摘された。一方、短所として、「三次元分子構造はマークに固定表示されるため、分子構造を底から眺めることが難しい」こと、「マークの認識が映像に映るマークの傾斜によって不安定になり、分子構造が突然消える場合がある」ことが指摘された。

これらの長所及び短所は拡張現実感インタフェース特有の性質に関連するものであり、本分子構造観察システムでも拡張現実感の特性が働いていることを示している。また、長所を補足する「分子の中身がどうなっているか立体的にわかるので、分子構造や結合のイメージができる」といった指摘と質問項目(3)、(4)及び(10)の結果から、現実シーンを背景にした三次元構造物の立体感とその拡張現実感環境が生み出す存在感が三次元分子構造の理解を助ける働きがあることを示唆している。

5. むすび

本論文では、学習環境の拡張として拡張現実感を利用して分子構造を観察するシステムについて記述した。開発した分子構造観察システムではマークに三次元分子構造を重畳提示し、マークを直接手で操作することにより、分子構造の直感的な観察が可能になっている。本観察システムの利用評価を実施した結果、搭載した各機能が円滑に動作し、拡張現実感としてのユーザ・インタフェースの特性が有効に働いていることが示唆された。

本研究では、教授者は可視化ツールを使って研究発表のために作った素材を提供し、学生は閲覧ツールとして本分子構造観察システムを使って最新研究を含めた学習

を行うというシナリオを想定している。今後の利用促進への課題として、多様なデータ形式への対応、学習コンテンツの充実及び共有システムの構築、利用コミュニティの育成に取り組む必要がある。

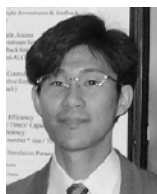
〈システムの利用方法〉

本分子構造観察システムは、以下のWebサイトからソフトウェアのダウンロードが可能になっている。利用に関する詳細は、本Webサイトを参照されたい。

<http://www.nime.ac.jp/~asai/arMolJ/armolJ.html>

引用文献

- ARToolkit, HITLab, <http://www.hitlab.washington.edu/artoolkit> (As of Nov. 2007).
- Asai, K., Kobayashi, H., Kondo, T., & Takase, N. (2007), Learning molecular structures using augmented reality, Proc. International Conference on Computers in Education, 569-572.
- Billinghurst, M., Kato, H., & Poupyrev, I. (2001), The Magic-Book: a traditional AR interface, Computers & Graphics, 25, 745-753.
- Chime, MDL, <http://www.mdl.com> (As of Nov. 2007).
- CueMol, <http://cuemol.sourceforge.jp/> (As of Nov. 2007).
- Fjeld, M., Juchli, P., & Voegtli, B.M. (2003), Chemistry Education: a tangible interaction approach, Proc. INTERACT, 287-294.
- Kato, H., Billinghurst, M., Poupyrev, I., Imamoto, K., & Tachibana, K. (2000), Virtual object manipulation on a table-top AR environment, Proc. International Symposium on Augmented Reality, 111-119.
- Kaufmann, H. (2002), Construct3D: an augmented reality application for mathematics and geometry education, Proc. International Conference on Multimedia, 656-657.
- Kondo, T. (2006), Augmented learning environment using mixed reality technology, Proc. E-Learn, 83-88.
- MOLDA, <http://www.molda.org> (As of Nov. 2007).
- MolFeat, FiatLux, <http://www.fiatlux.co.jp/product/lifescience/molfeat/mol-index.html> (As of Nov. 2007).
- PyMOL, <http://pymol.sourceforge.net> (As of Nov. 2007).
- REAS, NIME, <http://reas.nime.ac.jp> (As of Nov. 2007).
- Regenbrecht, H., Baratoff, G., & Wagner, M. (2001), A tangible AR desktop environment, Computer & Graphics, 25, 755-763.
- Shelton, B.E., & Hedley, N.R. (2002), Using augmented reality for teaching Earth-Sun relationships to undergraduate geography students, Proc. International Augmented Reality Workshop.
- ViewerPro, Accelrys, <http://www.accelrys.com> (As of Nov. 2007).
- Wellner, P., Mackay, W., & Gold, R. (1993), Computer-augmented environments: back to the real world, Communications of ACM, 36, 24-26.



あさい きくお
浅井紀久夫

1991年名城大学工学部卒業、1996年名古屋大学大学院工学研究科退学。同年放送教育開発センター研究開発部助手。メディア教育開発センター助手を経て、現在、メディア教育開発センター准教授、及び総合研究大学院大学文化科学研究科准教授併任。博士(工学)。ヒューマン・コンピュータ・インタラクションの研究に従事。電子情報通信学会、日本電気学会、日本バーチャルリアリティ学会各会員。



こんどう ともつぐ
近藤 智嗣

1986年法政大学文学部卒業、1988年上越教育大学大学院学校教育研究科修了。同年株式会社新学社入社。1995年放送教育開発センター研究開発部助手。メディア教育開発センター助手を経て、現在、メディア教育開発センター准教授、及び総合研究大学院大学文化科学研究科准教授併任。教育工学の研究に従事。日本教育工学会、日本教育メディア学会、こども環境学会、IEEE各会員。

Molecular Structure Visualization System Using Augmented Reality

Kikuo Asai¹⁾²⁾ · Tomotsugu Kondo¹⁾²⁾

In the biochemistry and the biology, 3D visualization tool has become widely used for examining molecular structures. However, printed materials are often used as a traditional learning style, and the learning environment has been separated physically from the one of presenting the 3D structures. This paper describes a molecular structure visualization system using augmented reality, combining physical papers and digital content. The developed visualization system enables us to seamlessly superimpose 3D molecular structures over printed materials, presenting the molecular structures on the markers detected in the video images. Manipulating physical plates of the markers by hand makes it intuitive to observe 3D molecular structures changing their positions and orientations. The subjective evaluation was performed with an experiment to verify the functions implemented in the system and investigate the properties as a user interface. The results showed that each function of the system worked appropriately and the system had the typical properties of an augmented reality interface.

Keywords

Augmented reality, learning environment, multimedia, 3D interface, molecular structure

¹⁾ National Institute of Multimedia Education

²⁾ The Graduate University for Advanced Studies