

Title	先進的な薬化学教育を見据えたバーチャル・リアリティ教育コンテンツの評価
Author(s)	浅野, 航平
Citation	令和元(2019)年度学部学生による自主研究奨励事業研究成果報告書. 2020
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/75985
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

2019年度大阪大学未来基金【住野勇財団】学部学生による自主研究奨励事業研究成果報告書

ふりがな氏名	あさの こうへい 浅野 航平	学部 学科	薬学部薬科学科	学年	3年
ふりがな 共同 研究者氏名	たなか ともゆき 田中 志幸	学部 学科	薬学部薬科学科	学年	3年
	ひなみ ゆうや 日南 優也		薬学部薬科学科		3年
	のじま ゆい 野島 由衣		薬学部薬科学科		3年
アドバイザー教員 氏名	田 雨時	所属	情報・計量薬学分野		
研究課題名	先進的な薬化学教育を見据えたバーチャル・リアリティ教育コンテンツの評価				
研究成果の概要	研究目的、研究計画、研究方法、研究経過、研究成果等について記述すること。必要に応じて用紙を追加してもよい。(先行する研究を引用する場合は、「阪大生のためのアカデミックライティング入門」に従い、盗作剽窃にならないように引用部分を明示し文末に参考文献リストをつけること。)				

研究目的

医薬化学は薬学諸分野の中で極めて重要な基盤分野の一つである。また、新薬探索や薬物の機序解明などに役立っている。しかし、有機電子論の複雑性や化学反応の多様性などから、大学の低学年の初学者は学習に困難を感じる事が多く、様々な研究がなされている[1]。一方、化学の授業は教科書ベースの対面教育が殆どであるが、近年、パソコンやインターネットなどのマルチメディアを利用するアクティブラーニングが増えている[2]。我々はバーチャル・リアリティ(Virtual reality, VR)に注目し、医薬化学教育分野に革新をもたらす医薬化学教育コンテンツの開発に挑戦する。まずは、このようなコンテンツを開発・リリースを目指す。その後、このコンテンツが、医薬化学の教育の一助になり、概念の可視化などで教育効果を高めることができるかどうかを評価する。具体的には、大学で有機化学を学ぶ学生を対象としたコンテンツの評価を目的とした評価試験を行う。これにより、教育効果やVRコンテンツの操作性について評価できる。

研究計画**Step 1. コンテンツの開発準備 (7月上旬～7月末)**

コンテンツの開発のためのプログラム技法や実装する予定の薬化学の知識、実装に必要なライブラリやソフトウェアについて学習する。我々の所属研究室で独自開発した化合物・化学反応の3次元可視化ライブラリGalihadを開発に利用する。

Step 2. 仮想空間中での化合物の最適な操作手法コンテンツ構成の決定 (8月上旬～8月中旬)

VRでの薬化学教育に適したコンテンツの種類を洗い出した後、教育コンテンツのプロトタイプの開発を開始する。ここでは、VR空間での、薬化学教育に必要な情報表示や化合物に対する操作、化学反応ロジックを表す関数などの実装を中心とし、より薬化学教育に向けた構成をアジャイルに検討していく。その際に、コンテンツを α リリースとして公開し、身内のユーザーに体験してもらうことで、a. UI (User Interface) の最適化 b. Usability (操作性) の向上 c. UX (User Experience) の向上を目指す

す。

Step 3. 「医薬品の全合成の過程を学べる」コンテンツの実装（9月上旬～9月中旬）

構成コンテンツが決定した後、教育内容の一例として、「医薬品の全合成の過程を対戦形式で学べる」コンテンツを実装する。具体的には、目標医薬品の合成を VR 上で完成できるように、反応物を step-by-step で選択する形式にする予定である。また、実装に伴うプログラムのテストも実施する。

Step 4. VR 専門家やユーザーに展示（9月12日～9月15日）

多数の VR 開発者及び利用者が参加する「TOKYO GAME SHOW 2019」などにて、開発したコンテンツを展示し、体験・評価してもらおうと同時に、技術的な問題点の抽出やサポートも依頼する。

Step 5.教育効果の評価と発表（9月中旬～終了）

薬化学の授業対象者より、体験評価参加者を募集し、開発されたコンテンツを実際に体験してもらい、操作性や教育効果の評価を、アンケートを用いて評価する。その後、統計解析を行い、薬化学教育コンテンツ中で教育効果に重要な要素の評価を行う。これらの結果について、12月に行われる情報処理学会ヒューマンコンピュータインタラクション研究会で論文提出、及び、報告を行う。

研究方法・経過及び成果

概説

本自主研究課題が採択されてから研究期間終了まで、我々は、本申請課題を完遂するためのプログラム力、有機化学の基礎知識を身につけ、段階的に薬化学教育用の VR 教育コンテンツの開発に取り込んだ。現在、当該コンテンツの α リリースができ、いくつかの要改善点があるものの、学生を対象に利用可能な状態となっている (Fig. 1)。一方、申請時、計画した TOKYO GAME SHOW2019 にての展示及びコンテンツの教育効果の評価は、倫理審査、コンテンツの開発遅延などの理由で実施できなかった。今後、当該コンテンツを改良するとともに、その教育効果を評価し、学会にての展示及び発表を継続で行う予定である。

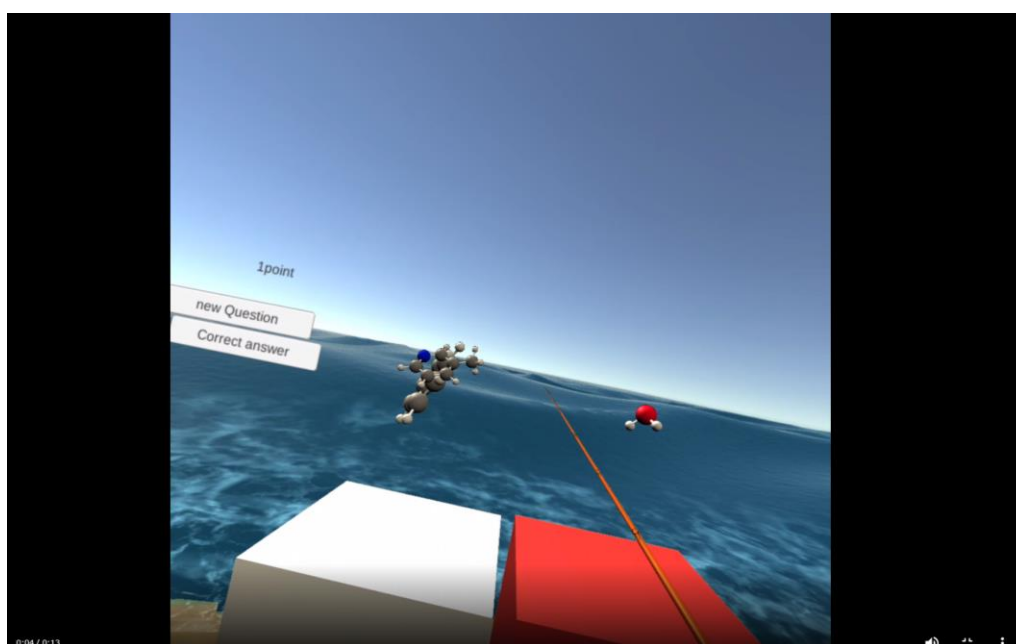


Fig.1. コンテンツの外観

各論

1. コンテンツの開発デバイスと環境の選別

本研究課題が開始後、我々はまず VR 教育コンテンツ開発するのに最適なプログラム環境などを調査した。多種多様なデバイスと開発環境があるが、最終的に、デバイス Oculus Quest の使用及び、2D のみならず 3D 表示に優れている Unity [3]、化合物を描画する python ライブラリー Rdkit [4]、情報・計量薬学分野で独自開発した、Unity 上で化合物・化学反応の 3 次元可視化に特化したライブラリー Galahad の使用を決定した。また、化合物の情報をサーバーで保持することを決め、サーバー管理も python で行うことにした。

2. コンテンツのデザイン

「医薬品の全合成の過程を対戦形式で学べる」のコンセプトのもとに、我々はコンテンツのデザインをカードゲーム形式や、電子教科書形式などを含む複数個案を議論・検討した。最終的に、教育内容の導入しやすさ、ゲームの娯楽性、さらに、実装のしやすさなどを考慮し、「化学反応釣りゲーム」(Fig. 2) の形でデザイン方針を決定した。

具体的に、化学反応の反応物をエサ、生成物を魚とし、異なる反応条件をいくつかの釣り池にし、釣りゲームをデザインした。ユーザーは、目的の生成物を得るために、反応物をエサとして結んでいる釣り竿を適切な反応条件の池に入れることで、目的生成物の魚が表示され、スコアが加算される。また、間違っている条件の池にエサを投入すると、反応しないため、反応物のままで表示され、スコアが加算されないようにした。この操作は設定問題数回分を繰り返すことで、ゲームのプレイヤーの最終得点が得られる。本ゲームは複数人の対戦形式で行うことも可能である。さらに、ゲームのステージなどを設定することで、教育問題の難易度をコントロールすることも可能だと考えられる。

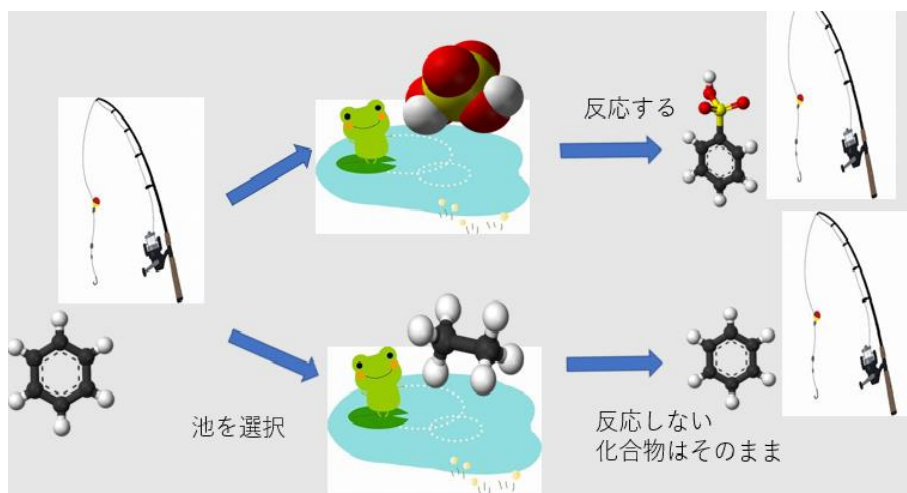


Fig.2. 釣りゲームのイメージ

3. コンテンツの実装

我々は問題を対処しながら、段階的にコンテンツの実装を行った。主に工夫した機能を報告する。

3.1 分子描画モジュールの最適化

分子描画は本コンテンツに必要とされるため、まず、分子描画モジュールを作成し、最適化した。今回、python のコードでゲームに必要な化学反応に必要な化合物（反応物、生成物、触媒などの反応条件に必要なとされる化合物）の構造情報を SMILES 形式(SMILES：分子の化学構造を英数字で文字列化した表記法)で所持し、管理する。必要な時、必要な情報を python でサーバーに送信され、サーバー内の Rdkit を用いて、SMILES から、Mol オブジェクトに変換し、分子を原子ごとに座標で書き出す。次に、サーバーから JSON 形式で Oculus Quest(デバイス)に送る。最後に、Unity 上で Galahad を用いて、化合物を画面に表示する。(Fig. 3)

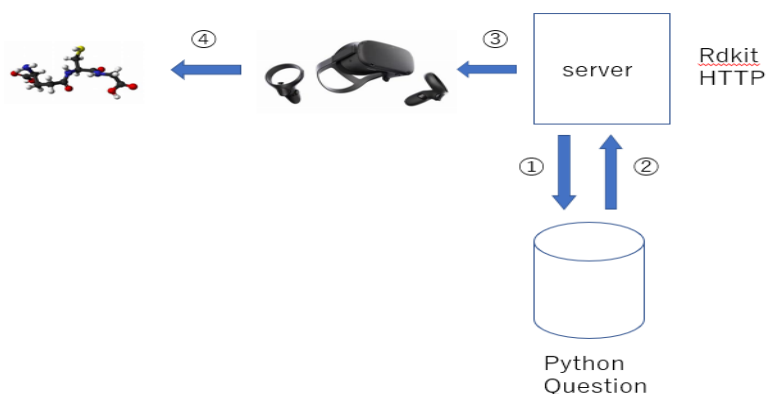


Fig. 3 分子描画のスキーム

3.2 反応物が生成物の変化過程の実装

次は、釣りゲーム中の反応物（エサ）から生成物（魚）への変化過程を実装した。事前用意した教育内容である化学反応を、反応物、触媒、生成物を分けて、それぞれの SMILES 形式をカンマ区切りで連結し、CSV ファイルで保存する。CSV ファイルを Python サーバーで開き、管理する。反応物が連結した釣竿が、反応条件の池に入れるたびに、CSV に保持している正解情報と照合する。この際に、Unity 独自の当たり判定の仕組み(OnCollisionEnter 関数)を用いる。正解であれば、立体化合物が変化し、Unity 上の釣竿の先端に生成物（魚）を表示する。(Fig. 4)

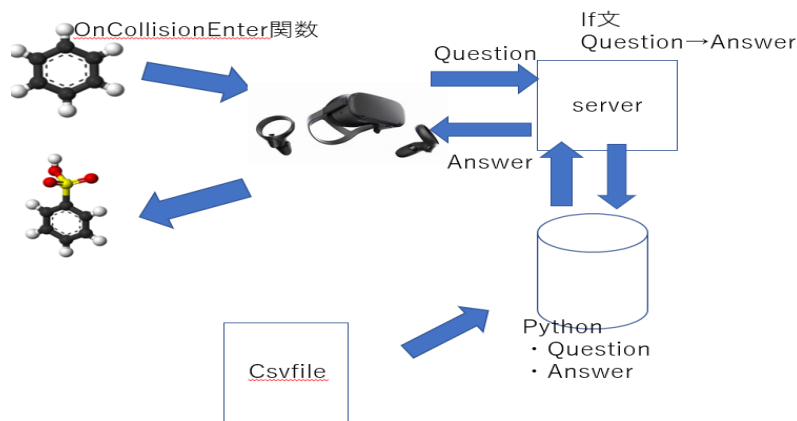


Fig. 4 反応物が生成物の変化

3.3 その他、スコア関数の実装や、Unity の環境 assets の連結なども行い、コンテンツの α リリースができた。

4. 教育効果を評価するための準備

開発した本コンテンツによる教育効果を評価する準備として、大学規定の人を対象とした研究の倫理審査を受け、審査委員会による承認を得た。しかし、実装などの作業は当初の予定より煩雑で、倫理審査も時間を要したため、本終了報告まで、実施できなかった。今後、コンテンツ教育効果についての研究 (Fig. 5) を継続する予定である。

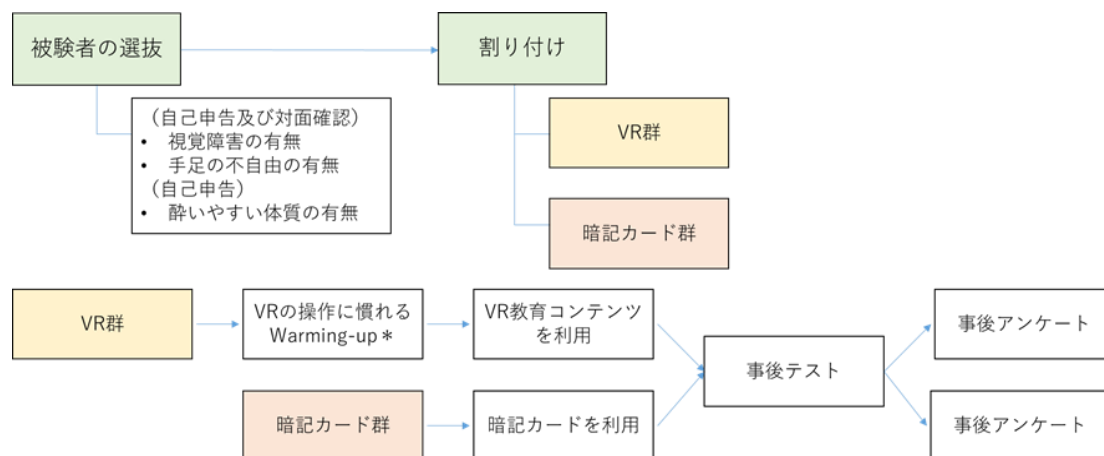


Fig. 5 人を対象する研究の予定概要

今後の展望

今後、コンテンツの複雑化 (複数の反応物および触媒条件などの対応)、操作性向上を改善しつつ、予定された教育効果の評価をしていく予定である。

参考文献

- [1] J. B. Ferrell *et al.*, "Chemical Exploration with Virtual Reality in Organic Teaching Laboratories," *J. Chem. Educ.*, vol. 96, no. 9, pp. 1961–1966, Sep. 2019.
- [2] C. O. Welder, "An All-In Approach to Flipping the Organic Chemistry Classroom Using Elements of Peer-Led Team Learning with Undergraduate Learning Assistants," 2019, pp. 119–148.
- [3] D. Probst and J.-L. Reymond, "Exploring DrugBank in Virtual Reality Chemical Space," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 58, no. 9, pp. 1731–1735, Sep. 2018.
- [4] N. Schneider, N. Fechner, G. A. Landrum, and N. Stiefl, "Chemical Topic Modeling: Exploring Molecular Data Sets Using a Common Text-Mining Approach," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 57, no. 8, pp. 1816–1831, Aug. 2017.