

虚拟现实技术在高等化学教育中的应用和探索

赵蕊, 陈东平*, 初庆钊

北京理工大学, 爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

摘要: 对于化学结构的理解是高等化学教育中的重要组成部分。在传统的教育方式下, 受限于可视化手段, 学习和理解复杂的化学结构非常困难, 因此学生在学习化学时会感觉晦涩难懂。在本项工作中, 我们通过把虚拟现实(VR)技术和分子动力学方法结合到一起, 开发了交互式分子结构可视化工具Manta。Manta工具可以生动形象地展示微观纳米结构, 同时允许学生与分子结构进行直接交互, 修改和创建新的化学结构。借助高精度实时计算技术与沉浸式VR技术, Manta带领学生走进真实的分子世界, 充分调动学习者的自主能动性, 可以作为传统教学的重要补充以促进高等化学教育的发展。

关键词: 虚拟现实; 化学教育; 分子动力学; 反应力场; 沉浸式教学

中图分类号: G64; O6

Application and Exploration of Virtual Reality in Higher Chemistry Education

Rui Zhao, Dongping Chen*, Qingzhao Chu

State Key Lab of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China.

Abstract: Understanding the various types of chemical structures is a critical task in higher education. However, it is difficult for students to understand these complex chemical structures when traditional teaching methods are used. The main issue lies in the lack of an appropriate visualization method. We developed an interactive visualization instrument for molecular structures (Manta) by combining virtual reality (VR) and molecular dynamics. Manta not only vividly displays microscopic structures, but also allows students to interact with the molecules using real-time manipulation. With the help of high precision real-time simulations and immersive VR technology, Manta shows students the various physical aspects of molecules in a highly detailed manner. The use of this instrument is expected to fully motivate students and act as a key supplement to traditional education methods.

Key Words: Virtual reality; Chemistry education; Molecular dynamics; Reaction force field; Immersive education

1 引言

自20世纪中叶起, 我国高等化学教育的内容在逐渐丰富, 化学教育工具更是在不断发展, 应用日益广泛。高等化学教育是围绕化学反应开展教学, 然而化学反应的教学实际上讲述的是化学结构在反应过程中如何发生相应的变化, 因此高等化学教育的核心是针对化学结构的教育(图1)。在20世

收稿: 2021-08-06; 录用: 2021-10-08; 网络发表: 2021-11-15

*通讯作者, Email: dc516@bit.edu.cn

基金资助: 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室自主课题(ZDKT21-01); 国家自然科学基金(21961122007, 52106130); 教育部第二批新工科研究与实践项目(E-AQGABQ20202702); 北京理工大学校级教学改革项目

纪80年代, 教师只能以图片和结构模型的形式来进行化学结构的教 学, 这种教学方式不够直观, 无法完全展现复杂立体的分子结构^[1,2]。随着多媒体三维结构展示工具的出现, 极大地提高了教学效率, 对于学生理解和掌握化学结构有很大的帮助, 展示了教学工具对于高等化学教育的重要作用。然而, 目前多数多媒体教学手段(包括现有的互联网教育)属于被动式教学, 只能进行化学结构模型的展示, 无法交互式地改变化学结构模型, 不能有效地满足学生的要求。

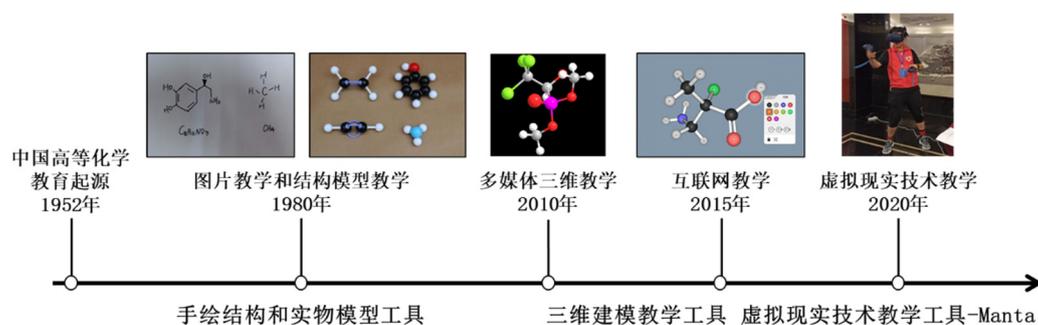


图1 我国化学结构教育工具的发展历程

随着计算机技术不断的进步和发展, 数字化教学逐渐占据了教学的主题, 虚拟现实技术正在趋于完善, 这种先进的可视化技术更是在不断地应用到教育领域。虚拟现实技术属于三维可视化技术, 通过实现被观测场景纵深的可视化, 达到立体成像效果。我们团队把虚拟现实技术引用到化学结构的教学中, 开发了一种全新的教学工具(Manta)。这一工具不仅可以直观立体地观察化学结构, 还可以实时与化学结构进行交互操作。我们通过小范围课堂教学实测和实验问卷调查, 发现这种新型工具可以有效提高教学效率, 增加学生对于化学结构的学习兴趣和创造力。

2 虚拟现实技术的介绍

虚拟现实技术(VR)利用计算机生成虚拟环境, 借助硬件设备使用户沉浸到虚拟环境中。这种技术充分调动了人的各个感官, 令人身临其境。如图2所示, 操作人通过VR眼镜进入虚拟世界, 使用操作手柄与虚拟环境中的模拟物体进行交互。Manta把这一项先进的技术引入到化学结构教育中, 加强学生对化学结构的理解, 引起学生对学习的兴趣, 增强学生的创造力和想象力。Manta使得教学突破了传统教学的时空局限性, 利用VR技术让学生在课堂中参与进来, 实施推进式辅导教学^[3]。



图2 基于虚拟现实技术的教学工具Manta的简要操作示意图

虚拟现实技术的实现需要使用专门的硬件设备。基础硬件设备包含了一个头戴式立体显示器，两个可用于交互的手柄，两个激光定位器。其中显示器和手柄使用的是HTC Vive的硬件设备(图3)。激光定位器(图4)主要通过空间位置扫描实现“操作人”的动作捕捉。在用户端，使用SteamVR驱动虚拟现实的硬件设备。SteamVR软件可以设置地面的位置和划分出可以进行操作的物理区间，管理头盔、定位器和手柄。当然通过SteamVR也可以将头戴VR显示器中的视角投影到笔记本电脑屏幕或者其他显示器。



图3 虚拟现实技术的基本硬件包含一个头戴显示器和两个手柄

图4中展示了虚拟现实设备的使用场景，可以看到测试者使用Manta工具与虚拟环境中的物体进行交互，其中测试者需要佩戴头戴显示器(头盔)，左手和右手分别拿着手柄。测试者通过手柄上的功能键与虚拟空间中的物体进行交互。此外，测试者需要时刻停留在定位器划分的区域中，定位器通过红外线才能感知到测试者手柄的操作。数据连接线负责连接头戴显示器和笔记本电脑，可以将电脑渲染的空间信息投影到虚拟现实空间中。



图4 Manta工具所需的硬件设备展示图

HTC的硬件设备为虚拟现实技术应用到化学教育中提供了技术支撑，充分调动学生的各个感官(视觉、听觉和触觉)，使得测试者可以身临其境，感受到真实的虚拟物体，并与之进行交互^[4,5]。学生可以充分地沉浸在课堂内容中，在课程内容中遨游和探索，使得抽象的结构可触摸、可互动、可感知，激发学生学习的主动能动性和学习兴趣。

3 Manta工具的功能介绍及其原理

3.1 Manta工具使用功能介绍

Manta工具通过虚拟现实技术来探索分子体系的演化和运动。Manta客户端使用Unity3D引擎来

进行可视化渲染，服务端进行实时的分子动力学底层运算。通过虚拟现实设备进入已经创建的分子结构系统，可以与已经构建好的分子结构进行交互。测试人也可以在虚拟现实环境中独立自行创建原子和分子结构，但需在底层分子动力学计算模块中需要添加相应的原子力场来描述原子间相互作用力。在Manta工具中，测试人利用VR手柄上的功能键直接选择单个或者一组原子，再通过肢体动作(手部动作)与虚拟环境中的分子进行交互，施加相应的作用力，从而实现用户与分子动力学模拟器之间的交互。

图5详细展示了Manta中左手手柄上已经实现的主要功能，目前左手和右手手柄分别设计有不同的功能。图中以左手手柄为例，其控制面板被分为一个“MENU”按钮和五个功能区间。五个功能区间包含ROTATE、MOVE、SCALE、SELECT和MORE五种操作模式。在“MENU”按钮中，继承了一个单独的控制面板，允许用户调整System、Visualization、Elements、Molecule和Others五组不同设置。“System”选项可以控制模拟空间的温度和力的大小(Force factor)，其中力的大小调整指用户拖拽手柄时施加到原子上的相互作用力的大小；“Visualization”选项允许使用者选择“VDW”和“CPK”两种化学结构可视化模式，同时还包含了周期性可视化显示方式，即在X、Y、Z方向上复制晶胞结构；使用者可以在“Elements”中，通过添加和删除原子功能，针对已有的分子结构进行修改，改变分子结构模型；“Molecule”选项则是控制分子的结构可视化，可以只显示原子或者只显示化学键，也允许原子和化学键同时显示；“Others”选项包含可视化渲染的材质选择，同时子选项“Contrail”可以对所有原子的轨迹进行可视化。在ROTATE、MOVE和SCALE模式下，Manta分别支持用户在虚拟环境中旋转、平移和缩放分子体系，以实现便捷的可视化。在“SELECT”模式下，可以选择单个特定的原子或一组原子进行进一步的相互作用，即施加相互作用力。我们进一步在“MORE”模式下，实现了可以调整VR渲染步长的设置，此步长设置指VR可视化中每渲染1帧的信息所对应的分子动力学模拟计算的步数。换句话说，用户可以通过调整“MORE”模式中的设置来加速或减慢分子的运动。在右手手柄上，我们进一步实现了用于以上五个操作模式的调整和默认设置的调节功能。

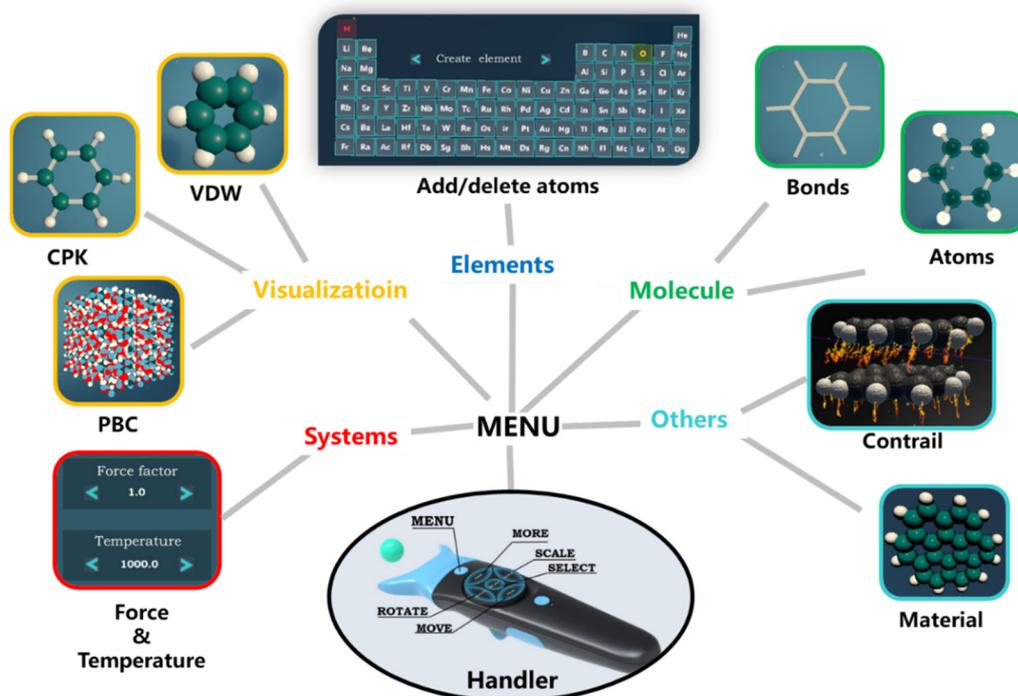


图5 Manta工具中已实现的手柄功能

3.2 Manta工具原理

Manta工具结构包括客户端、网络通信和底层分子动力学模拟器。其中客户端负责图形可视化以及用户与分子结构的交互，随后客户端的信息数据通过TCP/IP网路传输协议传输给底层计算模块，前端通过Unity^[6,7]进行展示，底层计算模块的运算采用了分子动力学软件包(LAMMPS)^[8]。在Manta工具工作过程中，Manta通过调用LAMMPS软件包进行分子动力学运算，运算结果通过通讯网络实时反馈到虚拟现实环境中，用户可以实时观测到分子的运动状况。底层分子动力学软件包与前端是通过应用程序接口(API)进行即时通信。本工作中进行测试的分子体系例子使用分子势能函数是ReaxFF力场^[9-11]。

在目前Manta软件中，可以同时支持30人以上的多人交互模式。在多人交互模式中，以图6为例，客户端A是主显示机，可以在VR环境中与物体进行交互。此外客户端A还具有拥有授权给其他客户端进行交互的权限。客户端B-C是副显示机，可以进入客户端A创建的分子体系，但是不能直接与环境中的物体交互。在客户端A授权后，就可以与环境中的物体进行交互。在应用过程中，客户端A通常为教师用户，用来开展相应的教学内容，其他客户端均为学生用户。此外，目前这种多人模式通过远程网络，允许前端多人进入相同的虚拟环境，实时在线进行交流和沟通，也可以多人在相同的虚拟环境下与物体进行实时交互，使得教学跨越了空间的限制，增加了学生的交流合作，对于调动学生的学习主动性有显著帮助。在教师和学生实验过程中，产生的数据均可以保存在本地的服务器硬盘，用于后续的学习和教案的优化，数据的积累是此工具的另一个重要特色。

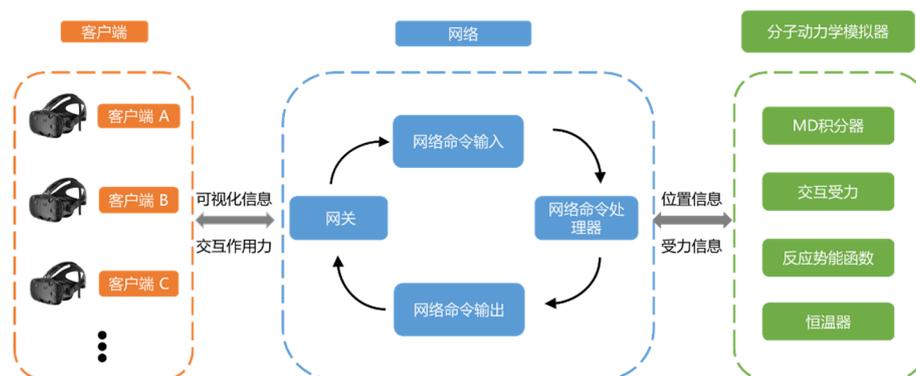


图6 利用Unity3D，前端VR头盔显示器与底层分子动力学模拟器的通信方案

4 Manta工具的应用案例

4.1 温度对于氢气与氧气燃烧过程的影响

燃烧反应是以燃料和氧化剂为初始反应物的混合体系的典型复杂反应，在较高温度条件下(>1000 K)，体系反应将自发进行，直至达到产物的化学平衡^[12]。在整个体系演化过程中，温度对于分子的运动速率有直接影响。从物理化学基本概念中，我们已知温度升高，分子的运动速率会有明显的增高，化学反应更容易发生。

利用Manta工具，在VR环境中创建一个氢气和氧气混合系统(当量比为1，图7)。在此系统中，观察不同温度下氢氧燃烧的运动速率，在此案例中设置了两个温度(300 K和1200 K)。在300 K条件下(图7a)，可以观察到氢气和氧气均无化学键断裂现象，原子的运动速率较慢；通过手柄升高温度至(1200 K，图7b)，我们可以明显地观察到氢气和氧气的运动速率明显升高，有少量氧氧键断裂，体系中氢气与氧气发生化学反应。在此案例中，测试者可以观察到温度对于氢氧燃烧反应的直接影响。对于教学来说，从传统的被动式教学转变为学生自主探索不同温度对化学反应影响的主动式学习，这种教学方式可以激发学生的学习兴趣，增加学生对知识和运动的深层理解和记忆。

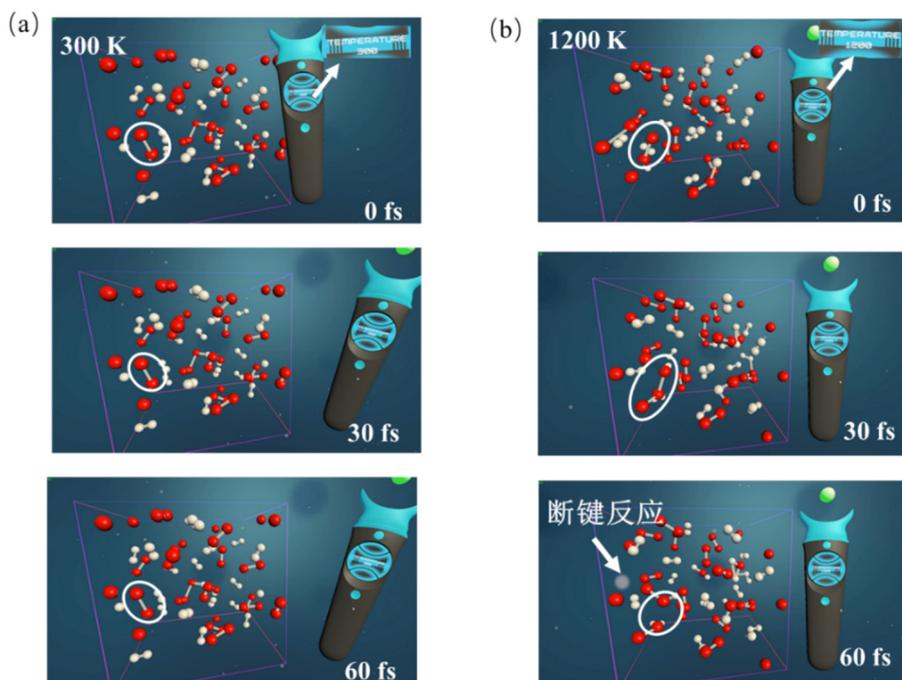


图7 在虚拟环境中不同温度下的反应速率

(a) 300 K; (b) 1200 K

4.2 气体反应中的有效碰撞和无效碰撞

在气体燃烧反应中，双分子反应均是通过分子间碰撞进行的。在碰撞时，必须有充足的能量(动能)才能克服能垒的约束，建立新的化学键，从而产生反应产物。但是，并非每次碰撞均导致反应的发生。当反应物的分子进行相互碰撞，实际上只有部分碰撞会导致化学反应的进行，这些碰撞被称为有效碰撞^[13,14]。其他碰撞过程由于碰撞角度不合适或者分子动能过低等因素，导致反应不能发生，被称为无效碰撞，即碰撞过后无化学反应的发生，无法产生新的生成物。

在Manta工具中，学生可以通过手柄拉动氢自由基(H)碰撞氢氧自由基(OH)。如图8a所示，H与OH之间由于碰撞角度不合适无法发生化学反应生成水分子。在这个过程中，H直接碰撞到了OH上H原子的位点，发生了无效碰撞，H被OH弹开，没有进一步发生化学反应。在图8b案例中，拉动氢H碰撞OH，发生了有效碰撞，进而发生 $H + OH = H_2O$ 的反应生成一个水分子。学生通过Manta工具，依靠自己的探索学习有效碰撞和无效碰撞，取得了良好的教学效果。

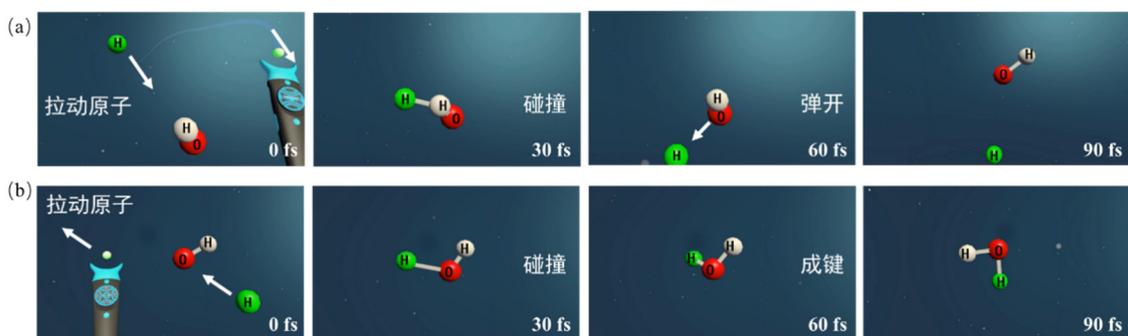


图8 在虚拟环境中，通过VR手柄探索化学反应中的无效碰撞和有效碰撞

通过以上两个案例,我们发现学生对于利用VR技术进行化学教学的积极性较高,可以快速地学习和探索有效的知识,对于激发学生想象力,增加学生学习兴趣有明显的帮助。借助VR技术,教师在教学过程中可以实现从传统的被动式教学变为主动式探索,是一种有效的教学转换。另外,未来通过网络进行虚拟环境的访问和操作,在虚拟现实环境中开展沉浸式教学,可以扩展教学受众群体,让更多的学生享受高质量的教学资源,有助于实现教学公平。

5 结语

Manta工具将虚拟现实技术引入到高等化学教育,不仅为化学教育提供了新的工具,也为虚拟现实领域增添了功能和内容。“互联网+”教育逐渐成为了未来的发展趋势,相比传统教育,虚拟现实教育有望通过其沉浸式体验,创造良好的教学效果。未来通过建立虚拟现实教育平台为高等教育院校改革提供服务,以VR教育入手带动内容创作、师资培养;吸引学生对化学学科的学习,推动高等化学教育行业发展,引领未来教育教学创新。

参 考 文 献

- [1] 刘蕾. 基于课程标准的变迁探究化学教学目标的发展(硕士学位论文). 哈尔滨: 哈尔滨师范大学, 2019.
- [2] 李文佐, 刘绍丽, 彭婕. 化学教育, **2021**, *42* (12), 30.
- [3] 李波. 网络安全技术与应用, **2019**, *24* (6), 84.
- [4] 邓婉婷, 战荫伟, 罗洁. 计算机测量与控制, **2021**, *29* (4), 227.
- [5] Borglund, F.; Young, M.; Eriksson, J.; Rasmussen, A. *Sensors* **2021**, *21* (9), 2966.
- [6] 陆承, 靳学胜. 系统仿真学报, **2021**, *32* (8), 1.
- [7] 高全力, 陈铭, 高岭, 孙俊辉. 西安工程大学学报, **2021**, *35* (3), 1.
- [8] Plimpton, S. *J. Comput. Phys.* **1995**, *117* (1), 1.
- [9] Trnka, T.; Tvaroska, I.; Koca, J. *J. Chem. Theory Comput.* **2018**, *14* (1), 291.
- [10] Behler, J. *J. Chem. Phys.* **2016**, *145* (17), 170901.
- [11] Jia, W.; Wang, H.; Chen, M.; Lu, D. Pushing the Limit of Molecular Dynamics with ab initio Accuracy to 100 Million Atoms with Machine Learning//*Short Pushing the Limit of Molecular Dynamics with ab initio Accuracy to 100 Million Atoms with Machine Learning*, International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Atlanta, GA, USA, Nov 9–19, 2020; IEEE Computer Society: Washington, DC, USA, 2021; pp. 1–14.
- [12] 李象远, 申屠江涛, 李宜蔚, 李象远. 高等学校化学学报, **2020**, *41* (4), 772.
- [13] 郑超. 化学教育, **2020**, *41* (22), 12.
- [14] 刘蕴华. 华夏教师, **2019**, *42* (13), 30.