

東京大学大学院工学系研究科「材料量子モデリング入門」報告

渡邊 聡

東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻

1. はじめに

東京大学大学院工学系研究科では、ソウル国立大学（以下、「ソウル大」と記す）工学系研究科との間で2007年度よりテレビ会議システムを利用した遠隔講義を実施している¹。ソウル大提供の科目については東大生はテレビ会議システムを通じて聴講し、逆に東大提供の科目の場合はソウル大生がテレビ会議システムを通じて聴講する、というものである。

共同研究等で長年交流のあるソウル大材料系専攻の Seungwu Han 教授と上記の遠隔講義を含め両大学の教育について話をしている中で、彼と私とで合同で遠隔講義を実施するアイデアが浮上した。二人とも大型コンピュータを駆使した計算によりマテリアルの物性を原子・電子レベルから解析する研究を専門としており、私は理論の枠組みと研究事例の紹介、彼は実習を中心とした講義を既に実施していたことから、合同講義では互いに補いあい、全部を一人で担当するより負荷を軽くできる。聴講する学生にとっても、他大学教員による講義という従来の遠隔講義の魅力は残しつつ、目の前での講義が半分あるというのはモチベーションが高まるかもしれない。

検討を重ねた後、東大生の実習については東京大学情報基盤センターの Reedbush-U を利用させてもらって本年度 S1S2 タームに開講した。東大側ではマテリアル工学専攻「材料量子モデリング入門」および工学系研究科共通「日韓遠隔講義Ⅷ」の2つの科目名が付与され、2単位の科目として開講した。以下にその内容を報告する。

2. 講義概要

両大学の学事歴等の違いを考慮し、4月～6月中旬の間に計9回、火曜日15時～17時45分（途中に休憩15分）という変則的な日程となった。学事暦の違いに加え、東大側での振替授業日（他の曜日の講義を実施する日）や両国の祝日のため、日程調整には大変苦労した。

講義内容を表1に示す。なお、実はソウル大側では3単位の科目として開講しており、表1の内容に加えて3/6、13、20、27および4/3の同じ時間帯に講義と実習を行っている。この部分は古典分子動力学法という計算法に関する講義と実習であり、東大生がこれを履修せず表1の部分だけを履修しても問題ないように講義・実習内容を調整している。他方、3/6～4/3の講義はビデオに収録され、講義資料とともにソウル大のウェブサイトにアップロードされたので、そのサイトの情報を4/10の講義時にアナウンスし、興味ある東大側受講生が視聴等できるようにした。

Han 教授担当分はソウルから、私の担当分は東京から配信するのを基本としたが、直接面と向かっての講義が1度はある方が教員にとっても学生にとってもモチベーションが高まると考え、私は4/17にソウルで、Han 教授は6/12に東京で講義するようアレンジした。

¹ <http://www.global30.t.u-tokyo.ac.jp/ut-snu/>

表1 講義内容

回数	日程	担当教員	講義地	講義内容
1	4/10	渡邊	東京	序論；量子力学の復習；分子軌道法
2	4/17	渡邊	ソウル	密度汎関数法の概要
3	4/24	渡邊	東京	密度汎関数法の詳細（交換相関汎関数等）
4	5/1	渡邊	東京	原子ダイナミクスの計算法
5	5/8	渡邊	東京	量子モデリングの将来展望；実習の準備
6	5/15	Han	ソウル	実習に必要な概念の復習；実習（簡単な例題の実行）
7	6/5	Han	ソウル	実習（結晶の構造と電子状態）
8	6/12	Han	東京	結晶中の欠陥の電子状態の計算法
9	6/19	Han	ソウル	実習（欠陥の電子状態）

3. 実習実施内容

既に述べたように、東大生の実習には Reedbush-U を使用した。ソウル国立大生は、Han 教授の研究室所有の計算機クラスターで実習した。表1に記載の通り、実習を行ったのは準備を含め第5、6、7、9回の計4回である。なお、実習内容の事前テストや最終講義日後のレポート課題への取り組みのため、本科目用の Reedbush-U アカウントは4/9 から7月末まで有効となるよう設定いただいた。テレビ会議システムを利用する関係で講義は工学部2号館211講義室で行い、実習に際しては各自のノートPCから Reedbush-U にアクセスするようにした。

実習に使用したプログラムは、世界的に広く使われている VASP (Vienna Ab initio simulation package)² である。Han 教授から、これまでに開講していた科目における実習で使用していたので今回もぜひ VASP を使いたいとの要望があった。VASP はライセンス料が有償のプログラムである。私の研究グループでは既に VASP のライセンスを保有しているものの、受講学生は必ずしも VASP ライセンス所有グループに属しているとは限らない。そこで開発元に問い合わせたところ、担当教員がライセンスを所有しており、受講生はプログラムをコピーできないようにして使用するのであれば、開発元に概要を通知して教育目的で使用する場合にはライセンス料は不要とのことであった。そこで、この科目用のアカウントを東大側担当教員・講義補助者（特任助教およびティーチングアシスタント）・履修者に発行してもらい、特任助教のアカウントのディレクトリに VASP のバイナリーファイルを置き、履修者にはこのファイルの実行権限のみ与える形（すなわち自分のディレクトリへのコピーはできない形）で実施した。

メインのプログラムは VASP であるが、実習において前処理・後処理、ジョブ投入等を行うため、学生各自のノートPCには以下のプログラムをインストールしてもらうようにした。

- (1) 原子配置等の可視化プログラム VESTA³
- (2) リモートログオンクライアントプログラム PuTTY⁴ (Windows ユーザーのみ)
- (3) ファイル転送プログラム WinSCP⁵ (Windows ユーザーのみ)
- (4) X-windows システム (Mac ユーザーは Xquartz⁶、Windows ユーザーは Xming⁷を使用)

² <https://www.vasp.at/>

³ <https://jp-minerals.org/vesta/jp/>

⁴ <https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/index.html>

⁵ <https://winscp.net/eng/docs/lang:jp>

(5) Python 利用環境 Anaconda2⁸

Reedbush-U には Python がインストールされているので (5) は不要とっていたが、実習直前にテストしたところ、計算結果の後処理に利用する Python プログラム (ソウル大側で作成したもの) を実行する際に旧バージョンのライブラリが必要と判明し、Reedbush-U 上ではユーザーがこれを追加することができないようであったため、今回はこれをインストールすることにした。

情報基盤センターのウェブサイトに記されているように⁹、Reedbush-U の教育利用では 1 ジョブあたりの最大実行時間 10 分、最大 ノード数 8 ノード (288 コア) (講義時間中は最大ノード数 4 ノード (144 コア)) の講義用キューが利用できる。今回の実習に際しては、1 ノード (36 コア) で用意した課題をいずれも実行できることを確認した。

VASP の動作は確認していたものの、後処理の部分の事前確認が不十分だったため急遽 (5) のインストールが必要になったこと等もあり、必ずしもスムーズとはいえなかったが、最終的には予定した実習を終えることができた。

4. 受講者に関する統計等

履修登録者は 10 名で、内訳は工学系研究科マテリアル工学専攻修士課程学生 7 名、同機械工学専攻博士課程学生 3 名であった。単位取得者は前者中 5 名、後者中 1 名の計 6 名であった。他に聴講を許可した学部学生 2 名 (いずれも工学部マテリアル工学科) が参加した。これらの数字は、近年の日韓遠隔講義の中ではトップクラスの多さである。とはいえ、マテリアル工学専攻で開講している他の科目と比べると人数は少なく、変則的な講義日程や英語での実施等、学生に敬遠される要因があったのではないかと思う。

他方、ソウル大側は当初 30 名程度、最終回も 20 名が出席した。Han 教授にとっても予想外の多さだったとのことであるが、ソウル大側では初めての合同講義ということでプレスリリースもされた¹⁰ことが影響したのかもしれない。受講者は材料系専攻の大学院生が多かったが、化学・生命工学、原子力工学、機械・航空宇宙工学、エネルギーシステム工学等の専攻に所属する大学院生も含まれていた。

最終回に行ったアンケートの集計結果を表 2 に示す。両校の教員が合同で行う遠隔講義は今回が初めてだったので、まずこのような形で行う意義をたずねたところ、おおむね好意的であった。実は今回はマイクの問題で教員の声が聞きづらいことがあったようで、この点をコメント欄で指摘する声が多々あった。そうでなければもう少し高評価であったかもしれない。次に、通常の時間割と異なる変則的な開講であることが学生からみて講義を敬遠する要因になるかを聞いたが、この点については聴講した学生は障害と感じていないようであった。講義の全般的な満足度、内容の適切さ、教え方の技量については、受講した内容が異なる (既述のようにソウル大側は 3 月～4 月初めの講義・実習もあった) ことに鑑み、東大生のみにとずねた。今回の科目の内容は量子力学や固体物理学の基礎知識を要するので、これらについて履修していたかどうかによって評価が二極化したようであった。

⁶ <https://www.xquartz.org/>

⁷ <http://www.straightrunning.com/XmingNotes/>

⁸ <https://www.anaconda.com/>

⁹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/education/>

¹⁰ <https://eng.snu.ac.kr/node/15589>

表2 アンケート集計結果(数字併記の場合は東大生/ソウル大生。1つの場合は東大生のみ。)

	評点	1	2	3	4	5	平均
合同の意義	高い⇔低い	4/2	3/10	1/8	0/0	—	1.63/2.30
変則的開講	障害⇔問題無し	0/1	2/2	3/5	3/12	—	3.13/3.40
満足度	低い⇔高い	1	2	1	1	3	3.38
内容	不適切⇔適切	0	2	1	2	3	3.75
教え方	悪い⇔良い	0	3	1	2	2	3.38

5. 終わりに

他大学の教員と合同で科目を開講するのも、遠隔講義を行うのも、私には初めての経験であった。実習の準備等、反省点多々あったが、何とか無事に終えてほっとしている。Han 教授とは、隔年開講でこの科目を続けたいということで意見が一致している。ソウル大側と東大側とで実習の計算機環境が異なっていたのはやはり不便な点があったので、次回はソウル大生も東大情報基盤センターのスーパーコンピュータを使わせてもらう方向でぜひ検討したい。

謝辞

本講義の実施に際しては、Seungwu Han 教授に多大な協力をいただいた他、東京大学情報基盤センターの職員の皆様、工学系研究科国際工学教育推進機構関口圭子特任専門員、同研究科マテリアル工学専攻清水康司特任助教、およびティーチングアシスタントのHoheok Kimさん(東大)、Gun-Woo Kang さん(東大)、Wonkseok Jeong さん(ソウル大)、Dongsun Yoo さん(ソウル大)に大変お世話になった。記して感謝の意を表す。