

東京大学大学院工学系研究科「材料量子モデリング入門」

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

「材料量子モデリング入門」（「日韓遠隔講義Ⅷ」）は、ソウル国立大学（以下、「ソウル大」と記す）材料系専攻の HAN Seungwu 教授と私が共同で担当して 2018 年度 S1S2 タームにはじめて開講された。東京大学大学院工学系研究科はソウル大工科大学との間で 2007 年度からテレビ会議システムを利用した遠隔講義を実施していたが、この枠組みの中での従来の遠隔講義は、ソウル大提供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、というものであった。これに対し、共同で担当し、半分ずつ分担することにより、全部を一人で担当するより教員の負荷を軽くするとともに、海外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、半分は目の前で受講することで受講生のモチベーションを高めることを「材料量子モデリング入門」ではねらった。東京大学情報基盤センターの Reedbush-U を利用した実習も含めた形で実施し、その報告は本誌に掲載された¹。

報告記事にも書いた通り、2018 年度の講義終了時点では隔年開講でこの科目を続けたいというので HAN 教授と意見が一致していた。そして、2019 年秋から具体的な相談を始め、2020 年度 S1S2 タームに 2 回目を実施した。以下にその内容を報告する。

2. 講義概要

本講義は、量子力学に基づいて材料の構造や性質を予測する「密度汎関数法」という理論計算手法の概要の理解を目指しており、理解を深めるために計算機シミュレーションの実習も含めている。2018 年度同様、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。両大学の学事歴等の違いを考慮し、4 月～6 月の間に計 8 回、水曜日 15 時～18 時（途中で休憩 15 分）という変則的な日程となった。

講義日程と各回の内容を表 1 に示す。学事暦の違いや両国の祝日のため、残念ながら第 2 回と第 3 回との間がずいぶん長く空いてしまった。なお、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 月に古典分子動力学法という計算法に関する講義と実習を行っている。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・実習内容を調整するとともに、興味ある東大側受講生は古典分子動力学法部分の講義資料を入手したり、録画を視聴したりできるようにした。なお、私が主に理論の枠組みと研究事例の紹介を、HAN 教授が実習とそのための基礎的な講義を担当したが、2018 年度は私の担当分を先に実施したのに対し、それでは具体的なイメージを把握しにくいとの受講生の声があったことから、今回は順序を逆にして実施してみた。

計画時には自校の受講生に対して対面で講義する予定であったが、新型コロナ禍のため、全

¹ 渡邊聡、スーパーコンピューティングニュース Vol. 20, No. 6, pp. 55-58 (2018)。

表 1：講義日程および内容。

回数	日程	担当教員	講義内容
1	4/8	HAN	講義と実習（基礎的な概念の解説、ソフトウェアの使い方）
2	4/22	HAN	講義と実習（エネルギーバンド構造）
3	5/13	HAN	講義と実習（結晶中の欠陥の電子状態）
4	5/20	HAN	実習（結晶中の欠陥の電子状態）
5	5/27	渡邊	講義（序論、量子力学の復習、分子軌道法の概要）
6	6/3	渡邊	講義（密度汎関数法の概要）
7	6/10	渡邊	講義（様々な系のモデリング法、原子ダイナミクスの計算法）
8	6/17	渡邊	講義（前回までの補足、量子モデリングの将来展望）

ての講義・実習をオンラインで実施した。HAN 教授担当分は 2018 年度の講義の録画を配信し、実習課題のみ若干改訂したが、私の担当分は、改訂したい部分が多かったこともあって Zoom で行った。Zoom での講義は録画して Google Drive にアップロードし、受講登録者が後日視聴できるようにした。

なお、講義は実習の説明を含めてすべて英語で行い、講義資料もすべて英語で作成したが、実習に関する質問は日本語でも受け付けた。

3. 実習実施内容

2018 年度の実習には Reedbush-U を利用したが、このシステムの利用期間が 2020 年 6 月末までであったのに対し、レポート課題に時間をかけて取り組みたい受講生もいる可能性を考慮して課題提出の最終締め切りを 7 月末に設定したため、今回は Reedbush-H を使用した。なお、ソウル大生も本講義で Reedbush-H を利用可能であることを事前に情報基盤センターに確認し、HAN 教授にその旨連絡したが、使用するソフトウェアのライセンスや実行環境を有していることを履修条件として既にアナウンスしたとのことで、東大生のみ Reedbush-H を利用した。実習は受講生各自が自宅等から Reedbush-H にアクセスして行う形となり、実習に対するサポートはすべてオンラインで行った。具体的には、指定の講義時間中（15 時～18 時）は Zoom セッションをずっと開いておいて chat での質問を受け付けた他、Google Form と ITC-LMS でも質問を受け付けた。多くの質問はティーチングアシスタント 2 名が分担して答えてくれた。

密度汎関数法計算の実習に使用したプログラムは、前回に引き続き世界的に広く使われている VASP (Vienna Ab initio simulation package)²である。VASP はライセンス料が有償のプログラムであるが、担当教員がライセンスを所有しており、受講生が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ライセンス料は不要である。この科目用の Reedbush-H 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）で実習を実施した。

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

² <https://www.vasp.at/>

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) SSH 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)

2018 年度に実施した際にはソウル大側が作成した前処理・後処理用の Python コードが Reedbush-U 上でうまく動作しないことが直前に判明して対応に苦労したが、今回は事前に改めてチェックし、ライブラリを 1 つ用意し直すことで Reedbush-H 上で動作することを確かめた。また前回は X-windows システムを各自のノート PC にインストールすることも推奨したが、今回は X-windows システムを各自の PC にインストールせずに実習を進められるようにした。

4. 受講者に関する統計等

2018 年度は履修登録者 10 名、単位取得者 6 名だったが、今回は履修登録者 22 名、単位取得者 8 名だった。履修登録者の内訳は工学系研究科マテリアル工学専攻 16 名 (修士 15 名、博士 1 名)、同機械工学専攻 3 名 (修士 2 名、博士 1 名)、同化学システム工学専攻 2 名 (修士・博士各 1 名)、同応用化学専攻 1 名 (修士)、単位取得者の内訳はマテリアル工学専攻修士 6 名、機械工学専攻修士 1 名、化学システム工学専攻修士 1 名であった。他に聴講を許可した学部学生 2 名 (工学部マテリアル工学科)、研究員 2 名 (新領域創成科学研究科物質系専攻) が受講した。変則的な日程であることに加えて実習もオンラインで行うことになったため、何名受講してくれるか心配だったが、履修登録者数、単位取得者数ともに 2018 年度を上回り、ホッとしている。なお、ソウル大側は当初 30 名程度、最終回も 20 名が出席しており、この数は 2018 年度とほぼ同じである。

履修登録者数に比べて単位取得者数が少ないのは、課題に (実際には難しくないのだが) 時間がかかりそうと思われたことや修了要件を既に満たしているので聴講だけした学生が相当数いたことが主因と推測しているが、実習のサポートにも改善すべき点があったかもしれないと反省している。Google Form 等を利用したサポートシステムはうまく機能し、質問してきた受講生の実習時のトラブルはすべて解決できたのだが、Reedbush-H の利用状況から、質問する前にあきらめてしまった受講生が相当数いたと推測されたからである。例えば、SSH を利用したリモートアクセスのための鍵の生成や登録がうまくいかなかった受講生がいたのではないかとと思われる。対面形式での実施の場合、このような問題は実習時間中にティーチングアシスタントに気軽に質問して解決できたと思われるが、オンラインでの質問は、入力の手間や解答までのタイムラグ等の点で、対面時に比べると少しハードルが高かったかもしれない。また、実習を始める前にソフトウェアのインストールや SSH の鍵生成・登録等について時間をかけて説明すればよかったのだが、今回はスケジュールの都合もあって説明は短時間で済ませ、あとは受講生に配布資料を読んで進めてもらう形にしてしまい、この点も反省している。

5. 終わりに

初めての点が多かった 2018 年度の講義に比べ、今回はその反省点を踏まえて準備した甲斐あ

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>

って、新型コロナ禍にもかかわらず全体としては前回より良い形で実施できたと思っている。しかし、前節にも述べた通り改善すべき点はある、一方、新型コロナ禍は本講義に限らずオンライン教育のやり方については大きな進展をもたらした。HAN 教授とは2年後にまた開講しようと話しているが、開講する場合にはこれらを踏まえてさらに改善した形で実施したい。

謝辞

本講義の実施に際しては、HAN Seungwu 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（2019年度中の準備）および杉浦仁美学術支援専門職員（2020年度）、同研究科マテリアル工学専攻清水康司助教、およびティーチングアシスタントの大野雅央さん（東大）、MANO Poobodin さん（東大）、LEE Kyeongpung さん（ソウル大）、HONG Changho 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。