

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

2022年度 A1A2 タームに開講した「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、2020 年度が 2 回目、今回は 3 回目の開講となる。情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用した実習を含めて実施したので、本誌において実施報告をさせていただく。なお、2018 年度¹、2020 年度²の講義についても本誌に報告記事が掲載されているので、興味のある方は参照されたい。

2. 講義概要

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 年度から遠隔講義を実施しているが、「材料量子モデリング入門」では、両校の教員が半分ずつ分担することで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ねらっている。2020 年度はコロナ禍のために Zoom を利用した完全オンライン形式で行ったが、今回は Zoom を利用しつつ講師が講義している側では受講生は原則として講義室で受講する形で実施した。実習は、東大受講生は情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用したのに対し、ソウル大受講生は各自の所属研究室等の計算機を利用する形で行われた。いずれの場合も、受講生はノートパソコンを持参し、講義室からこれらのコンピュータにアクセスして実施した。

2018 年度・2020 年度と同様に、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」と工学系研究科共通「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。ソウル大側では 3 単位の科目として開講し、本講義の前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た点も過去 2 回と同様である。両校の学事歴等の違いを考慮し、10 月～12 月の間に計 8 回、火曜日 15 時～18 時(途中で休憩 15 分)という変則的な日程で実施した。

本講義では、量子力学に基づく計算によって材料の構造や性質を予測する手法を理解することを目指している。内容は、密度汎関数法という手法の概要とその応用事例の講義、および理解を深めるためのシミュレーション実習から構成されている。講義日程と各回の内容を表 1 に示す。理論の枠組みと研究事例の紹介(渡邊が担当)と実習とその基礎的講義(HAN 教授が担当)をどのような順序で行うかという点については試行錯誤を重ねており、今回は 2～3 回程度で交代する形とした。それぞれを前半・後半にまとめた過去 2 回より受講生の理解を深める上でよかったように思う。なお、分担する 4 回の内の 1 回は相手校に出張して講義をすることは講師にとっても受講生にとっても好ましいと考え、2018 年と同様、そのように実施した(2020 年度はコロナ禍のために海外出張できなかった)。Han 教授の東大における講義の様子を図 1 に示す。

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)。

² 渡邊聡、スーパーコンピューティングニュース Vol. 23, No. 1, pp. 44-47 (2021)。

表 1：講義日程および内容。

*は相手校において講義をしたことを示す。

回数	日程	担当教員	講義内容
1	10/11	渡邊	講義（序論、量子力学の復習、分子軌道法の概要）
2	10/18	渡邊*	講義（密度汎関数法の概要）
3	10/25	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）
4	11/8	HAN	講義と実習（エネルギーバンド構造）
5	11/15	HAN	講義と実習（結晶中の欠陥の電子状態）
6	11/22	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）
7	11/29	渡邊	講義（前回までの補足、量子モデリングの将来展望）
8	12/6	HAN*	講義と実習（スピンおよび磁性）

なお、HAN 教授担当講義の一部は過去の講義の録画を配信する形で行った。それ以外の部分はソウル大のティーチングアシスタント (TA) による実習課題の説明も含め Zoom で録画し、講義後に Google Drive にアップロードして両校の受講者が後日視聴できるようにした。また、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。渡邊担当分では問題に対する解答を記述させるレポートを毎回、HAN 教授担当分については計算機シミュレーションした結果をまとめるレポートを計 2 回出題した。

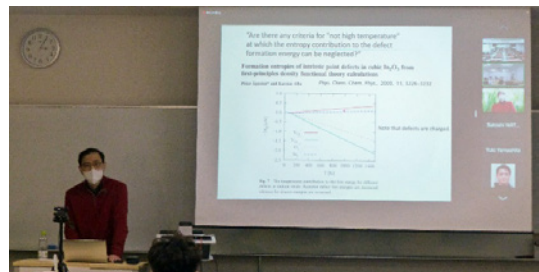


図 1：HAN 教授の東大での講義風景。
写真ではわかりにくいですが、スクリーン右上にソウル大と東大の講義室の様子を撮影した画像が見える。

3. 実習実施内容について

既述のように東大の受講生は情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用して実習を行ったが、2018 年度は Reedbush-U、2020 年度は Reedbush-H、今回は Wisteria-0 と、毎回違うシステムを利用することになった。密度汎関数法計算の実習には、2018 年度・2020 年度と同様に世界的に広く使われている VASP (Vienna Ab initio simulation package) を使用した。VASP のライセンスは有償であるが、担当教員がライセンスを所有していて受講生がプログラムをコピーできない形で教育目的に使用する場合には、開発元に概要を通知した上で無料で利用できる。この科目用の Wisteria-0 アカウントを東大側担当教員と受講生だけでなく講義補助者（助教および TA）の分も発行してもらい、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）で実習を行った。

さて、上記の形での VASP の利用は 2018 年度・2020 年度と同じなのだが、実は Wisteria-0 上で「履修者には VASP 実行ファイルの実行権限のみ与え、このファイルをコピーすることはできないようにする」という設定が当初うまくできず、苦労した。情報基盤センターに何度か質問した結果、富士通コンパイラでアプリケーションを構築した場合にはデフォルトでラージページ機

能が有効となり、ラージページ機能を使用する場合は実行モジュールに対する read 権が必要となっていることが所望の設定ができない原因と判明した。そして、回避策としてジョブスクリプト内での環境変数の設定によりラージページ機能を無効化する方法を教えてください、所望の設定をすることができた。

実習において前処理・後処理、ジョブ投入等を行うため、2020 年度と同様に学生各自のノート PC に以下のプログラムをインストールしてもらったようにした。

- (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)

ソウル大側受講生とは利用している計算機システムが異なるため、ソウル大 TA が作成した前処理・後処理用の Python コードが Wisteria-0 上でうまく動作しない可能性があることは前 2 回に経験していたので、今回も事前に動作チェックをし、必要な場合には修正を施したコードを受講生に配布した。

4. 講義を終えて

履修登録者数は 2018 年度 10 名、2020 年度 22 名、今回 15 名だった。また単位取得者数は、2018 年度 6 名、2020 年度 8 名、今回 8 名だった。これまでと同様に工学系研究科マテリアル工学専攻所属の受講者が多かったが、同電気系専攻、機械工学専攻、物理工学専攻、情報理工学系研究科システム情報学専攻所属の受講者もいた。また、2020 年度は聴講のみして単位を取得しなかった者が相当数いたが、今回は最初の 1~2 回のみ出席した学生が若干名いた他は出席した学生全員が単位を取得した。この違いは、2020 年度は実習におけるトラブルもメールや Google フォーム等によりオンラインで対応したのに対し、今回は実習時間中に TA や助教に質問してトラブルを解決できたことによるものと思う。なお、ソウル大側の受講者数は東大側の約 2 倍であり、これは過去 2 回と同様であった。

最終回到 Google フォームで受講者に対して行ったアンケートの結果を表 2 に示す。回答者総数は 14 名で、受講者の約半数だった。また回答者の東大生/ソウル大生比率は受講者の比率と同様、ほぼ 1 対 2 だった。本講義のような海外大学との合同講義については、意義が大きいという声が多かった。海外大学の教員の講義を受けられるという点以外に、相手校の受講生の質問に刺激を受けた、2 人の教員の講義により同じ内容を異なる視点から見ることができたところがあった、といった声があった。講義の時間帯や回数等が変則的である点については、あまり問題でな

表 2: 受講者へのアンケートの結果。

評点の意味は、例えば「合同講義の意義」の場合、意義が小さければ 1 点、大きければ 4 点としている。

	評点の意味	1 点	2 点	3 点	4 点	平均
合同講義の意義	小さい⇔大きい	1 名	1 名	5 名	7 名	3.29 点
変則的開講	障害⇔問題無し	0	4	5	5	3.07
休暇中に集中開催	良くない⇔良い	2	5	3	4	2.79

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>

いと感じている受講生が多かった。大学院生なので変則的な形にも対応しやすいという声もあった。ただし、履修登録したのに実際には受講しなかった学生や、本講義を履修登録しなかった学生にとっては変則的な開講時間がネックだった可能性は否定できない。なお、学期中に今回のような形で開講するのと夏季・春季の休暇期間に集中的に開講する形のどちらが良いかという点については、意見が割れた。

アンケートの自由記述欄に書かれた意見を読んで、反省すべき点が2つあったことに気づいた。1点目は音声に関することである。各回の講義開始時と休憩時間後には相手側に音声がクリアに届いているかソウル大側 TA に確認したのだが、音声が届きづらい時があったとの意見が複数あった。もっと早くに気づいていれば原因究明や対策ができたかもしれない。2点目は、実習に関することである。ソウル大側 TA が自分で実習内容を実行しながら説明してくれたのだが、作業に大変習熟しているために進み方が速かったこと、東大側とは用いている計算機が異なるために作業の細部に違いがあることの2点で東大側受講者から不満の声があった。後者の点については両校の受講者が同じ計算機を使うのが最善の解決法であり、次回また本講義を開講するチャンスがあった際には、ソウル大生にも東大の情報基盤センターのスパコンを利用してもらうことを HAN 教授に強く勧めたいと思う。

以上に加え、相手校の学生と交流する内容が無くて残念だったとの意見もあった。本講義では、多くの受講生にとって内容が高度なものであるため、各自に実習で理解を深めてもらうところまでしか考えていなかったが、この指摘はもっともであり、両校の学生が共同作業するような課題を盛り込むと、一層意義の大きな内容になったかと思う。次に開講する機会があれば、この点もぜひ検討したい。

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、工学系研究科附属国際工学教育推進機構杉浦仁美特任専門員、同研究科マテリアル工学専攻清水康司助教、および TA の大野雅央さん（東大）、DOU Ying さん（東大）、JUNG Jisu さん（ソウル大）、AN Hyungmin 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。