

平成 30 年 6 月 13 日現在

機関番号：13301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2017

課題番号：26560084

研究課題名(和文) 学部向け計算科学教育におけるニーズ型教材の開発

研究課題名(英文) Development of needs type teaching materials for computer science education for undergraduate students

研究代表者

岩崎 宏 (Iwasaki, Hiroshi)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号：30242514

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,200,000円

研究成果の概要(和文)：計算科学教育の多くは大学院向けであり、学部学生向けに計算科学の必要性や計算科学の考え方を教える教材は少ない。

本プログラムは学部学生向けの計算科学教材、とくに、数値計算技法や計算機技術などの知識「シーズ」から出発するのではなく、具体的な物理の問題を解決する必要性「ニーズ」から出発する計算科学教材の開発を目指した。プログラミングや数値計算技法を知らなくても、エクセルなどの既存のソフトウェアを使うことで計算科学の考え方を学べる教材を目指す。力学・電磁気学・統計力学・熱力学・量子力学の幾つかのトピックについてパイロット教材を作成した。

研究成果の概要(英文)：Most of computational science education is for graduate school students, and there are few teaching materials to teach to undergraduate students the necessity of computational science and the way of thinking of computational science.

This program aimed at developing computer science teaching materials which teaches the concept of computational science that is necessary to solve physical problems, not teaching knowledge such as numerical calculation technique and computer technology. We aim to create teaching materials by which students can learn the concept of computational science even without knowledge of programming and numerical calculation techniques.

We created pilot teaching materials on several topics of dynamics, electromagnetism, statistical mechanics, thermodynamics, quantum mechanics.

研究分野：計算流体力学、液体論

キーワード：計算科学教材 学部学生向け パイロット教材

1. 研究開始当初の背景

京コンピュータが2012年9月より共用開始され、2022年にはエクサスケールコンピュータ「ポスト京」の実現が計画されており、これらに対応した新しい計算科学教育の体系化が急務である。

高度な大学院レベルの教育については大学院GP(大学連合による計算科学の最先端人材育成)や大型プロジェクト(革新的HPCI)、あるいは、大学院修士課程(神戸大学、兵庫県立大等)における計算科学教育などの取り組みがある。海外においてもSHODOR(<http://www.shodor.org>)、CSEP(<http://www.phy.ornl.gov/csep>)などが知られる。

しかし、これらの多くは大学院向けの教材である。

学部教育用の計算科学教材には、従来の計算機技術や数値計算技術から出発する(大学院向けの)計算科学教材だけでなく、物理の問題意識から出発し、計算科学の必要性・重要性を理解させながら、計算科学について学習させる教材も必要である。しかし、このような教材はなかなかない。

金沢大学は国内で唯一、学部教育課程の計算科学教育プログラムを持ち(理学部 計算科学科:H8-H23、理工学域 数物科学系 計算科学コース:H20-)、13年間にわたり大学学部の計算科学教育による卒業生を出しており、その間、研究代表者・分担者を含めたスタッフはいくつかの計算科学教育教材を開発することで計算科学教育に取り組んできた。

そこで、研究代表者・分担者はその経験を生かして、学部向け学生用の教材を開発できないかと考えた。

2. 研究の目的

本研究の目的は大学学部向けの計算科学教育に対応したニーズ型教材を開発し、新しい計算科学教育の体系化に向けた検証をおこなうことである。

「計算科学」の重要性は日々高まって来ており、従来の計算科学教育の再考と新たな教材開発・カリキュラムの体系化が急務である。本研究では、数値計算や計算機技術から出発するシーズ(seeds)型計算科学教育ではなく、計算科学の必要性から出発するニーズ(needs)型計算科学教育の実施をめざす。

計算科学的アプローチによって対話的・視覚的に自然科学を学習させるスタイルは、高校までの理科教育および大学院における研究教育とのシームレスな連携を考えたもので

あり、申請者らは新しい計算科学教育の可能性にむけた研究をおこなう。

パイロットプログラムとして計算科学の幾つかのトピックスについてニーズ型教材を作る。本研究で作成した教材や情報は、誰でも使えて(オープン)でいかなる制限もない(フリー)なライセンス形態で公開する。学部向け計算科学教育のリソースの集約・公開をおこなうことで、全国の理学系学部における計算科学教育を推進し、計算科学を志望する学生を増やすことで、高度化する計算科学教育を支えることを目指す。

3. 研究の方法

いくつかのトピックに限定し、以下のモデル教材を作成することを計画した。

(1) 力学(落下運動と数値解法)

落下運動などの運動について、運動方程式に現れる微分を差分で解釈し、微分方程式を差分法とオイラー法で近似的に解くことを考える。エクセルを使って近似計算を行えることを示す。

(2) 統計力学(ブラウン運動とモンテカルロ法)

ブラウン運動の動画映像、サイコロを使った酔歩運動の体験、エクセルによる乱数発生および乱数の統計的性質について確認、エクセルによるモンテカルロ法計算(円周率)、プログラムによるブラウン運動の再現。

(3) 熱力学(熱伝導と拡散方程式)

熱伝導を記述するフーリエの法則から熱伝導方程式(拡散方程式)を導き、シミュレーションを行う。

(4) 電磁気学(静電場とラプラス方程式)

静電ポテンシャルと小振幅シャボン膜がともにラプラス方程式(ポアソン方程式)で記述されることを用いて、静電ポテンシャルの性質を2次元膜の可視化で表現する

(5) 量子力学(基底状態の波動関数) シュレディンガー方程式の虚時間化(拡散方程式化)による最小固有値に対応する固有ベクトルの探索。

4. 研究成果

数値計算技法や計算機技術などの知識「シーズ」から出発するのではなく、具体的な物理の問題を解決する必要性「ニーズ」から出発する計算科学教材、すなわち、プログラミングや数値計算技法を知らなくてもエクセルなどの既存のソフトウェアを使うことで計算科学の考え方を学べる教材、「ニーズ型計

算科学教材」の開発を目指した。力学・電磁気学・統計力学・熱力学・量子力学の幾つかのトピックについてモデルとなるパイロット教材の作成を行い、評価を行うことを目的とした。

(1) 力学 (落下運動と数値解法)

力学のコンテンツはカードに空欄を入れたものを用意し、与えられた加速度に対して速度の変化と位置の変化を計算する表を作った。エクセルを使えば、以上の計算を高速でできることを示し、更に、モンキーハンティングのシミュレーションを実行させた。単純なデモンストレーションだが、興味を引くことができ、プログラムで作成する興味を持ってくれた。

(2) 統計力学 (ブラウン運動とモンテカルロ法)

統計力学の教材である「ブラウン運動を学ぶ」では顕微鏡でブラウン運動を観察したあと、サイコロ等の具体的な乱数に関する実験を行う。その後、エクセルの疑似乱数を使って分散・平均などの統計量を計算し、更にグラフ機能を使って疑似乱数で生成した軌跡がブラウン粒子の運動の軌跡と似たものになることを体感させ、計算機の必要性を実感させる。さらにブラウン粒子と分子の衝突シミュレーションプログラムを用いて、分子不可視のままのブラウン粒子の運動がランダムであることを確認させたあと、分子を可視化してブラウン運動の原因が分子の衝突にあることを理解させる。更にアインシュタインの揺動散逸理論を紹介した。このコンテンツを高校一年生向けの一日講義のために開発し、後に大学一年の演習にも使用した。この講義は非常に好評であり計算科学の必要性を理解させるものであった。

- (3) 熱力学(熱伝導と拡散方程式)、
- (4) 電磁気学 (静電場とラプラス方程式)、
- (5) 量子力学(基底状態の波動関数)

これらの3つのコンテンツは、偏微分方程式の数値解法という視点で共通であり、拡散方程式の解法を基本として、ラプラス方程式の解法、シュレディンガー方程式の固有値問題の解法と、一つの連続した講義の形態を取る。

(3) 非平衡熱力学の重要な項目である熱伝導のフーリエ則から出発して拡散方程式を導き、拡散方程式の振る舞いを調べるコンテンツを作った。複数の熱浴の熱伝導を考えることで、差分化した拡散方程式を導き出し、それを数値的に解くプログラムを作成させる。

(4) 電磁気学のコンテンツは拡散方程式の数値計算法の発展講義という形で行った。拡散方程式の定常解がラプラス方程式の解になることから、(非)齊次拡散方程式の定常解

を得ることで静電場ポテンシャル満たすラプラス方程式あるいはポアソン方程式の解を得ることができる。

従来の物理における静電場の講義ではポテンシャルのグラフは教科書に載っているのを見せるか厳密解をグラフ表示する程度だが、実際に数値解を求める作業をシャボン膜の力学を通して理解させるのが本講義目的である。

(5) 量子力学のコンテンツも、拡散方程式の数値計算法の発展講義という形で行った。差分化とオイラー法を用いて拡散方程式の数値積分を行うソルバーを、毎回L2ノルムで解を規格化するように改造することで、井戸型ポテンシャルをもつ時間に依存しないシュレディンガー方程式の基底状態の固有値と固有ベクトルが求められることを示した。

(3)(4)(5)

偏微分方程式という少し高度な内容を扱うために、本研究の目的である物理問題の探求という「ニーズ」から出発したというより「偏微分方程式」という数学的なニーズあるいは偏微分方程式の数値解法という「シーズ」から出発した感は否めない。また、プログラミングの知識もある程度必要するところも問題ある。しかし、一見全く異なる物理分野の項目でも、偏微分方程式という観点で統一的にあつかうことができるのも計算科学の考え方を教えることができる教材である。

これらのコンテンツはWEBにて公開する予定である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 件)

[学会発表](計2件)

- (1) H. Iwasaki, "A 3D-RISM integral equation study of a hydrated alanine dipeptide", International Symposium of Computational Science (ISCS) 2016 (招待講演)(国際学会) 2016年5月27日から28日、バンドン工科大学、インドネシア
- (2) H. Iwasaki, Y. Mizutani and S. Miura, "String method combined with an integral equation theory of liquids for minimum free energy path in condensed phase processes", the 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2016) (国際学会) 2016年10月24日から26日、上海、中国

[図書](計 件)

〔産業財産権〕

出願状況（計 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況（計 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等
<http://csedu.s.kanazawa-u.ac.jp>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

岩崎 宏 (IWASAKI, Hiroshi)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号： 30242514

(2) 研究分担者

石井 史之 (ISHI, Fumiyuki)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号： 20432122

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

(4) 研究協力者

()