

令和 4 年 6 月 14 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K18619

研究課題名（和文）計算物質科学分野・博士イノベーションリーダーの総合育成プログラムの開発と検証

研究課題名（英文）Development of the short-term integrated program of education of materials science and human skills training

研究代表者

寺田 弥生（TERADA, Yayoi）

東北大学・金属材料研究所・准教授

研究者番号：20301814

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,800,000円

研究成果の概要（和文）：計算物質科学（CMS）のテクニカルスキル教育とアクティブラーニングを取り入れたヒューマンスキル研修を融合したオンサイトの短期総合教育プログラムを開発・施行し、ヒューマンスキルの修得に興味が少ない層にもCMS専門性とヒューマンスキルの双方を学ぶ動機付けとして有効であることを示唆する結果を得た。また、オンラインとオンサイトの双方で、参加者体験型の実習の有効性が高い結果を得た。しかし、オンラインセミナーでは、参加者は場所や所属によらず参加しやすいが、若干難しいと感じ積極的な参加が減る傾向が見られた。また、CMS博士研究者数の経年変化を推定し、CMS研究者の更なる育成が望まれていることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年の日本の博士号取得者には産官学の様々なセクターでの活躍が期待されており、テクニカルスキル（研究力）のみならず複雑な課題をチームで解決するための高度なヒューマンスキルの双方が求められている。本研究では、計算物質科学分野をターゲットに、2つのスキルを修得するための短期融合教育プログラムを開発し有効性を検証することで、多様な研究や開発の現場等で若手研究者が次世代のグループリーダーとして、様々な分野や背景の人々とのチームで複雑な研究開発の課題に取り組める人材となるような育成支援の一手法を提案した。

研究成果の概要（英文）： We developed and implemented the on-site short-term integrated program of education of computational materials science (CMS) and human skills training. The results suggest that the program is effective in motivating DC students and young researchers who are less interested in acquiring human skills and learning both CMS expertise and human skills. In addition, both the online and onsite seminars showed high effectiveness in providing hands-on participant experience. However, participants tended to find the online seminars slightly more difficult and less actively participate, although they were participate the seminar easier regardless of their location or affiliation.

We also estimated the change in the number of CMS researchers with PhD and found that further fostering CMS researchers is desirable.

研究分野：計算物質科学教育

キーワード：計算物質科学分野高等教育 博士人材 計算科学教育とヒューマンスキル育成の融合 イノベーション創出人材育成

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

近年の材料開発の現場では、産官学を問わず、(1) 高度な研究領域、分野の専門的な能力のみならず、材料科学、物性科学、分子科学、材料デザイン学などの複数の領域からなる広範な物質科学分野の知識や興味、学際的な・複合的な課題の問題解決能力などのテクニカルスキル、(2) 新たなイノベーションを生み出すための、基礎研究から応用研究、実用化までの階層を超える発想や能力、多様な学問領域と分野の研究者、技術者とコミュニケーション可能な専門性に裏付けられた高いヒューマンスキルなど(1)と(2)を兼ね備えた能力(以下、ビジネス・リサーチャー・スキルと称する)を有する研究者・技術者が求められている。特に、物質科学分野では、実験領域に踏み込めるテクニカルスキルとヒューマンスキルの双方を兼ね備えた計算物質科学者の育成が望まれる。これは、物質科学の研究分野においても材料開発の現場においても、実験研究者の占める割合は大きく、実材料開発に実験が欠かせないが、昨今、材料に関わるビッグデータの利用やスーパーコンピュータを用いた新材料や材料物性の予測などにより実験の事前スクリーニングなどを行い、より低エネルギー、短期間、低コストでの材料開発をする取り組みが国家レベルのプロジェクトで推進されており、計算物質科学を理解した研究者・技術者のニーズは高まっているためである。すなわち、新たなタイプの計算物質科学と実験計算物質科学をつなぐことができる研究者・技術者が望まれている。あわせて、その計算を理解できる実験物質科学者、データ科学も取り入れた計算物質科学分野、データ物質科学、実験物質科学分野の三つをつなぐ知識や能力を持つ物質科学の育成も望まれている。

しかしながら、昨今の研究では専門性が高度に細分化されており、実験物質科学研究者と計算物質科学研究者の間においても、相互の研究、背景を理解した上で議論するためのコミュニケーションスキルも必要である。現在、学際領域の研究や実験と計算を融合した研究などが多く推進されているが、未だ各領域の学生が複数の他領域の実験や計算を総合的に学ぶ機会は少なく、領域が異なる博士人材同士が研究の議論を行い他の専門領域や階層への理解や興味、意欲を増す機会はほとんどない。

それ故、本研究課題の代表者がコーディネーターを担当している計算物質科学人材育成コンソーシアム(略称:PCoMS。2015年8月に「文部科学省 科学技術人材育成費補助事業 国立研究開発法人科学技術振興機構『科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)』」の採択を受け、設立。東北大学金属材料研究所(代表)、東京大学物性研究所、分子科学研究所、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター[2022年4月より、エマージングサイエンスデザイン R³センターに名称変更]が実施機関の計算物質科学分野の博士人材育成と若手教員育成が目的のコンソーシアム)にて、計算物質科学分野の「ビジネス・リサーチャー・スキル」を持つ博士人材のための新たな総合育成プログラムの開発を進めている。

2. 研究の目的

本研究課題では、特に、計算物質科学分野に加えて計算物質科学分野と実験物質科学をつなぐ新たなタイプの「ビジネス・リサーチャー・スキル」を持つ博士人材のためのオンサイトの短期総合育成プログラムの開発・検証の実証的研究を行うことを目指した。中でも、博士人材自らが新たなタイプの研究者・技術者となるための動機づけを促すため、基礎から応用までの広範な専門性の高い座学・実習などの研究専門性養成プログラムに、研究分野の専門性を取り入れたアクティブラーニング型のヒューマンスキルアップ研修を組み合わせた短期集中セミナーを核とするオンサイトの総合育成プログラムを開発し、アカデミア以外への志向が低い博士人材も取り込む物質科学分野の博士イノベーションリーダー養成のための新たな短期総合育成プログラムの有効性の検証を目指した。

3. 研究の方法

3-1) 基礎から応用までの広範な専門性の高い座学・実習などの研究専門性養成プログラムに、研究分野の専門性を取り入れたヒューマンスキルアップ研修を組み合わせた短期集中セミナーを核とする総合育成プログラムを開発し、その有効性を検証した。なお、開発したプログラムの試行及び検証では、PCoMSの協力を得て、PCoMS 合宿セミナーとして実施した。このセミナーは、2泊3日の合宿形式で、1) 年度ごとに設定したテーマに関する外部の専門講師による講演、2) コンピュータ実習付き講演、3) グループ課題実習、4) ヒューマンスキル研修で構成した(表1: 2019年度 PCoMS 合宿セミナー-プログラム概要)。

2018年、2019年度に実施した PCoMS 合宿セミナーのテーマと参加者数(*一般参加者、講師、運営側参加者などの数を含む)は以下の通りであった。

・2018年度
「計算材料科学と実験材料科学をつなぐ マテリアルズ・インフォマティクス」

24名(内訳: 学部生1名、MC2名、DC10名、助教1名、企業2名、助教以外の教員8名)

・2019年度
「材料開発現場の課題を考えよう(鉄鋼材料のミクロ組織の制御と計算物質科学)」

- “Control of microstructure in steel” and “computational materials science” -

23名(内訳: MC1名、DC 8名、PD4名、助教3名、企業1名、助教以外の教員6名)

3-2)2020年度以降、コロナ禍による感染症対策実施でオンサイトのセミナー実施が困難となったため、総合教育プログラムの個別要素となる計算物質科学のテクニカルスキルや、ヒューマンスキル等の座学のセミナーやコンピュータ実習付きのセミナーをオンラインで実施し、それぞれの有効性や課題を検証した。

また、2019年度以前に、研究代表者らが実施したオンサイト、オンライン、ハイブリッドの各種のセミナーとの比較によって、育成プログラムに必要な個別要素についても有効性や課題の検証を実施した。

3-3)本研究課題の研究の過程で、開発教育プログラムの対象となる計算物質科学分野の研究者数の経年変化の定量的な解析は行われていないことが分かった。そのため、本研究では、日本国内の計算物質科学分野の博士号取得者数の経年変化の推定および解析を行った。

博士号取得者数は、テキストデータマイニングの手法を用いて論文題目における計算物質科学や理論に関する出現頻度等の解析を行うことで推定した。なお、日本国内については、国立情報学研究所が作成した国内の博士論文のデータベース CiNii Dissertations (URL: <https://ci.nii.ac.jp/d/>) のデータを基に理工系の博士後期課程を有する大学の過去約50年間の理工系博士論文約15万報を解析した。比較のため、米国やヨーロッパの幾つかの研究中心大学で公開されている博士論文のデータ約1万件についても、博士論文の論文題目の解析を行った。同時に、人数推移の要因となった高等教育の背景や社会的な要因等に関する考察を行った。

4. 研究成果

4-1) オンサイトの短期総合セミナーの開発と有効性の検証

2泊3日の合宿セミナーの試行プログラムでは、参加者が、計算物質科学分野の研究者による講演やコンピュータ実習付き講演、実験研究者や企業研究者による講演等を聴講し、基礎・応用・実用化に関わる計算物質科学の専門知識を深めることができるようにプログラムを構成した。同時に、セミナーの約半分の時間を費やして、研究代表者がファシリテーターを務めるグループ課題実習を実施した。グループ課題実習では、数名のグループごとに、その年に設定されたテーマで研究を開始するという想定で討論を行い、最終日に研究課題の提案発表を求めた。セミナーのプログラム内で、グループ課題の遂行に必要なヒューマンスキル、例えば、チーム形成、ブレインストーミング、プレゼンテーションに関する研修を実施することで、参加者が必要なヒューマンスキルを習得できるようにした。特に、参加者が、研究分野や主たる研究手法、学年や職位が異なる他の参加者と専門的な討論を行い研究課題の提案をまとめることで企業などにおける

表1. 2019年度 PCoMS 合宿セミナー-プログラム概要
(*外国人参加者が多数のため英語で実施)

Day 1	
1.5h	Plenary Lecture 【categories-A&B&C】
1.5h	Lecture & Computer practical training [1] 【categories-A&B】
1.5h	Lecture & Computer practical training [2] 【categories-A&B】
1.0h	Communication & presentation skill up training, Introduction of group discussion 【categories-A&C】
Day 2	
1.5h	Group discussion [1] 【categories-A&C】
1.5h	Lecture [1] 【categories-A&B】
1.5h	Communication & presentation skill up training 【categories-A&C】
1.5h	Group discussion [2] 【categories-A&C】
2.0h	Group discussion [3] 【categories-A&C】
Day 3	
1.5h	Group discussion [4] 【categories-A&C】
1.5h	Lecture [2] 【category-A】
1.5h	Group discussion [5] 【categories-A&C】
1.0h	Presentation of the group research proposal & discussion 【categories-A&C】

なお、上記の Categories(A), (B), (C)は

(A)計算物質科学の幅広い素養

(B)ハイパフォーマンスコンピューティング技術

(C)ビジネス・リサーチャー・スキル

チームでの研究活動の模擬体験の機会を得ることができるようにプログラムを工夫した。

各セミナーの後に、ウェブでのアンケートを行った。その結果、専門性の高い講演への興味から参加した、ヒューマンスキル修得の意識が低かった参加者が、研修によりヒューマンスキルの重要性を認識したとのアンケート回答などを得ており、本研究課題で開発を進めたオンサイトの短期融合プログラムが、ヒューマンスキルの修得に興味が少ない層にも、専門性とヒューマンスキルの双方を学ぶ動機付けとして有効であることを示唆する結果を得た。

その他の主要な解析結果として、座学の講義では講義レベルが適当でないと感じた参加者の満足度が下がるが、アクティブラーニングを取り入れたグループ課題実習ではレベルが難しいと感じても参加者の満足度が比較的高いことが明らかとなっており、計算物質科学分野の教育においてもアクティブラーニングのような参加者体験型の教育が有効であることを示唆する結果を得た。さらに、講師と参加者が十分に議論などを行えない場合、講師が十分に内容を伝えられたという実感と、実際に参加者が講義内容に満足したかが一致しなくなる結果を得た。これらの結果は、本研究課題で開発する教育目的のセミナーでは参加者の主体的な行動をいかに促すかが重要であることを示唆すると考えられる。

4 - 2) オンサイトセミナーとオンラインセミナーの有効性の検証

研究代表者が関わったセミナーの事後アンケートの解析では、コロナ禍以前のオンサイト・オンライン・ハイブリッドのセミナーと比べ、2020 年度以降に実施した各種のオンラインセミナーでは参加者の所属機関や所在地に広がりが見られた。加えて、企業参加者の比率が増加する傾向にあった。産学を超えた幅広い層への教育目的のセミナー（座学）において、参加者の所属や居場所に依存しないオンライン実施の有用性が示唆される結果を得た。

その一方で、オンサイト実施とオンライン実施の開催形式によるセミナーの有効性の差は小さいが、オンラインセミナーにおける参加者の感じた興味レベルと満足度の平均が若干低くなる結果を得た。加えて、参加者が感じた講義と実習の平均レベルは若干高くなり、オンラインの実習レベルのみ 5 段階評価での 5（難しい）の回答があったことから、オンラインセミナーの有効性がオンサイトセミナーに比べ若干低いことが示唆される。また、オンラインセミナーでは、事前登録者の当日参加率の低下や質問数の減少などの参加しやすさゆえの積極的な参加の減少、講師や進行による参加者の参加状況（理解度の把握）等に課題があるケースがあった。それ故、実習形式のセミナーのオンライン実施のためには、プログラム、教材及びファシリテーション手法等の開発・改善が必要と考えられる。

また、事後アンケートでは、オンサイトの希望も一定数あり、今後、オンサイトやハイブリッド実施により参加形式の選択肢を広げる必要がある。

しかし、オンサイトとオンラインの双方でほぼ同様の、コンピュータ実習パートと、その理論的背景や使い方の座学パートで構成されるプログラムで実施したソフトウェア講習会の事後アンケートの解析では、オンサイトとオンラインのいずれも、座学パートに比べコンピュータ実習パートにおける参加者の感じた興味レベルの平均が高かった。加えて、実習パートでは、難しいと感じた参加者が感じた興味レベルや満足度の平均もオンサイト、オンライン双方で比較的高かった。このように、オンサイトとオンラインの双方のコンピュータ実習でも実習の有効性が示唆される結果を得たことで、オンラインでも参加者体験型の実習の有効性は変わらないと考えられる。

4 - 3)

1965 年頃から 2016 年頃までの国内国立大学の理工系博士号取得者数と計算物質科学分野の博士号取得者数の経年変化を図 1 に示す。1990 年代の大学院改革等を受けて急増した理工系博士号取得者数（黒点線）は 2004 年をピークに近年の少子化の影響を受けその後大幅に減少する。一方、計算物質科学分野の博士号取得者数（黒実線）は 2010 年まで継続して増加しその後の減少率も小さい。その結果、理工系博士号取得者数に対する計算物質科学分野の博士号取得者数の割合（赤線）は増加傾向を続けている。なお、2016 年以降も、理学・工学博士に対する計算物質科学分野の博士号取得者数の比率は増加している。また、1985 年以前、理学系博士号取得者数と工学系博士号取得者数はほぼ同数であったが、その後、大学院改革の影響等で工学系博士号取得者数は倍増したが、計算物質科学分野では、2000 年頃まで理学系博士号取得者数と工学系博士号取得者数はほぼ同数のまま増加傾向であった。さらに、その後、工学系博士号取得者数がより多く増加している。それ故、計算物質科学分野の基礎研究だけでなく、応用・実用研究の需要も高まりつつあり、計算物質科学分野の研究者の育成のさらなる育成が必要であることが示唆される。

また、文部科学省の国立大学法人等の第 3 期中期目標期間における国立大学法人運営費交付金の重点支援の 3 類型に従って、国立大学を (1)主に、人材育成や地域課題の解決などに重点を

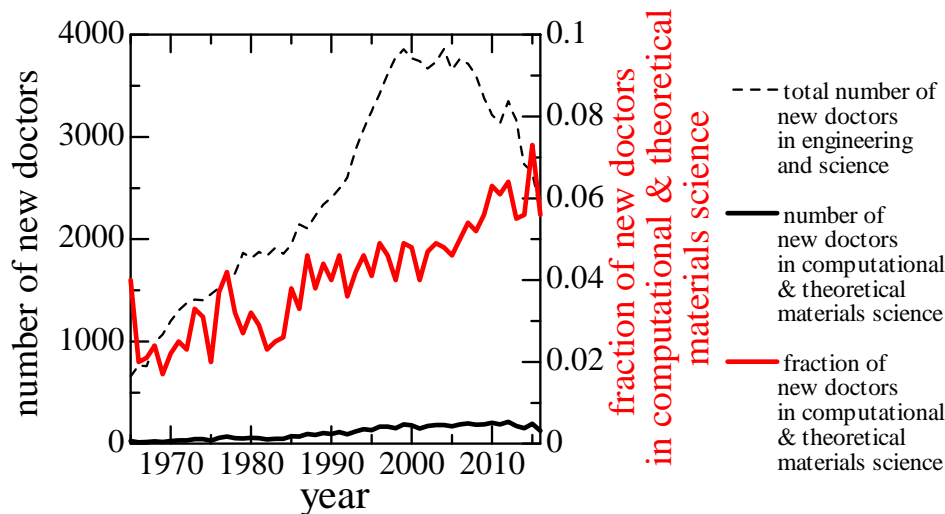


図1 . 理工系の博士後期課程を有する大学の内 30 大学 (24 国立大学、6 私立大学) の理工系博士号取得者数と計算物質科学分野 (計算及び理論物質科学) の博士号取得者数の経年変化 (「日本の過去 50 年の計算物質科学分野の博士号取得者数の経年変化とその教育的・社会的要因に関する考察」, 寺田 弥生、毛利 哲夫, 日本金属学会 2019 年春期講演大会 予稿集 [2019 年 3 月 19 日発表] より転載。)

置く大学 (55 地方教育センター大学) (2) 主に、特色のある分野での世界・全国的な教育研究の取組に重点を置く大学 (15 特色教育センター大学) (3) 主に、全学的に世界で卓越した教育研究、社会実装を推進する取組に重点を置く大学 (16 研究センター大学) の 3 つの大学群について比較を行った結果、(1) 日本の理工系博士号取得者総数に対する計算物質科学分野の博士号取得者数の比率は、過去 50 年間、研究センター大学では継続して増加しているが未だ 10% 未満であること、1990 年代の大学改革 (大学院重点化) 以降に博士号取得者の育成を開始した地方教育センター大学では 5 - 6% 程度でほぼ一定であること、(2) アメリカの研究センター大学では計算物質科学分野の博士号取得者の人数比率は日本より多く 10% 以上であるが 50 年間ほぼ一定であること、(3) アメリカと日本では計算物質科学分野の博士号取得者の人数比率に違いがあるだけで無く、アメリカの研究センター大学で理論的研究の比率が最も高く、次いで、日本の研究センター大学、日本の地方教育センター大学の順で比率が減少し、逆に後者においてはシミュレーションによる研究の比率が増加しており、各大学群によって育成方針が異なる可能性があることや、日本の大学、特に地方教育センター大学における計算物質科学の教育リソースの不足等を示唆する結果を得た。

加えて、1991 年の文部科学省の学位規則改正に伴う博士号の専門分野の多様化に伴い、博士号に付記する分野が多様化しているが、新しい専門分野である情報科学等の博士号取得者数は未だ理学・工学博士号取得者数に比べると非常に少ないものの、情報科学の博士号取得者数に対する計算物質科学分野の博士号取得者数の割合は理学・工学の博士号取得者数に対する比率より大きいことが明らかになった。それ故、計算物質科学分野の研究者の育成は、伝統的な理学・工学分野のみならず理工系の新たな専門分野でも求められており、今後ますます必要性が高まることが示唆される。

以上の通り、本研究では、オンサイトの短期総合融合教育プログラムを開発し試行することで、その有効性を検証した。計算物質科学の専門講義に加え、グループ実習で専門性の高い課題を設定し、ヒューマンスキル研修を一体化することで、将来の就職先としてアカデミア以外への志向が低くヒューマンスキル研修の動機付けが弱い博士人材等にも、テクニカルスキルとヒューマンスキルの双方を学ぶ動機づけを行うことが可能であることを示唆する結果を得た。

コロナ禍によって、オンサイトの短期総合融合教育プログラムの試行は研究期間の後半に出来なかったが、オンラインでのテクニカルスキルやヒューマンスキル修得のための個別要素のセミナーの試行と実施結果の解析を行った。その結果、参加者体験型の実習の有効性はオンラインでも変わらない結果を得た。オンラインセミナーは、参加者の場所や所属によらない参加のしやすさから教育効果が大きいと考えられる。その一方で、オンラインセミナーの参加者は、オンサイトに比べ講義や演習を若干難しいと感じる傾向があり、積極的な参加も減る傾向にあった。

また、これまでに行われていなかった計算物質科学分野の博士研究者数の推定方法を開発し、計算物質科学分野の研究者のさらなる育成が望まれていることを明らかにした。

今後は、オンサイト、オンライン、ハイブリッド、それぞれの特徴を生かしたテクニカルスキルとヒューマンスキルの総合教育プログラムの開発が望まれる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計12件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件）

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 日本の計算物質科学の博士号取得者数の近年の推移に対する考察 博士号の専攻分野の多様性と計算物質科学分野の博士号取得者
3. 学会等名 日本金属学会 2020年秋期（第167回）大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 計算物質科学の博士号取得者数の近年の推移 国内大学および海外大学の比較：カルフォルニア工科大学の事例を中心に
3. 学会等名 日本金属学会 2021年春期（第168回）講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Changes in the Number of Doctoral Degree Holders in Computational Materials Science in Japan -Recent Diversity of Research Fields-
3. 学会等名 APS March Meeting 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 1990年代以降の日本の計算物質科学分野の博士号取得者の推移 - テキストデータマイニング手法に基づいた解析 -
3. 学会等名 日本金属学会 2019年秋期（第165回）大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 過去50年間の国内の計算物質科学分野の博士号取得者数の推移
3. 学会等名 PCoMSシンポジウム & 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寺田 弥生, 川勝 年洋, 毛利 哲夫
2. 発表標題 PCoMS合宿セミナー実施報告
3. 学会等名 PCoMSシンポジウム & 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Trend of Human Resource Development in Doctorate Holders in Computational Materials Science in Japan
3. 学会等名 SMS2019 & GIMRT User Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Changes in the Number of Doctoral Degree Holders in Computational Materials Science in Japan During the Last 50 years -Text Data Mining Analysis on the Difference between Research Universities and Education-Oriented Universities
3. 学会等名 2019 MRS Fall Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Text data mining analysis on changes in the number of doctoral degree holders in computational materials science in Japan during the last 50 years
3. 学会等名 TMS 2020 Annual Meeting & Exhibition (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 日本の計算物質科学とマテリアルズ インフォマティクスの博士号取得者数の近年の推移に対する考察
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yayoi Terada, Tetsuo Mohri
2. 発表標題 Integration of “specialized educational science lectures” and “training of human skills and transferable skills” in computational materials science - Case of Professional development Consortium for Computational Materials Scientists-
3. 学会等名 Summit of Materials Science 2018: SMS2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 寺田 弥生, 毛利 哲夫
2. 発表標題 日本の過去50年の計算物質科学分野の博士号取得者数の経年変化とその教育的・社会的要因に関する考察
3. 学会等名 日本金属学会 2019年春期講演大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------