

物質工学(化学)分野の内容とリンクした情報処理教育の効果

城石 英伸*¹, 工藤 節子¹, 小島 洋一郎²

¹東京工業高等専門学校 物質工学科, ²苫小牧工業高等専門学校 理系総合学科

*h-shiroishi@tokyo-ct.ac.jp

Effect of Information Processing Linked with Content of Chemical Science and Engineering Field

Hidenobu SHIROISHI¹, Setsuko KUDO¹, Yoichiro KOJIMA²

¹Departments of Chemical Science and Engineering, Tokyo National College of Technology (Kunugida 1220-2, Hachioji city, Tokyo, 193-0997, Japan)

²Department of Natural and Physical Science, Tomakomai National College of Technology

(Received May 9, 2009; Accepted June 3, 2009)

We conducted an opinion poll about computers and programming languages with the 4th year students of the Department of Chemical Science and Engineering at Tokyo National College of Technology. Based on the results, we renewed for them the contents of Information Processing II class. Prior to the renewal, even after the original class, students viewed the programming language as useless information. They felt the programming language was difficult and inconvenient, and they were unaware of its use in the analysis of experimental results. We therefore introduced to the class Maxima and Visual Basic for Applications in an effort to lower the programming difficulty. We also adopted examples related to chemistry and chemical engineering to improve recognition of the programming languages.

Keywords: Information processing for Chemical Science and Engineering, Maxima, Visual Basic for Applications

1. はじめに

高専から、企業・大学の期待とニーズに応えられる優秀な学生が輩出するには、従来の基本的な知識や技術に関する教育に加え、時代の要請や学生に及ぼす社会的変化の影響等を分析し、授業（内容、進め方）を見直すことが重要である。最近のコンピュータの普及には目覚ましいものがある一方で、高専の物質工学科に入学した学生は、どちらかといえばコンピュータを不得手とする傾向がみられる。しかしながら、物質工学分野においても情報収集から分析、論文や報告書作成に至るまで、コンピュータを用いて情報を処理する知識は今や必須のものである。

東京高専の物質工学科では、従来から、一般的なアプリケーション群(ブラウザー, ワードプロセッサ, 表計算, プレゼンテーションなど)は実験レポートの

作成などを通して、学生に習得させてきた。ところが、表計算ソフトについては、卒業研究配属時点において必要十分という知識まで到達していない学生が数多くいる。例えば、絶対参照と相対参照がわからない、第2軸を含むグラフを描く方法を習得していない等である。特に絶対参照と相対参照がわからないと計算ミスをする可能性が大きく、深刻な問題である。ましてやコンピュータ言語ということになると拒絶反応を示す学生や、必要性が見いだせず編入試験にも出ないため、やる気が起きないという意見を言う学生もいた。

本研究では、まず、学生達のコンピュータやプログラミング言語に対する印象を、アンケートを通して分析し、学生のコンピュータ言語に対する認識及び実力を改善するために授業内容を刷新し、従来 C

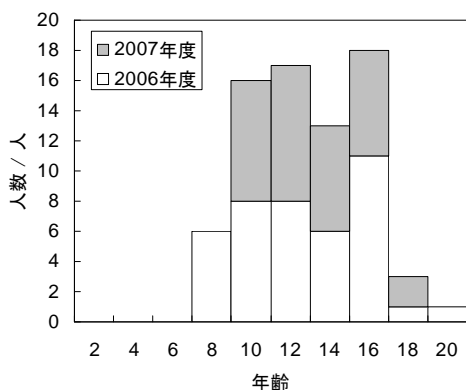


Fig. 1 パソコンを使い始めた年齢

言語であったものを Maxima および Visual Basic for Application にすることにより、プログラミングに対する敷居を下げるとともに、文献[1-4]を参考に物質工学(化学)に関連する例題を数多く導入した。また、刷新後の授業を受講した学生に対して同様のアンケートを行い、その効果を検証した。

2. コンピュータやプログラミング言語に対する物質工学科の学生の認識

改訂前の授業内容(Table 1)を学習した 2006 年度 4 年次および、刷新した授業内容(Table 2-4)を受講した 2007 年度 4 年次に対して、以下のようなアンケートを行った。

〔設問 1〕 パソコンを使い始めた年齢は？

〔設問 2〕 自分専用のパソコンがあるか？

〔設問 3〕 パソコンに対するイメージは？

〔設問 4〕 プログラミング言語に持っているイメージは？

〔設問 5〕 物質工学科(専攻)ではプログラミング言語の能力は重要であると思うか？

〔設問 6〕 情報系科目を受講して、プログラミング言語に興味を持てた。

〔設問 7〕 教わったプログラミング言語でどの程度プログラムを作っているか？

〔設問 8〕 プログラミング言語は、物質・材料系の分野に就職する場合、就職後役に立つと思うか？

〔設問 9〕 プログラミングしなくても、実験などのデータは処理できると思うか

〔設問 10〕 プログラミング言語が、実験データの整理などの役に立つと思うか？

〔設問 11〕 数学や化学の内容とプログラムを組み

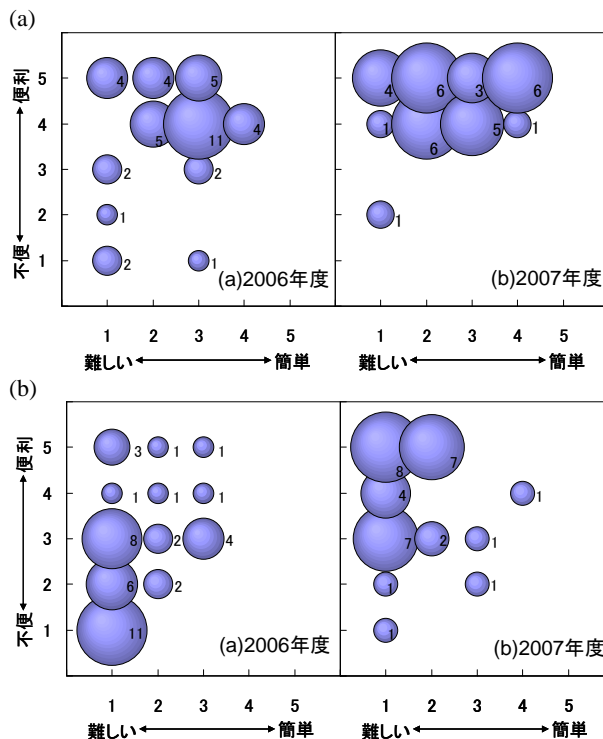


Fig. 2 (a) パソコンに対する学生のイメージ (b) プログラムに対する学生のイメージ。数値は人数。

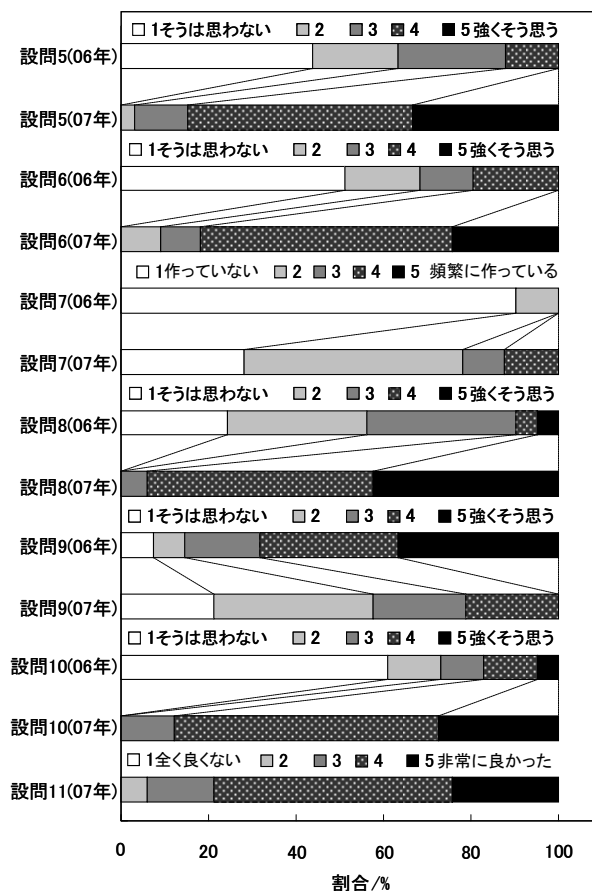


Fig. 3 設問 5 から設問 9 のアンケートの結果。いずれも数字が大きいほど設問に対して肯定的な回答である。

Table 1 改訂前の授業内容

- 1.1 ユーザーアカウントの取り扱い
- 1.2 UNIX の基礎
- 1.3 エディタ, コンパイラ
- 2.1 変数の型
- 2.2 四則演算
- 2.3 標準入出力
- 2.4 繰り返し
- 2.5 条件判断, フローチャート
- 2.6 数学関数
- 3.1 配列
- 3.2 ポインター
- 3.3 関数

合わせて学習するようにしたが、これについてどう思うか?(2007年度のみ)

まず、パソコンを使い始めた年齢についてであるが、小学生から始めた学生が全体の52%と過半数を占めた(Fig. 1)。

また、自分専用のパソコンがあるかという問いに対しては、約85%(2006年度80%, 2007年度約91%)の学生がある、と答え、物質工学科の学生の間でも、パソコンの普及が進んでいることが明らかとなった。

また、パソコンに対するイメージは?という問いに対しての回答を Fig. 2(a)に示す。簡単で便利であると回答した学生は4%(2006年度)および21%(2007年度)にとどまり、便利であるが難しいと回答した学生は34%(2006年度)および54%(2007年度)に上った。

授業内容刷新によって効果が現れたのが、Fig. 2(b)に示すプログラムに対する学生のイメージである。刷新前は、パソコンに対するイメージとは異なり、難しく不便であると考えている学生が全体の46%を占めていたのに対し、刷新後は6%に減少し、代わりに難しく便利というイメージを持つ学生が全体の57%となった。

Fig. 3に、設問5から設問11のアンケート結果を示す。プログラミング言語の能力はどの程度重要かという問い(設問5)に対しては約63%が重要ではないと答えていたが、改訂後は3%に激減した。情報系科目を受講して、プログラミング言語に興味を持ったかという問い(設問6)に対しては、興味を持ったと回答したのはわずか20%であったが、改訂後は82%と大幅に改善し、学生のモチベーションを上げることができた。

プログラミング言語が就職後役立つかという問い

Table 2 物質工学分野(化学)の内容とリンクしたMaxima学習

1. Maxima のインストール
2. Maxima の起動
3. 簡単な計算
4. Maxima における変数と関数
 - ・濃度計算関数の作成
 - ・質量%濃度を mol 濃度に変換する関数
 - ・波長, 波数, 電子ボルトを変換する関数
5. リスト・ベクトル・行列
6. Maxima でグラフを描く
7. 数式の展開
8. 方程式
 - ・混合溶液の吸光度から各物質の濃度の算出
 - ・一塩基酸 HA 水溶液の pH を求める
9. 微分・積分
 - ・連立微分方程式による逐次化学反応速度解析

(設問8)に対して、役立つと答えた学生は10%弱であったが、改訂後は、94%が役立つと答え、Fig. 2(b)の結果と併せて考えると、難しいと感じてはいるものの役立つことを学習していると実感させることに成功した。

改訂前の学生の認識をまとめると、プログラミングは、実験データの整理の際は使う必要が無く、不要と考える学生が7割近くにのぼり(設問9)、C言語を学習した大部分の学生がプログラミング言語に対して不便で役に立たず、必要ないものと認識していることが明らかとなった。一方、改訂後では、学生の意識をほぼ逆転させることに成功した。

授業内容改訂後には、化学や数学の内容とリンクさせてプログラミングを学習させたが、これについての学生の評価は79%が好意的であった(設問11)。

上述の結果から授業内容を刷新することによって、物質工学系学生のプログラミング言語に対する認識を劇的に改善できることが示された。

3. 物質工学(化学)分野の内容とリンクさせた情報処理教育

授業内容刷新前のようなネガティブな認識を持たせないようにするためには、まず、プログラミングに対する敷居を低くすること及び化学や数学などの物質工学分野の内容とリンクさせ、プログラミングが役に立つという認識を持たせることが重要であると考えた。

そこで、まずプログラミングの敷居を低くするために、無料で入手可能な数式処理言語である Maxima

07/10/17
情報処理 II(埼玉)

8. 方程式

方程式の代数解

Maxima を使えば、方程式、連立方程式、微分方程式も代数的に解くことができる。もし、代数的に解くことができなくても、パッケージを使うことによって数値解を出すことができる。

```

一元方程式を解く
(方法) solve(方程式, 解かせる変数);
<例>
(入力) solve(x^4-2*x^3+10*x-25=0, x);
(出力) [x = -sqrt(5), x = sqrt(5), x = 1-2*%i, x = 2*%i + 1]
一元方程式を解く(数値解がほしい場合)
(方法) expand(float(solve(方程式, 解かせる変数)));
<例>
(入力) expand(float(solve(x^4-2*x^3+10*x-25=0, x)));
      [x = 2.23606797749779, x = 2.23606797749779, x = 1.0 - 2.0
(出力) [x = 2.0 %i + 1.0 ]

連立方程式を解く
(方法) solve([方程式1, 方程式2, ...], [変数1, 変数2, ...]);
<例>
(入力) solve([3*x+4*y=4, 6*x-3*y=30], [x, y]);
(出力) [(x = 4, y = -2)]
    
```

(練習) 物質 A, 物質 B 及び物質 C の混合溶液がある。それぞれのモル吸光係数は
 物質 A: $\epsilon_{A,450nm}=4000M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{A,550nm}=339M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{A,600nm}=15M^{-1}cm^{-1}$
 物質 B: $\epsilon_{B,450nm}=676.7M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{B,550nm}=5000M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{B,600nm}=3033M^{-1}cm^{-1}$
 物質 C: $\epsilon_{C,450nm}=6.62M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{C,550nm}=5520M^{-1}cm^{-1}$, $\epsilon_{C,600nm}=7500M^{-1}cm^{-1}$
 である。この混合溶液の吸光度を測定したところ、
 $A_{450nm} = 0.4342$, $A_{550nm} = 0.4898$, $A_{600nm} = 0.6031$ であった(右図)。物質 A, B, C のそれぞれの濃度を求めよ。

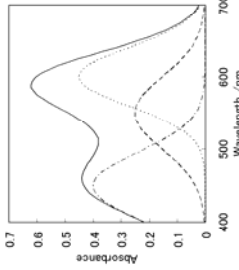


図 物質 A, B, C の混合溶液のスペクトル

07/10/17
情報処理 II(埼玉)

方程式の近似解

solve では解けない非線形方程式の場合、ニュートン法を用いて数値的に解を近似することができる。

```

ニュートン法を用いて近似解を得る
(方法)
load(newton);
newton(0 点を求める関数, 探索開始値);
<例>
(入力) load(newton);
      newton(x^4-2*x^3+10*x-25, 2);
(出力) 2.2360679775003040
    
```

(練習) $f(x) = x^4 - e^x - 3 = 0$ の実根を求めよ。(探索開始値は 0 とせよ)

```

(練習) 濃度 CHA の一塩基酸 HA 水溶液の pH を求める
物質収支は: ( )
電気的中性則より ( )
酸解離定数  $K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$ 
 $K_w = [H^+][OH^-]$ 
より、
 $[H^+] + K_a C_{HA} = (K_a C_{HA} + K_w)[H^+] - K_w$  (6.2.1)
となる。酢酸の  $K_a = 1.862 \times 10^{-5} M$ 、濃度  $C_{HA} = 0.1 M$  であるとき、pH を (6.2.1) 式を解くことによっ
て求めよ。Maxima のニュートン法は精度が悪いため、(6.2.1) 式を 1000 倍して使おう。
    
```

(練習) 濃度 C_{HA} の一塩基酸 HA 水溶液の pH を求める

物質収支は: ()

電気的中性則より ()

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$$

$$K_w = [H^+][OH^-]$$

より、

$$[H^+] + K_a C_{HA} = (K_a C_{HA} + K_w)[H^+] - K_w \quad (6.2.1)$$

となる。酢酸の $K_a = 1.862 \times 10^{-5} M$ 、濃度 $C_{HA} = 0.1 M$ であるとき、pH を (6.2.1) 式を解くことによっ
 て求めよ。Maxima のニュートン法は精度が悪いため、(6.2.1) 式を 1000 倍して使おう。

Fig. 4 作成した Maxima 学習のためのテキストの一部

Table 3 物質工学分野(化学)の内容とリンクした Excel 学習

- Excel 2007 でのグラフの描き方をマスターしよう
 - 弱酸の濃度と電離度のグラフを作る
- 条件付き書式・セルの表示形式
 - 小数点の位置をあわせた表を作るには
- グラフで Y 第 2 軸(右軸)を使う
 - 電池の発電特性のグラフを作る
- 傾きと切片を算出する関数
 - 標準添加法で Ca の濃度を求める
- 行列の計算
- ゴールシーク
 - ゴールシークを使って酸・塩基滴定曲線を描く
- ソルバーを使って最適解を求める
 - 混合溶液の吸光度から各物質の濃度の算出
- 度数分布を求める関数
 - 仮想河川の鉄の濃度分布からヒストグラムを作る
- 分散と標準偏差
 - ホールピペットとマイクロピペットの精度を評価する

を学習させ、後半に Excel の Visual Basic for Applications を習得させることとした。

3.1 Maxima の授業への導入

Maxima はマサチューセッツ工科大学の Macsyma システムに起源を持ち、商用の Mathematica や Maple と比較すると機能は劣るものの、無料であるため、授業で使用するだけでなく、学生が自宅のパソコンにインストールして使用できるという利点がある。授業では、18 ページのオリジナルプリントを用意し、Table 2 に示すような Maxima の基礎から物質工学分野への応用問題までを 90 分×5 回の授業で学習させた。プリントの一部を Fig. 4 に示す。学習に使用する題材及び練習問題は物質工学分野に関する問題をできる限り出題した。例えば、関数の作成方法を学習する時には、

[問題例] 重量%濃度($w\%$)からモル濃度を算出する関数 $WeighttoMolconc$ をつくり、次の重量%濃度をモル濃度に換算せよ。密度($d\text{ gcm}^{-3}$)とモル質量($M\text{ gmol}^{-1}$)を使う。

- 60%硝酸($M = 63.0$)溶液(密度は 1.38 gcm^{-3} として計算すること)
- 36%塩酸($M = 36.5$)溶液(密度は 1.18 gcm^{-3} として計算すること)

といった問題を出題した。また、コンピュータ言語

Table 4 物質工学分野(化学)の内容とリンクした Visual Basic for Applications の学習

- プログラミングをマスターしよう
 - コンピュータ言語の種類
 - プログラムを使うと何が便利なのか?
- 変数とは
- 関数とは ~ Excel のワークシート上で使える関数を作ろう
 - 分子量と濃度(M), 体積(L)を与えると試薬に必要な重量を計算する
 - モル濃度を重量%濃度に変換する関数を作る
- 制御文
- プロシージャの呼び出しと値の受け渡し
 - クリスマスにちなんで星を描こう
 - 様々な図形を VBA で操るには?
- オブジェクトとは?
 - 混合溶液のイオン強度を求める関数を作る
 - 最小二乗法で原点を通る直線の傾きを求める関数を作る
 - 台形積分をする関数を作る
- 文字列操作をマスターしよう
- ファイル入出力
 - 羊が 1 匹から 60000 匹までを出力するには
 - ファイルから読み込んで Excel のワークシートに出力するには?
 - 間引いて Excel のワークシートに出力するには?
- Windows のクリップボードを操ろう
 - ワークシートの選択範囲をクリップボードに CSV 形式で出力させよう
- Excel アドインを作ろう
- VBA でシミュレーションをしよう
 - 酸の電離度のシミュレーション
 - モンテカルロ法による円周率の計算
- ユーザーフォームを使おう
 - じゃんけんゲームを作る
- 参照渡しと値渡し
 - swap 関数を作る
- 関数の再帰呼び出し
 - 階乗の計算をする関数を作る
- Excel でオリジナルメニューを作るには?
- VBA でデータを処理しよう
 - Lagrange の補間法~静的配列と動的配列
 - 平滑化~単純移動平均法
 - ピーク検出法
- (番外編)Word でも VBA マクロ
 - 赤い文字と白い文字を入れ替える

は得意な学生と苦手な学生の格差が大きいため、配布したプリントには説明や手順を詳しく書き込んでおき、個々人の進度に合わせて学習できるようにした。

3.1 Excel の使い方(中級編)

Maxima の学習の後で、90 分×2 回分の授業で、

2007年度 情報処理 II (城石)

原点を通る直線での最小二乗法

$y=ax+b$ の回帰直線の a と b を出すには、Slope と Intercept 関数を使えばよいことは学んだと思うが、極直線などでよく使う $y=ax$ の場合は実装されていないようである。作ってみよう。

(アルゴリズム)最小二乗法とは?

右図の5点を最もよく表す原点を通る直線の傾きはいくつだろうか?

実験点と直線から求めた(予測された)直線の距離を残差という。例えば右図で3番目の実験点 (x_3, y_3) と直線から求めた (x_3, y_3') の距離 (d_3) 、残差)は $y_3' - y_3$ である。

最小二乗法では、「もつともよく表す」というのは、各点における残差の二乗和が最も小さくなるようにすることである。

残差の二乗和を S とすると $y_i=ax_i$ と表せるので

$$S = \sum_{i=1}^n d_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i)^2$$

この式を展開すると、

$$S = \sum_{i=1}^n y_i^2 + 2a \sum_{i=1}^n x_i y_i + a^2 \sum_{i=1}^n x_i^2$$

$$A = \sum_{i=1}^n y_i^2, \quad B = \sum_{i=1}^n x_i y_i, \quad C = \sum_{i=1}^n x_i^2 \text{ とおくと}$$

$$S = A - 2aB + a^2C$$

最小値を求めるために a で微分して0とおくと

$$\begin{aligned} & \left(\right) \\ & \left(\right) \end{aligned}$$

(問) 上記アルゴリズムに基づいて、行方向に並べられたデータ範囲を Get し、 $y=ax$ で直線近似し、傾きを返す関数 Slope2(y 範囲, x 範囲) を途中から作ってみよう。

```
Public Function Slope2(yrange As Range, xrange As Range) As Double
    Dim i As Long
    Dim x As Double
    Dim y As Double
    Dim Sumx2 As Double
    Dim Sumxy As Double
    Dim a1 As Double
    Sumx2 = 0: Sumxy = 0
    n = xrange.Rows.Count
    For i = 1 To n
        x = xrange.Cells(i, 1).Value
        y = yrange.Cells(i, 1).Value
        Sumx2 = Sumx2 + x * x
        Sumxy = Sumxy + x * y
    Next

```

2007年度 情報処理 II (城石)

```

a1 =
Slope2 =
End Function

(問) 行方向に並べられたデータ範囲を Get し、台形公式で数値積分する関数
TrapezoidIntegration(y 範囲, x 範囲) を途中から作ってみよう。
Public Function TrapezoidIntegration(yrange As Range, xrange As Range) As Double
    Dim n As Long
    Dim i As Long
    Dim Sum As Double
    Dim h As Double
    Sum = 0
    n = xrange.Rows.Count
    For i = 1 To n - 1
        h =
        Sum = Sum +
    Next
    TrapezoidIntegration = Sum
End Function

```

実行速度を上げよう

プログラムが正しく動くことが確認できたら、コンパイルという方法でプログラムの実行速度を向上させることができる。コンパイルするには Visual Basic Editor 上で [デバッグ] → [VBAProject のコンパイル] を選ぶ。

文字列操作をマスターしよう!

文字列操作をマスターすれば、VBA で様々なことができるようになる。代表的なものをマスターしよう!

文字列を連結するには?

文字列を連結するには+演算子か&演算子を用いる。

文字列からある一部分を抜き出すには?

Mid 関数…開始文字位置と文字数を指定して抜き出す。

<書式> Mid(文字列, 開始位置, 文字数)

Left 関数…左から文字数を指定して抜き出す。

<書式> Left(文字列, 左からの文字数)

Right 関数…右から文字数を指定して抜き出す。

<書式> Right(文字列, 右からの文字数)

Fig. 5 作成した Visual Basic for Application 学習のためのテキストの一部

Excel の使い方(中級編)と題し、卒業研究等で Excel を正しく使用できるように、Table 3 の項目について学習させた。

Maxima の時と同様に、計 13 ページの説明や手順を詳しく書き込んだプリントを配布し、個々人の進度に合わせて学習できるようにした。

3.2 Visual Basic for Applications の学習

現在、数多のプログラミング言語に関する入門書が発行されているが、プログラミングの学習方法としての構成は大きく分けて 2 つに分類できる。一つは、変数や文法といったプログラミングの構造から入っていくものである。英語で言えば Grammar をまず一通り終えてから英語の本を読む、といったことに相当すると思われる。もう一つは、「～を作ろう」といった実際に実用的なプログラムを作成する過程で、基本的な文法を少しずつ学習していくものである。

前者は、コンピュータ言語そのものに興味がないと学習の途中で頓挫すると考えられるので、本授業においては、変数や文法の説明は最低限にとどめ、原則として後者の方式を採用した。作成したプリントの一部を Fig. 5 に、プリントの構成を Table 4 に示す。

授業は、前述のように説明や手順を詳しく書き込んだプリントを配布したが、所々空欄を作り、学生に考えさせるようにした。非常に内容が盛りだくさ

らであるが、評価方法を定期テスト 6 割、毎時間の提出課題を 4 割とすることにより、学生には毎時間の課題を集中して行うように指導した。

また、いつも専門の内容では飽きてしまうと考えられるので「クリスマスにちなんで星を描こう」や「じゃんけんゲームを作ろう」といった課題を挿入した。

4. 結論

物質工学分野の内容と情報処理工学分野を深く関連させることによって、コンピュータが便利であるという認識を高め、学生の興味を引き出すことができた。また、より実践的な知識を習得させることに成功した。

参考文献

- [1] 吉村 忠与志, "厳選例題 Excel で解く問題解決のための科学計算入門", 技術評論社(2005).
- [2] 南 茂夫, "科学計測のための波形データ処理", CQ 出版社(1986).
- [3] 玄 光男, 井田 憲一, "数値計算プログラム", 電気書院(1984).
- [4] 七條 達弘, 渡辺 健, "やさしくわかる Excel VBA プログラミング", ソフトバンククリエイティブ(2004).