

## 初級シミュレーション技術者教育カリキュラムの開発とアンケート報告

○吉村 忠与志<sup>1</sup>、佐々 和洋<sup>2</sup>、後藤 仁志<sup>3</sup>福井高専・<sup>1</sup>名誉教授、<sup>2</sup>物質工学科(〒916-8507 鯖江市下司町)<sup>3</sup>計豊橋技科大学情報・知能工学系(〒441-8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1)

## 【緒言】

高専化学系学科 36 校に対してアンケート調査を行い、化学系高専で実施されているシミュレーション教育のカリキュラム実態を調査した。これによって化学シミュレーション技術者教育の全体像を把握する。それらを元に平均的なレベルのコアカリキュラムを提案し、それを履修した者に対して初級シミュレーション技術者の認定を試みることを目的とする。

このアンケートは豊橋技術科学大学高専連携プロジェクト研究の一つとして実施しているもので、その成果は高専教育ならびに高等教育に反映できるものと考えている。このアンケートの回答期日を 2013 年 11 月 22 日としたところ、回答率 89%であった。

## 【初級レベルの定義】

福井高専では、コンピュータ化学を教授する為に参考文献の教科書を活用して化学シミュレーション教育を実践している。化学シミュレーション技術者が身につけるべき知識の初級レベルとしての学際は、下記の 3 点が考えられる。

- ① 化学全般に関する知識
- ② コンピュータ全般に関する知識
- ③ 数値解析全般に関する知識

情報社会の中で、コンピュータで使用する問題解析ソフト(CAE ツール)の操作さえ習得すればよいというものではない。CAE(Computer Aided Engineering)ツールは万能ではないので、下記の 3 点に関して判断する能力を身につけることが求められる。

- ① 起きている化学現象・事象に関して適切な数学モデルを立てることができる
- ② 精度の良い(パラメータ・初期データの設定)計算結果を算出することができる
- ③ 計算結果から適切性(数学モデル・解法の妥当性)を判断することができる

## 【アンケート結果】

回答のあった高専化学系 31 学科に対してアンケートを集計した。アンケート記入において該当する項目に○印を、教科のシラバスにはあげずにトピック的に教授する項目は△印としましたが、教授されていることは間違いないので、カウントの対象としました。アンケートは 4 問とした

一問目の 4 つの専門教科(分子科学、化学工学、応用化学、生物工学)でのコンピュータ教育は、物質工学に代表される応用化学が 74%で、化学工学が 42%で、学科構成として化学工学科が存在するが、物質工学科の中にも化学工学を柱とするカリキュラム構成がなされている。学科改組で加わった生物工学が 32%であった。カリキュラムとしての分子科学は 23%を占めていた。分子科

学におけるシミュレーションの重要性が各学科においてもカリキュラムとして定着しつつあるようである。

二問目の「化学問題解決のために必要な、コンピュータに関する基礎的な知識と技術」では、(1) Word で報告書を作成できるは 94%、(2) Excel で統計データを処理できるは 97%、(3) PowerPoint でプレゼンテーションができるは 94%、(4) 通信ツールでメールのやり取りができるは 96%であり、パソコンアプリの三種の神器の活用能力はほぼ全学科でカリキュラム化している。(8) Excel/VBA でプログラミングができるは 61.3%であり、VBA によるプログラミングもほとんどの学科で採用されていた。

60%に近いものでは、(5) 化学問題を解決するために、シナリオをフローチャートにすることができるが 58%であり、シナリオをフローチャートに書く能力も育成されていた。(11) 分子モデリングができるが 55%と多かった。シミュレーションの課題として主にあげられる、分子シミュレーションのツールに関しては、Gaussian, MDPAC, MOPAC, Chem3D, FreeWheel, Winmostar などが使用されていた。

その他の、(6) Excel のゴールシークで問題を解くことができる、(7) Excel のソルバーで問題を解くことができる、(9) CAE ツールでプログラミングができる、(10) e-learning システムがあれば利用できるはカリキュラムの中では少数派であった。

三問目の「化学問題解決のために必要な、数値解析に関する基礎的な知識と技術」では、(1) 数値計算手法全体について理解できるが 68%、(2) 数値解析技術を用いて問題解決に取り組むことができるが 65%、(4) 方程式の解を求めることができるが 77%、(5) 連立一次方程式を解くことができるが 77%、(6) 行列計算ができるが 61%、(8) 数値積分法が理解できるが 65%、(9) 微分方程式が理解できるが 61%であった。数値解析の手法についてはほぼカリキュラム化されていた。少数派では、シミュレーションに必要な能力の(3) 問題解決の数学モデルを立て、妥当性を判断することができるが 52%であり、(7) データ補間の手法が理解できるや、(10) フーリエ解析が理解できる、(11) 数値計算における収束条件が理解できるは、少なかった。

四問目の「化学問題解決のために必要な、統計解析に関する基礎的な知識と技術」では、(1) 計算過程において有効数字の概念が理解できるが 90%、(3) 統計解析手法を用いて問題解決に取り組むことができるが 71%、(4) Excel で散布図を書くことができ、直線回帰式を求めることができるが 94%、(5) 統計計算に必要な基本統計量が理解できるが 68%、(9) Excel の分析ツールを使って統計処理ができるが 61%、(2) 化学の観点から身の回りで起きている現象・事象を適切に認識し、統計処理ができるが 58%であった。統計解析は Excel を活用して解決する能力が育成されていた。

少数派では、(8) 統計データに対するヒストグラムを書くことができるが 55%程度で、(10) 重回帰分析法で問題解決に取り組むことができるや、(11) 判別分析法で問題解決に取り組むことができるが、少なかった。シミュレーション教育で必須の、(6) 乱数が理解できるや、(7) モンテカルロ法で問題解決に取り組むことができるが、少なかった。ゆえに、モンテカルロ法などによるシミュレーション教育は行われていないことが分かった。

## 参考文献

- 1) 吉村忠与志ら、Excel/VBA プログラミング入門、CQ 出版(2012)