

## 「情報を生かすものづくり」のためのマテリアル・エンジニア育成プロジェクト

物質生命化学科 杉本 学

## 1. 緒言

様々な分野の「ものづくり」の基盤となるのは新材料の「ものづくり」である。新素材の創成については、化学分野や材料科学・材料工学分野の世界中の研究者・技術者が日々精力的に研究開発に取り組んでいる。

この「ものづくり」の一つの出発点は、物質に関する情報を十分に活用することであろう。物質の構造的特徴を理解したり、物質の示す様々な性質の中にどのような可能性や重要因子が潜んでいるかを的確に知ることができれば、ものづくりの方向性が明確になり、より高い価値を有する材料を生み出すことが可能となる。では、情報を生かすものづくり教育をどのように実施すべきであろうか？

現在、物質生命化学科の教育目標には科学技術の理解の深化が謳われ、その目的達成に向けた現代的なカリキュラムが構築されている。その中で、例えば、分子構造について学習する機会が多いが、その情報を実感する、すなわち立体構造を実感する機会ほとんどない。立体構造については、現在理論計算を活用した3次元グラフィックスで確認することは可能になった。しかしそれを手に触れて実感する機会とは与えられておらず、ものづくりを実践する研究者の実感は乏しい。

一方、膨大な研究の蓄積によって、分子に関する様々なデータが集積されている。情報を上手に活用し、その中から価値ある情報を引き出すかは研究者にとって重要な仕事であるが、高機能材料の合理的開発を志向した情報処理技術に関する講義・演習はほとんど行われていない。

このような背景から、本プロジェクトでは、材料開発研究において獲得する様々な情報を活用する（生かす）ことが重要であると考え、分子を実感できるようにすること、最新の情報機器を化学研究に活用すること、化学研究で得られる膨大な数値データの中から価値ある情報を獲得する技術を修得するための教育を実施することを目的として、外部の専門家による模擬授業を開講し、実際の学生の反応と講義実施における課題を検討して、今後の講義設計を行うこととした。

## 2. 実施方法

ウルフラムリサーチアジア(株)・セールスエンジニア・中村英史氏(日本大学非常勤講師)、合同会社シンボリックシステムズ・代表・松田裕幸氏(一橋大学・法政大学非常勤講師)を非常勤講師として招聘し、化

## (a) 講義案内

工学部教職員の皆様  
物質生命化学科 教職員の皆様  
物質生命化学科 学生の皆様

工学部の「革新ものづくり展開力の協働教育事業」に採択されたプロジェクトの一環として、コンピュータモデリングとその応用に関する講義(外部講師による)を以下の要領で開催いたしますので、ご連絡申し上げます。各学科におかれましては学生の皆様にもご連絡頂ければ幸いです。どうぞ宜しくお願い致します。

なお、本講義は学生を対象とするものですが、教職員の皆様にもご参加いただくことが可能です。多数ご参加をお待ちしております。

\*講義内容  
ソフトウェア(Mathematica)を用いて以下のことを行う手法について解説します。  
a)モデル化とシミュレーション  
b)3D コンピュータ・グラフィックスによる可視化  
c)3D プリンティングへの応用の可能性

\*日時  
H25年11月20日(水) 10:00-12:00

\*会場  
工学部物質生命化学科(2F)会議室

\*講師  
ウルフラム・アジア・リミテッド エンジニア  
中村 英史(なかむら ふさし) 博士

## (b) 講義資料

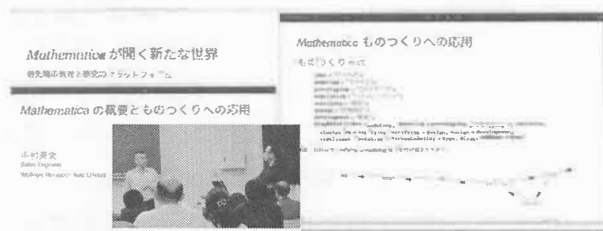


図1. 3D造形に関する(a)講義概要と(b)講義資料

学系学生に対する情報処理教育に関する模擬授業をしていただいた。

中村氏の講義では、「モデリングに基づく三次元造型」をテーマとした(図1参照)。コンピュータグラフィックスで作成された物体を、3Dプリンターによって実際の三次元的図形として造型する演習を行った。この演習を通じて、3Dプリンターという外部接続装置をコンピュータで制御する方法を学習させることも目的とした。

松田氏の講義では、「実験データに関するデータマイニング技術の実践」をテーマとした(図2参照)。この講義では、統計処理として高度な機能を有している数学ソフトウェア Mathematica を活用することで、化学分野の実験データや理論計算による膨大な数値データの中から有用な情報を抽出する手法を説明していただいた。また、データ分析がビジネスのどのようなシーンで役立つかについてもご紹介いただき、実際のデータ分析ビジネスのモデルを学生諸君に体験していただいた。

(a) 講義概要

講義題目:『Mathematicaを用いたデータサイエンス入門』  
講師: シンボリックシステムズ・松田裕幸氏  
日時: 12/13 3-4限目  
会場: 総合情報基盤センター4F実習室  
内容:  
(1)データサイエンスとは  
a. パターンの発見 b. 傾向(trend)を知る c. 予測する  
(2)データサイエンスのためのツール  
a. データの視覚化 b. グラフ理論(関係を知る)  
c. パターン認識 d. 確率・統計  
e. 関数化 f. 分類(clustering) g. モデルの推定(ルール発見)

(b) 講義資料

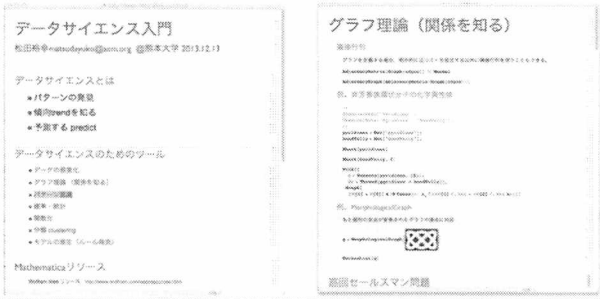


図 2. 数値データの意味を解析するデータサイエンスについての(a)講義案内と(b)講義資料の一部。

3. 成果

(1) 講義での学習成果

実施した講義の成果として、講義に参加した学生は分子に関する理論計算によって分子構造を予測し、実際にそれを3Dプリンターで造形できるようになった。その成果を図3、4に示す。図3は光触媒機能を有する分子を造形するためにソフトウェア上で分子構造を生成したものであり、それによって3Dプリンターへの出力を可能とした。図4は学生実験科目で検討課題としている分子について理論計算を行い、それを3Dプリンターによって出力したものである。このコンピューター利用技術の修得によって、学生が自ら興味をもつ分子の構造的特徴を実際に三次元的造形物として

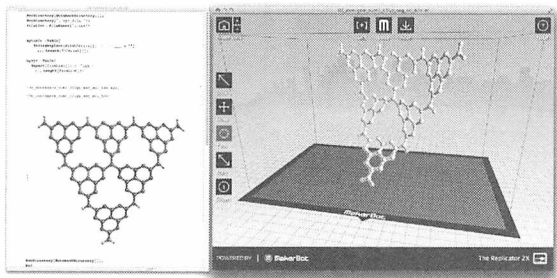


図2. 電子状態計算ソフトGaussian09によって予測した光触媒分子(グラファイト型炭化窒素のモデル分子であるメレム6量体)を数式処理ソフトMathematicaで読み取り(左図)、3Dプリンター用ソフト(MakerWare)で読み取り可能なファイル形式に変換した結果(右図)。

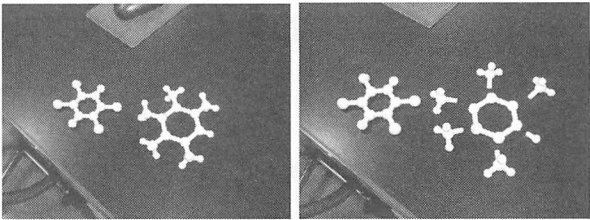


図 3. 学生実験科目で研究する分子。電子状態計算によって分子構造を理論的に予測し、その結果を用いて3Dプリンターで造形した。右の写真は、造形したものを分解し、組み立てられるようにしたもの。

実感することが可能になった。なお、今回の演習において、1名の学生が造形した分子構造を加工してパーツを作成し、さらなる変更を手で行えるようにした。これは小さな工夫であるが、3Dプリンターによる造形物の活用手法として興味深い。

データサイエンスに関する講義では、参加学生は各種データの画像化やクラスター分析などの統計解析を学習した。その結果を応用して、薬物分子の構造と電子状態の相関に関するクラスター解析や、発光性分子の発光特性と電子状態の相関に関するデータマイニングに関する研究を学生が自ら行えるようになった。

(2) 講義設計に関する検討

今回の模擬授業と講師とのディスカッションを通じて、実際に「情報を生かしたものづくり」を行うためには次のような課題があることが分かった。(a) 3Dプリンティングには比較的長い時間が必要で、装置の拡充か、時間配分に関する工夫をしなくては十分な講義・演習ができない、(b)ソフトウェアの習熟のための時間の確保と効率的学習のための工夫が別途必要である、(c) 3Dプリンターの利用目的に関して学生の自由な発想を期待したいところではあるが、実際の成果に到達するには十分な時間と教員からの的確なアドバイスが必要である。また、(d)データサイエンスの活用については、適用範囲が広範囲に渡るため、講義内容が必ずしも受講者の専門分野に合致せず、学習意欲の低下が見られた。更に、(e)修得した汎用的手法を各自の専門分野でどう活用するかについて議論する時間的余裕が無かったことも問題であるように思われた。

今回の実験講義を通じて2つの側面で情報を活用する講義を行ったが、いずれの講義でも、様々な分野への知的好奇心の育成、手法を修得する機会と場所の提供、ものづくりの価値を考える機会の提供、が必要であるように感じられた。ものづくり教育を強力に推進するには“与える教育”から“学生の力を引き出す教育”へのパラダイムシフトが必要であり、そのための斬新な着想が強く求められているように思われる。