

情報処理センター
研 究 報 告

The Bulletin of the Information Processing Center

第 32 号

(2011.3)

岡山理科大学

Okayama University of Science

岡山市北区理大町1-1

Tel(086) 256-8485 (直)

目 次

1. GPU の計算効率について

総合情報研究科修士課程	吉岡良将	1
総合情報研究科博士課程	新田敏弘	
情報科学科	河野敏行	

2. 教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (2)

化学科	坂根弦太	11
-----	------	----

3. 学士力を保証するための英語 e-Learning 構築のシステム設計

情報処理センター	岩崎彰典	37
秋田県立大学総合科学教育研究センター	岡崎弘信	
環太平洋大学次世代教育学部	木戸和彦	

4. 考古地磁気データを用いた日本における過去 2000 年間の地磁気変動標準曲線の作成について

情報処理センター	畠山唯達	41
生物地球科学科	山本真央	

5. 岡山オルガノンにおける大学連携による教育の共有化

情報処理センター	竹内 渉	49
岡山オルガノン大学教育連携センター	木村 宏	
岡山オルガノン大学教育連携センター	佐藤 大介	
岡山オルガノン大学教育連携センター	岡戸 真理子	

6. LMS 「MOMOTARO」 Ver.9 の特徴

情報科学専攻	三木 啓一郎	63
情報科学専攻	大西 莊 一	
情報科学専攻	井川 真 弓	
情報科学専攻	時 岡 貴 幸	
情報科学専攻	大 倉 将 人	

GPU の計算効率について

吉岡 良将*1, 新田 敏弘*2, 河野敏行*3

*1 岡山理科大学大学院程総合情報研究科修士課程情報科学専攻 1 年

*2 岡山理科大学大学院程総合情報研究科博士課程数理環境システム専攻 3 年

*3 岡山理科大学総合情報学部情報科学科

1 はじめに

ここ数年, 通常の PC で科学技術計算の速度を大幅に高速化するために, ビデオカード GPU (Graphics Processing Unit) を利用する試みがある. このような計算利用は GPGPU (General purpose computing on graphics processing units) と呼ばれ, 大きく分けて NVIDIA と AMD の 2 社から提供されているビデオカードによって実現されている. NVIDIA では CUDA, AMD では ATI Stream と呼ばれる統合開発環境が提供されている. 本来, ビデオカードは PC の画像出力としてグラフィック・レンダリングとして使われており, 最近のゲームのニーズに応えるために, より高速な処理を行えるようになったといっても過言ではない. 2010 年には, GPU の浮動小数点演算能力は 2000GFLOPS をオーバーしたと紹介されている[1]. 岡山理科大学情報処理センターにおいては, GPU 計算機として, NVIDIA 社の Tesla C1060 と Quadro NVS290 が搭載された PC が設置されている. 現在では, さらに高性能なカードが登場し, 今後, GPGPU は様々な分野で利用されるであろう. このような傾向のなか, 安価で高性能なカードも登場している. その結果, 個人で所有できる PC 環境で高速な並列計算ができるようになった.

本研究においては, 情報処理センターの GPU 計算機との比較のために, 特に安価なカードでの計算性能について検証を行う. さらに CUDA 専用チューニングされた計算ライブラリ CUBLAS についても検証する. また, CUBLAS を用い, 線型方程式の反復解法の一つである ICCG 法について調べた結果を紹介する.

2 演算デバイスの性能と価格について

情報処理センターで利用しているビデオカード C1060 の性能は, 単精度浮動小数点演算において 933GFlops, 倍精度浮動小数点演算では 78GFlops というものである[2]. 情報処理センターにおいては主にこの C1060 において計算を行うことができる. 導入当時はおそらく, ビデオカードのみで 30 万円程度であったと思われる. 演算デバイスとしては高価であるが, CPU でこれだけの性能を出すためには, さらに高価なシステムが必要である. 一般に, CPU を並列化させる場合, GPU の場合よりも高価になることが知られている.

GPU による計算は現在もなお, 発展している途中であり, デバイスの開発もかなり, 急激に進んでいる. そのことは, 表 1 に示した CPU と GPU の性能比較からも伺える.

最近よく使われているビデオカードの GTX480 は価格も手ごろで、理論値であるが、その性能は C1060 を上回っており、価格は当時に比べて 10 分の 1 程度になっている。ただし、この結果は単精度計算によるものであり、さらに、並列処理の効率が活かされた場合にこの結果が得られるということに注意しなくてはならない。表 1 に最近の CPU と GPU の性能とその理論的な性能と現在、ショップなどで取り扱われている価格をネットで調べた結果を示した。理論値は、コア数とクロック数から計算したものである。

表 1 : CPU と GPU の性能(理論値)と価格

CPU/GPU	チップセットと性能	性能 GFLOPS	価格
CPU	Core 2 Duo/ 3.33GHz / 2 コア	26.64	約 27,000 円
	Core 2 Quad/ 3.0GHz / 4 コア	48.00	約 35,000 円
	Core i7(960)/3.2GHz / 4 コア	51.20	約 22,000 円
GPU	GeForce 210 / 589MHz / 16 コア	18.85	約 3,000 円
	GeForce 9800 GT / 1.50GHz / 112 コア	336.00	約 10,000 円 ^{注1}
	GeForce GTX480/ 1.401GHz/480 コア	1345.00	約 25,000 円
	Quadro FX 1800 /550MHz /64 コア	70.40	約 70,000 円
	Tesla C1060 / 1.296GHz / 240 コア	933.00	約 150,000 円 ^{注2}

価格については価格.com にて 2011 年 10 月 30 日調べの結果である。

注 1 : 現在、販売されておらず、価格は不明であるが、中古品が 10,000 円未満で購入可能。

注 2 : 現在、価格.com には掲載されておらず、amazon.co.jp の情報を利用した。

実際の数値計算においては、倍精度計算が必要であり、アルゴリズムによっては並列が可能となる部分が少ないかまたは、困難である場合がある。その解決策の一つとして、CUDA では最適にチューニングされた演算ライブラリが提供されている。

3 CUBLAS ライブラリ

CUBLAS ライブラリは、一般的な線形演算のパッケージである BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) を CUDA で動作するように実装したライブラリである。BLAS 自身は素人 (または、ある程度玄人であっても) が作る線形計算のプログラムよりも数段高速であり、そのライブラリをさらに GPU に対してチューニングを行ったものである。GPU に対しての演算は 2009 年度の報告書[3]に書いたように、グリッド、スレッド、ブロックのように計算させようとする演算に対して、どのように分割させるか、さらに、メモリーの利用法などさまざまなことを考慮してプログラムする必要がある。したがって、CUDA によるプログラムは大変難しい作業といえる。しかしながら、CUBLAS は CUDA の以下の主要な手続きを簡略化することができる[4] :

1. cudaMemCopy による初期データをデバイスメモリに転送

2. kernel を起動し, 計算実行
3. cudaMemcpy による演算結果をメインメモリに転送

以上の処理は CUBLAS で用意された API を呼び出すだけで, 行列・ベクトル演算が実現できる. CUBLAS の API は大きく分けて Level1,2,3 に分かれている.

3.1. Level 1 CUBLAS について

Level 1 はベクトルとスカラー, またはベクトル同士の演算である. 単精度ベクトル x の各要素を α 倍し, 単精度ベクトル y に足す命令は program1 である.

```
float cublasSaxpy(int n, float alpha, const float *x, int incx, float *y, int incy)
```

program1 : Level 1 CUBLAS cublas Saxpy

program1 において, 演算を行う範囲を指定するために, $n, incx, incy$ が指定されている. program1 を疑似コードで表したものを program1' に示す.

```
for (i=0; i<n; i++) {
    y[ly + i * incy] = alpha * x[lx + i * incx] + y[ly + i * incy]
}
```

program1' : Pseudo program of cublas Saxpy

3.2. Level 2 CUBLAS について

Level 2 はベクトルと行列の演算である. $n \times n$ の行列 A にベクトルを掛けた行列の各要素を α 倍した結果に, 各要素を β 倍した y を足す演算 API は program2 のように呼び出す.

```
void cublasSsymv (char uplo, int n, float alpha, const float *A, int lda, const float *x, int incx, float beta, float *y, int incy)
```

program 2 : Level 2 CUBLAS cublas Ssymv

3.3. Level 3 CUBLAS について

Level 3 は行列と行列の演算である. $m \times k$ 行列 A と $k \times n$ 行列 B の掛け算を行い, 各要素を α 倍したものに各要素を β 倍した $m \times n$ 行列 C を足す API は program3 である.

```
cublasSgemm (char transa, char transb, int m, int n, int k, float alpha, const float
 *A, int lda, const float *B, int ldb, float beta, float *C, int ldc)
```

program 3 : Level 3 CUBLAS cublas Sgemm

数値実験では CUBLAS の API を用いた場合と用いない場合の比較を数値実験にて示す.

4 数値実験

4.1 行列の積

基本的な行列と行列の積を扱う. ここでは, Cuda の SDK 中にある行列の積のテスト **MatrixMul** を利用する. これは単精度の行列積を行うもので, チューニングされた BLAS の関数 **cublasSgemm** と通常の CUDA での行列積の計算を行う. 通常の CUDA での計算はブロックとグリッドを次数に合わせて分割して演算を行うものとする. 行列の大きさは, ビデオカードの性能とブロック数を変えることで, 決定している. CPU で処理するプログラムは以下ようになる.

```
for (unsigned int i = 0; i < hA; ++i)
  for (unsigned int j = 0; j < wB; ++j) {
    double sum = 0;
    for (unsigned int k = 0; k < wA; ++k) {
      double a = A[i * wA + k];
      double b = B[k * wB + j];
      sum += a * b;
    }
    C[i * wB + j] = (float)sum;
  }
```

Program 4 : CPU における行列積 $C=A \times B$

ここで, hA は行列 A の行数, wA は行列 A の列数を表しており, h は **height**, w は **width** の略を意味し, 行列 B に対しても同様である. 数値実験ではブロック数を変えてデータを与える.

数値実験においては, 以下の 5 つの環境でのテストを行い, FLOPS を演算性能の実験結果として求めた.

表 2 : テスト環境

テスト環境 1	テスト環境 2	テスト環境 3
情報処理センターの GPU 計算機	CPU : Core i3 540 3.06GHz GPU : GeForce 210 512MBDDR2 OS : Windows7pro 64bit Memory : 12GB	CPU : Corei7 950 3.07GHz GPU : GTX 480 OS : Scientific Linux 6.0 Memory : 6GB

表 2' : テスト環境

テスト環境 4	テスト環境 5
CPU : Core 2 quad Q8200 2.33GHz GPU : GeForce 9800 GT 1024MB OS : Windows7 64bit Memory : 4GB	CPU: Core 2 quad Q8300 2.50GHz GPU: Quadro FX 1800 OS: Windows7 32bit Memory : 2GB

各テスト環境においてブロック数を変更した場合の行列演算での性能を GFlops で示したものを表 3 から表 6 に示す. 各実験結果では, GPU と CPU 間のデータ通信は加えていない. すなわち, 最初に行列 A と B のデータを HOST から DEVICE へのコピー, 演算終了後に行列 C のデータを DEVICE から HOST へのコピーにかかった時間は計測していない. CUBLAS の結果においても同様にメモリーのコピーにかかる時間は省いた結果である.

表 3 : 行列の積に対する各演算による GFlops の比較 (テスト環境 2)

ブロック数	行列 A の次数	CUBLAS	通常 CUDA	CPU
4	80×40	3.6325	0.3129	7.4105
8	160×80	9.4280	0.9273	8.5183
16	320×160	13.1369	1.1374	8.5673
20	400×200	17.1956	1.0953	8.5948

表 4 で用いたビデオカードは GeForce 210 である. 性能の理論値は 18.85GFlops である. ブロック数が 4 のときは CUBLAS で 20%, 通常の CUDA の計算で 1.6% の性能を示している. ブロック数が増えて 20 のとき, CUBLAS を用いることで, およそ 91% の性能を引き出している. 通常の CUDA の計算では理論値に比べて約 6% 程度しかその性能を引き出せていない.

表 4 : 行列の積に対する各演算による GFlops の比較 (テスト環境 3)

ブロック数	行列 A の次数	CUBLAS	通常 CUDA	CPU
4	120×80	105.2055	26.9316	26.7130
8	240×160	211.7404	142.0031	27.1139
16	480×320	482.8291	224.0292	26.7625
20	600×400	393.7385	188.0448	26.7993
24	720×480	444.9387	223.5838	26.7100
32	960×640	587.2840	237.8419	20.8532

表 5 : 行列の積に対する各演算による GFlops の比較 (テスト環境 4)

ブロック数	行列 A の次数	CUBLAS	通常 CUDA	CPU
4	120×80	29.5195	2.4988	3.6817
8	240×160	55.2490	6.9930	6.7416
16	480×320	164.4008	8.5575	5.9630
20	600×400	75.9119	7.5107	6.5937

表 6 : 行列の積に対する各演算による GFlops の比較 (テスト環境 5)

ブロック数	行列 A の次数	CUBLAS	通常 CUDA	CPU
4	120×80	19.3399	3.8663	2.3286
8	240×160	35.3733	7.9212	2.3730
16	480×320	94.3178	43.0035	2.1150
20	600×400	74.9943	18.1366	2.3672

さらに、Window 環境と Linux 環境を比較するとはるかに Linux 環境での性能が高いことがわかる。Windows 環境では、裏で多くの処理が行われており、数値計算に性能が発揮されにくいことが考えられる。テスト環境 3 においては、理論値の 43% であるが 500GFlops を超える性能を示した。CPU における計算は、CPU の並列化は行っておらず、CPU 1 基で計算した結果となる。すなわち、次数が増えても性能はあまり変化していない。

これらの数値実験から、CUBLAS の利用によって、2 倍から 20 倍程度の性能アップが得られることが分かる。GPGPU を行う際に CUBLAS の利用が不可欠である。

次に情報処理センターの GPU 計算機に対する結果を示す。情報処理センターの GPU 計算機において CUBLAS の実験は行っていないが、正方行列に対する行列積の結果を図 1 に Flops の比較を示す。横軸は行列の次元数を表し、縦軸は Flops を対数で示している。GPU での演算は 1024 次元でおよそ 37GFlops の性能が示されていた。図 2 では 1.E+09 でギガを示しているため、GPU による計算は次数が増えるごとに並

列による効果が得られ、高い性能が示すことがわかる。表 1 において、C1060 の性能の理論値は 933GFlops であるので、およそ 4% の性能が得られたこととなる。今回、CUBLAS の実験ができなかったが、表 2 に示すように、通常の CUDA の計算に対して、CUBLAS が 10 倍以上の性能を示しているので、予想ではあるが、CUBLAS を利用することで 50% 程度の性能は引き出せるかもしれない。メモリー転送時間を含む結果は、演算の最初と最後に GPU と CPU の間で行われたメモリー転送時間を付加したものである。実際の計算では、トータルの処理時間が重要視されるため、計算処理は高速になったとしてもメモリーの転送がボトルネックとなり、全体の性能を落とすことが予想される。このことは、2009 年度情報処理センター報告書[3]に述べたとおりである。特に、密行列同士の積の結果であるため、得られる行列データも密で得ているため、このような問題に対しては不利かもしれない。しかしながら、線型方程式の解法においては、得られたベクトルのみで済むので、結果を得るためのメモリーの転送時間はそれほど大きくならないかもしれない。

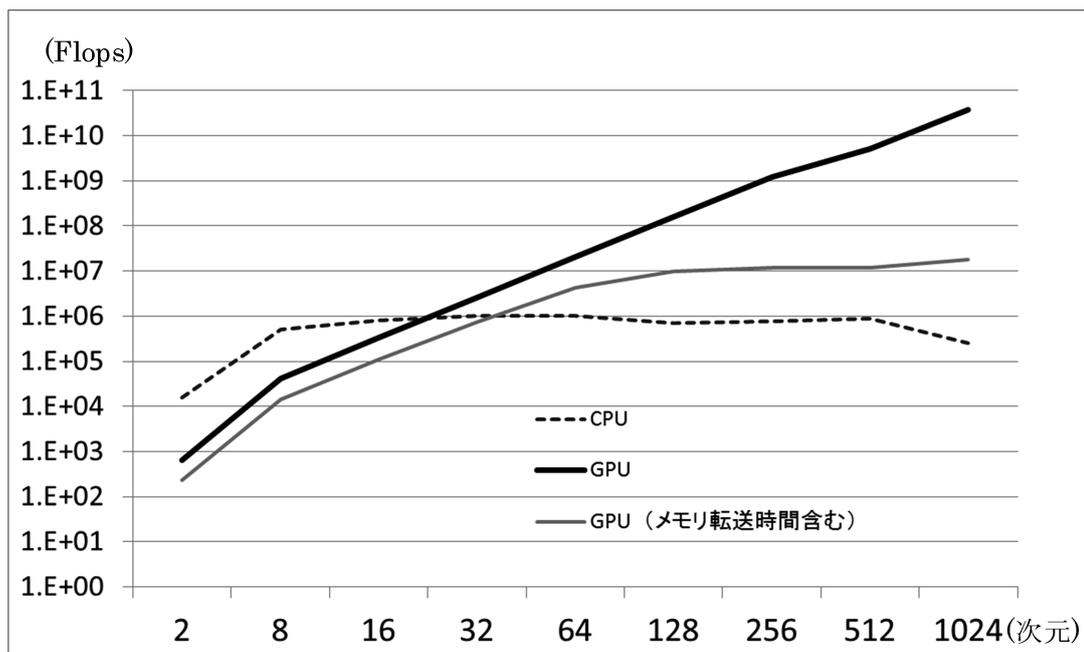


図 1: 正方行列の積の性能(テスト環境 1)

4.2 ICCG の計算効率

線型方程式 $Ax = b$ の解法として有名なものとして CG (Conjugate Gradient) 法がある。扱える問題は対称問題である。CG 法だけを用いた場合もある程度高速な方法であるが、一般的に前処理と共に使われる。前処理としては IC (Incomplete Cholesky) 法が良く用いられる。GPU の SDK libraries に ICCG 法のサンプルプログラムが用意されている。プログラムは CUBLAS が利用されている。扱う問題は、プログラム

5 で示したように行列 A の要素を乱数で設定した3重対角行列である.

対角要素 = (float)rand()/RAND_MAX + 2.0f;
 非対角要素 = (float)rand()/RAND_MAX;

Program 5 : 対角要素と非対角要素

行列の格納方式は CSR 方式を用いる. b はすべて1の要素を与え, 初期値は0ベクトルを与え計算を行う. 収束判定条件は残差ノルムに対して $1.0e-8$ とする. 行列の次数変化に対する演算時間を表7に示す. 計算機環境は表2の計算機環境3を用いた.

表7 CUBLAS を用いたアルゴリズムで CG と ICCG の比較

次数 N	CG/ ICCG	前処理 時間	反復 回数	反復 時間	合計 時間	最大誤差 $Ax - b$
4096(=2 ¹²)	CG	0	26	0.00279	0.00279	3.576279e-07
	ICCG	0.08040	2	0.03264	0.11304	1.192093e-07
16384(=2 ¹⁴)	CG	0	28	0.00336	0.00336	4.768372e-07
	ICCG	0.31254	2	0.12863	0.44117	2.384186e-07
65536(=2 ¹⁶)	CG	0	30	0.00555	0.00555	4.768372e-07
	ICCG	1.23942	2	0.50485	1.74427	2.384186e-07
1048576(=2 ²⁰)	CG	0	34	0.05147	0.05147	5.364418e-07
	ICCG	19.79826	2	8.02689	27.82515	2.384186e-07
16777216(=2 ²⁴)	CG	0	38	0.75895	0.75895	5.960464e-07
	ICCG	-	-	-	-	-

CUBLAS を用いた場合, スレッドなどの設定は自動で行ってくれるため, それらの表記は省略した. IC 法による効果は反復回数を見れば明らかで反復回数は2回となった. しかしながら, この前処理にかかる時間は次数が増えるにつれ, 膨大になっている. さらには, 2²⁴の問題に対してはメモリーの関係上, 処理が不可能となってしまった. 反復アルゴリズム中においても前処理行列の演算が増えるため, 反復時間も増大した. 一般的に ICCG 法は効果的といわれるが, CUBLAS を用いたアルゴリズムにおいては, その計算時間の比較において効果が無く, 計算時間が増えるだけの結果が得られた. 得られた解に対する最大誤差を求めた結果, 解の精度について大きな差はなかったため, 計算過程で丸め誤差の影響で精度が悪くなった様子は無いと思われる.

5 考察

単精度の密行列に対する行列積の演算能力の比較を行った結果、情報処理センターに導入されている C1060 は高価であるが、現在の GTX480 でも十分な性能が得られることが分かった。今回の実験では、倍精度の評価はしていないが、GTX480 は倍精度処理では極端に性能を落とすことが知られている。計算機環境として単精度ならば、安い GTX480 でも構わないが、数値解析には最低、倍精度計算が必要であるため、今後は Tesla C2050 などの環境は必要である。さらに、今回の実験結果からは CUBLAS の利用が重要であり、ビデオカードの性能を十分に引き出していることが分かった。さらに、CUBLAS を利用した線型方程式に対する CG 法の実験においては、前処理部の演算に多くの時間がかかることが分かり、反復解法アルゴリズムを検討する際の資料となった。

今後、GPU で実際に数値解析を行うためには、倍精度および 4 倍精度計算の導入や、メモリー更新の簡略化、計算アルゴリズムの並列処理に合わせた改良、大規模データとなった時のメモリーの配置などの問題がある。これらの検討と CUBLAS の計算効率が高いことから、この CUBLAS を効率よく利用できる計算アルゴリズムの改良を行うことを今後の課題とする。

参考文献

- [1] ウィキペディア, GPGPU, <http://ja.wikipedia.org/wiki/GPGPU>, 閲覧日時(2011 年 10 月 30 日).
- [2] NVIDIA C1060, http://www.nvidia.co.jp/object/tesla_c1060_jp.html, 閲覧日時(2011 年 10 月 30 日).
- [3] 河野敏行, 吉岡良将, 新田敏弘, GPU を利用した計算効率の改善について, 情報処理センター研究報告, 第 31 号, 1-8(2010 年 3 月).
- [4] CUDA Information, <http://gpu.fixstars.com/index.php/CUBLAS%E3%82%92%E4%BD%BF%E3%81%A3%E3%81%A6%E3%81%BF%E3%82%88%E3%81%86>, 閲覧日時(2011 年 10 月 30 日).

教育用分子軌道計算システム eduDV の開発 (2)

岡山理科大学 理学部 化学科 坂根弦太

gsakane@chem.ous.ac.jp

1. はじめに

限られた講義時間内で学生が、何の予備知識もなしに、いきなり周期表元素の原子軌道や、教科書に掲載されている様々な分子の分子軌道を自ら計算して、原子・分子軌道のエネルギー準位を知り、原子・分子軌道の三次元的な分布状況を確認することができる“教育用分子軌道計算システム eduDV”を開発[1]、整備し[2]、GUIでの動作を実現[3-4]、さらに開発を続け[5]、最新版のプログラム一式[6]とマニュアル[7]、および論文[8]を一般公開している。eduDV、および結晶構造、電子・核密度等の三次元データ可視化プログラム VESTA を含んだ“DV-X α 法のための統合支援環境” [4]は、eduDV[1-8]、DV-X α 法[9-11]、秀丸エディタ[12]、DV-X α 法計算支援環境[13]、VESTA[14-15]から構成されており、教育・研究目的ではほぼ無償で（秀丸エディタのみシェアウェア、ただし金銭的に難儀している学生の方（学校内設置のパソコンで学生の方が使用する場合もOK）には秀丸エディタフリー制度（アカデミックフリー個人・アカデミックフリー団体）がある）全ての環境を構築することができる。岡山理科大学情報処理センターの学生実習用パソコンの全てに eduDV、DV-X α 法、秀丸エディタ、DV-X α 法計算支援環境、VESTA がインストールされており、基礎化学・無機・量子化学系の講義・実習で活用できる。

現在のところ、理学部化学科の1年次前期必修科目“コンピュータ入門 I”（担当：坂根、畠山）、2年次後期選択科目“無機化学 III”（担当：坂根）、大学院理学研究科化学専攻科目“錯体化学 II”（担当：坂根）でこの eduDV、VESTA を含んだ GUI ベースの“DV-X α 法のための統合支援環境”を利用している。

教育用分子軌道計算システム eduDV は、分子の形（点群）を選び、必要最低限の情報（分子を構成する原子の原子番号、原子間距離、原子間角度）を会話形式で入力するのみで、DV-X α 分子軌道法プログラムを実行するのに必要な入力ファイル（F01, F25, F05）が準備され、マリケン・ポピュレーション・アナリシスを使ったセルフ・コンシステントな方法（セルフ・コンシステント・チャージ法）で各原子軌道の電子数がセルフ・コンシステントになるまで繰り返し計算が行われ、計算が収束したのち、各分子軌道のエネルギー固有値の表（F08E）を出力し、引き続いてそれぞれの分子軌道が、どのような原子軌道から構成されているかを調べるポピュレーション解析プログラム（POPANL）、各原子の有効電荷（Net Charge）を求めるプログラム（NETC）、原子間の共有結合性の強さの目安となる有効共有結合電荷（Bond Overlap Population）を計算するプログラム（BNDODR）、F08E のそれぞれの分子軌道の成分を図示するプログラム（LVLSHM）、HOMO-LUMO 近傍の分子軌道間のエネルギー差（単位：eV）を計算して波数（単位：cm⁻¹）および波長（単位：nm）に変換するプログラム（HLGAPS）、全分子軌道および電子密度、静電ポテンシャルについて、VESTA で読めるデータファイルを作成するプログラム（CONTRDALL）などの周辺プログラムが全自動で実行される。ユーザ（学生）は、あとは VESTA で任意の分子軌道の波動関数等値曲面図、分子の中での電子の僅かな偏りが俯瞰できる静電ポテンシャルマップなどを三次元可視化して、自由に拡大・縮小、回転させながら手に取るように眺める事ができる。

化学の講義・実習に eduDV を用いる場合、まずは単原子（原子軌道）を取り扱い、量子数（主量子数、方位量子数、磁気量子数）と軌道の三次元的形状を理解・記憶するところから始まり、二番目に水素分子(H_2)、窒素分子(N_2)、酸素分子(O_2)などの等核二原子分子の分子軌道 ($D_{\infty h}$ 対称) を取り上げ、結合性分子軌道と反結合性分子軌道の形状（位相）の違い、常磁性分子と反磁性分子の違い（スピン量子数）などを学習する。三番目に一酸化炭素分子(CO)などの異核二原子分子 ($C_{\infty v}$ 対称) を計算し、異なる原子軌道（基底関数）の線形結合で形成される分子軌道の本質を学生は実感する。そのあとは身近な小分子、例えばアセチレン分子 (C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称)、水分子 (H_2O , C_{2v} 対称)、アンモニア分子 (NH_3 , C_{3v} 対称)、ベンゼン分子 (C_6H_6 , D_{6h} 対称)、メタン分子 (CH_4 , T_d 対称)、六フッ化ウラン分子 (UF_6 , O_h 対称)などを次々と計算し、分子の形状、点群、分子軌道の多様性を知ることになる。

様々な分子の分子軌道を計算した際、多種多様な結合の比較が興味深い。水分子の O-H 結合、アンモニア分子の N-H 結合、メタン分子の C-H 結合などはいわゆる単結合、ベンゼン分子の C-C 結合は共役系 1.5 重結合、アセチレン分子の $\text{C}\equiv\text{C}$ 結合は 3 重結合などと呼ばれているが、それらは原子間の共有結合性の強さの目安となる有効共有結合電荷(Bond Overlap Population)を計算するプログラム(BNDODR)の出力(BN8)を読みとることで結合の強さを比較検討できるし、さらに HOMO 近傍の電子占有分子軌道の三次元的形状を VESTA で読みとることにより、より具体的に結合の正体を突き止める事ができる。限られた講義・実習時間内で、身近な分子の電子状態を eduDV+ DV- $X\alpha$ 法計算支援環境を GUI として DV- $X\alpha$ 法で計算し、計算結果（数値、三次元的な画像）を出力できることは教育的価値（効果）が高い。

化学の教科書で言われている単結合、共役系 1.5 重結合、二重結合、三重結合などは、通常、教科書では定性的な図（結合性分子軌道の数と形状）で説明されているが、実際には例えば同じ単結合といえども結合の強さは同一ではない。単結合を有する異なる分子をそれぞれ電子状態計算すれば、すべての有効共有結合電荷が 1.0 となるわけではなく、例えば 0.65 であったり、0.72 であったりと、様々な程度の有効共有結合電荷が算出され、結合の強さは具体的に比較検討できる。VESTA で結合性分子軌道を三次元可視化し、その分子軌道が、どのような原子軌道から構成されているかを調べるポピュレーション解析プログラム (POPANL) の出力(F08P)を読みとれば、結合の定量的な本質を見極める事ができる。

そうは言っても、単結合、共役系 1.5 重結合、二重結合、三重結合という定性的な分類は、化学結合の分類としては有意である。それぞれの結合を有する身近で代表的な分子の電子状態を計算、その結合を深く理解する事は教育的価値が高い。化学でこれらの結合の分類がもっとも多く出現するのは、有機化学の炭素-炭素間結合であろう。炭素-炭素結合における単結合、共役系 1.5 重結合、二重結合、三重結合を有する代表的な分子としては、単結合はエタン(C_2H_6 , D_{3d} 対称)、共役系 1.5 重結合はベンゼン(C_6H_6 , D_{6h} 対称)、二重結合はエチレン(C_2H_4 , D_{2h} 対称)、三重結合はアセチレン(C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称)であり、これらが最も単純なものであろう。多くの有機化学・量子化学の教科書でもこれらの分子が取り扱われている。

これまでの eduDV では、ベンゼン(C_6H_6 , D_{6h} 対称)、アセチレン(C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称)は計算できていたものの、エタン(C_2H_6 , D_{3d} 対称)、エチレン(C_2H_4 , D_{2h} 対称)は計算できなかった。

そこで今年度は、eduDV で計算可能な分子形状の項目を一つ増やし（現在 20 種類であったものを 21 種類に拡張し）、エチレンに代表される A_2B_4 型 (D_{2h} 対称) 分子の計算を可能とするべく、Fortran 77 言語を用いてコーディングし、新たなソースコードを完成させた。その結果、炭素-炭素間が 1.5 重結合（ベンゼン）、二重結合（エチレン）、三重結合（アセチレン）の各分子を講義で取り扱えるようになった。

エタンに代表される A_2B_6 型 (D_{3d} 対称) 分子については、来年度にプログラミングする予定である。

2. 開発環境

情報処理センターより貸与されたノートパソコン (東芝 Dynabook SS 2010 DS86P/2, CPU: Mobile Intel Pentium III 866 MHz, RAM: 256 MB, OS: Windows 2000 Service Pack 4) に Open Watcom Fortran77 compiler (Version 1.9)[16]をインストールした環境を用いた。

3. ソースコード

エチレン型 A_2B_4 型 (D_{2h} 対称) 分子に関するソースコードとして, マニュアル(ステップバイステップ) 実行版プログラム `d2h24`, ノンスピン全自動実行版プログラム `d2h24n`, スピン版全自動実行版プログラム `d2h24s` の3本を作成したが, 紙面の都合上, ここではノンスピン全自動実行版 `d2h24n` のみ掲載する。

3-1. 【c:¥dvxa¥scat¥d2h24n.f】 Fortran 77 ソースコード

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
c=====
c d2h24n (D2h symmetry, A2B4 type Molecule (e. g. C2H4),
c                                     symOrb NON-SPIN version )
c 2011.02.16 Version 1.0 Sakane, Genta
c ( Department of Chemistry, Okayama University of Science, Japan )
c=====
      program d2h24n
      real*8 a(6,3), b(6,3), bohr, aadis, abdis, baadis, babdis, az, bz, ax, bx
& pi, rad, dbabang, rbabang, hfaadis, hfbaadis, hfdbabang, hfrbabang
      integer z(6), n(6)
      open (unit=07, form='formatted', status='unknown',
&         access='sequential', file='d2h24n.out')
      open (unit=08, form='formatted', status='unknown',
&         access='sequential', file='f01')
      bohr=0.5291772108
      pi=3.1415926535
      rad=180/pi
      write(*,1010)
10 write(*,1020)
      read(*,*) z(1)
      if(z(1).le.0) then
      write(*,1510)
      write(*,1520)
      write(*,1530)
      go to 10
      else
      go to 20
      end if
20 if(z(1).gt.94) then
      write(*,1510)
      write(*,1520)
      write(*,1530)
      go to 10
      else

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
    go to 30
    end if
30 write(*, 1030)
    read(*, *) z(3)
    if(z(3).le.0) then
    write(*, 1510)
    write(*, 1520)
    write(*, 1530)
    go to 30
    else
    go to 40
    end if
40 if(z(3).gt.94) then
    write(*, 1510)
    write(*, 1520)
    write(*, 1530)
    go to 30
    else
    go to 50
    end if
50 write(*, 1040)
    read(*, *) aaadis
    write(*, 1050)
    read(*, *) aabdis
60 write(*, 1060)
    read(*, *) dbabang
    if(dbabang.le.0) then
    write(*, 1610)
    write(*, 1620)
    write(*, 1630)
    go to 60
    else
    go to 70
    end if
70 if(dbabang.ge.180) then
    write(*, 1610)
    write(*, 1620)
    write(*, 1630)
    go to 60
    else
    go to 80
    end if
80 baadis=aaadis/bohr
    babdis=aabdis/bohr
    hfaadis=aaadis/2
    hfbaadis=baadis/2
    rbabang=dbabang/rad
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
hfdbabang=dbabang/2
hfrbabang=rbabang/2
z(2)=z(1)
z(4)=z(3)
z(5)=z(3)
z(6)=z(3)
n(1)=1
n(2)=1
n(3)=2
n(4)=2
n(5)=2
n(6)=2
ax=aabdis*sin(hfrbabang)
az=aabdis*cos(hfrbabang)
bx=babdis*sin(hfrbabang)
bz=babdis*cos(hfrbabang)
a(1,1)=0
a(1,2)=0
a(1,3)=hfaadis
a(2,1)=0
a(2,2)=0
a(2,3)=-hfaadis
a(3,1)=0
a(3,2)=ax
a(3,3)=hfaadis+az
a(4,1)=0
a(4,2)=-ax
a(4,3)=hfaadis+az
a(5,1)=0
a(5,2)=ax
a(5,3)=-hfaadis-az
a(6,1)=0
a(6,2)=-ax
a(6,3)=-hfaadis-az
b(1,1)=0
b(1,2)=0
b(1,3)=hfbaadis
b(2,1)=0
b(2,2)=0
b(2,3)=-hfbaadis
b(3,1)=0
b(3,2)=bx
b(3,3)=hfbaadis+bz
b(4,1)=0
b(4,2)=-bx
b(4,3)=hfbaadis+bz
b(5,1)=0
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----
      b(5, 2)=bx
      b(5, 3)=-hfbaadis-bz
      b(6, 1)=0
      b(6, 2)=-bx
      b(6, 3)=-hfbaadis-bz
      write(7, 3010)
      write(7, 3020)
      write(7, 3030)
      do 101 i=1, 6
      write(7, 1000) b(i, 1), b(i, 2), b(i, 3), n(i)
101  continue
      write(8, 2010)
      do 201 i=1, 6
      write(8, 2020) z(i), n(i), a(i, 1), a(i, 2), a(i, 3)
201  continue
      write(8, 2030)
      write(8, 2040)
      write(8, 2030)
      write(8, 2050)
      write(8, 2060)
      write(8, 2070)
      write(8, 2080)
      go to 204
202 write(*, 1001)
203 write(*, 1002)
204 stop
1000 format(3d20.10, i5)
1001 format(' *** Read Error ***')
1002 format(' *** Data Not Found ***')
1010 format(/, ' *** Program D2h24(symOrb version)', /, ' *** for A2B4 type
      &molecule (e. g. C2H4)')
1020 format(/, 3x, ' Input Atomic Number (Z) (1 < Z < 94) of Central Atom A
      &, Z = ? ', $)
1030 format(/, 3x, ' Input Atomic Number (Z) (1 < Z < 94) of Terminal Atom
      &B, Z = ? ', $)
1040 format(/, 3x, ' Input Distance(angstrom), A - A = ? ', $)
1050 format(/, 3x, ' Input Distance(angstrom), A - B = ? ', $)
1060 format(/, 3x, ' Input Angle(degree) ( 0 deg.< Angle < 180 deg.), B-A-B
      & = ? ', $)
1510 format(/, ' *****')
1520 format(' *** Error *** Atomic Number (Z) (1 < Z < 94) ***')
1530 format(' *****', /)
1610 format(/, ' *****')
1620 format(' *** Error *** B-A-B ( 0 deg.< Angle < 180 deg.)')
1630 format(' *****', /)
2010 format(' | Z ||NEQ|| X || Y || Z |')
2020 format(2x, i3, 1x, i4, 3(f10.5))
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----

```

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--
2030 format('-----')
2040 format(' |NEQ|| CHG ||U/D|| RD || VD | 1')
2050 format(' 0 Unit (0:angstrom 1:atomic)')
2060 format(' 0 Spin (0:non-spin 1:spin )')
2070 format(' 0 M.P. (0:No 1:Yes )')
2080 format(' 20000 Sample Point ( <100000, =0 autoset )')
3010 format(' 8')
3020 format(' 1 1 1 1 1 1 1 1')
3030 format(' 1 1 1 1 1 1 1 1')
end
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7--

```

3-2. 【c:¥dvxa¥lscat¥d2h24n. bat】Open Watcom コンパイル実行ファイル (makefile)

```

-----1-----2-----3-----+
wfl386 /quiet /nowarnings d2h24n. f
-----1-----2-----3-----+

```

3-3. 【c:¥dvxa¥data¥d2h24】対称軌道ファイル (実数型球面調和関数の線形結合)

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8-----+
16 ag /z^2 D2h
0 2 1
0 1 4.000000 0 2 4.000000
1 2 1
0 1 4.000000 0 2 -4.000000
2 2 1
2 1 4.000000 2 2 4.000000
2 2 1
0 1 4.000000 0 2 4.000000
3 2 1
2 1 4.000000 2 2 -4.000000
3 2 1
0 1 4.000000 0 2 -4.000000
0 4 1
0 3 2.000000 0 4 2.000000 0 5 2.000000 0 6 2.000000
1 4 1
0 3 2.000000 0 4 2.000000 0 5 -2.000000 0 6 -2.000000
1 4 1
-1 3 2.000000 -1 4 -2.000000 -1 5 2.000000 -1 6 -2.000000
2 4 1
2 3 2.000000 2 4 2.000000 2 5 2.000000 2 6 2.000000
2 4 1
0 3 2.000000 0 4 2.000000 0 5 2.000000 0 6 2.000000
2 4 1
-1 3 2.000000 -1 4 -2.000000 -1 5 -2.000000 -1 6 2.000000
3 4 1
2 3 2.000000 2 4 2.000000 2 5 -2.000000 2 6 -2.000000
3 4 1
0 3 2.000000 0 4 2.000000 0 5 -2.000000 0 6 -2.000000
3 4 1
-1 3 2.000000 -1 4 -2.000000 -1 5 2.000000 -1 6 -2.000000
3 4 1
-3 3 2.000000 -3 4 -2.000000 -3 5 2.000000 -3 6 -2.000000
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8-----+

```

	1	2	3	4	5	6	7	8
8 b1g /xy								
2	2	1						
-2	1	4.000000	-2	2	4.000000			
3	2	1						
-2	1	4.000000	-2	2	-4.000000			
1	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	2.000000
2	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	-2.000000
2	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	2.000000	-2	5	2.000000
3	4	1						
3	3	2.000000	3	4	-2.000000	3	5	2.000000
3	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	2.000000
3	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	2.000000	-2	5	-2.000000
10 b2g /xz								
1	2	1						
1	1	4.000000	1	2	-4.000000			
2	2	1						
1	1	4.000000	1	2	4.000000			
3	2	1						
3	1	4.000000	3	2	-4.000000			
3	2	1						
1	1	4.000000	1	2	-4.000000			
1	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	-2.000000
2	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	2.000000
2	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	-2.000000	-2	5	-2.000000
3	4	1						
3	3	2.000000	3	4	2.000000	3	5	-2.000000
3	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	-2.000000
3	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	-2.000000	-2	5	2.000000
14 b3g /yz								
1	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	-4.000000			
2	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	4.000000			
3	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	-4.000000			
3	2	1						
-3	1	4.000000	-3	2	-4.000000			
0	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	-2.000000
1	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	2.000000
1	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	-2.000000
2	4	1						
2	3	2.000000	2	4	-2.000000	2	5	-2.000000
2	4	1						

	1	2	3	4	5	6	7	8
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	-2.000000
2	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	2.000000
3	4	1						
2	3	2.000000	2	4	-2.000000	2	5	2.000000
3	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	2.000000
3	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	-2.000000
3	4	1						
-3	3	2.000000	-3	4	2.000000	-3	5	-2.000000
8 au /xyz								
2	2	1						
-2	1	4.000000	-2	2	-4.000000			
3	2	1						
-2	1	4.000000	-2	2	4.000000			
1	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	-2.000000
2	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	2.000000
2	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	2.000000	-2	5	-2.000000
3	4	1						
3	3	2.000000	3	4	-2.000000	3	5	-2.000000
3	4	1						
1	3	2.000000	1	4	-2.000000	1	5	-2.000000
3	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	2.000000	-2	5	2.000000
16 b1u /z								
0	2	1						
0	1	4.000000	0	2	-4.000000			
1	2	1						
0	1	4.000000	0	2	4.000000			
2	2	1						
2	1	4.000000	2	2	-4.000000			
2	2	1						
0	1	4.000000	0	2	-4.000000			
3	2	1						
2	1	4.000000	2	2	4.000000			
3	2	1						
0	1	4.000000	0	2	4.000000			
0	4	1						
0	3	2.000000	0	4	2.000000	0	5	-2.000000
1	4	1						
0	3	2.000000	0	4	2.000000	0	5	2.000000
1	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	-2.000000	-1	5	-2.000000
2	4	1						
2	3	2.000000	2	4	2.000000	2	5	-2.000000
2	4	1						
0	3	2.000000	0	4	2.000000	0	5	-2.000000
2	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	-2.000000	-1	5	2.000000
3	4	1						
2	3	2.000000	2	4	2.000000	2	5	2.000000
3	4	1						

	1	2	3	4	5	6	7	8
0	3	2.000000	0	4	2.000000	0	5	2.000000
3	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	-2.000000	-1	5	-2.000000
3	4	1						
-3	3	2.000000	-3	4	-2.000000	-3	5	-2.000000
14	b2u /y							
1	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	4.000000			
2	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	-4.000000			
3	2	1						
-1	1	4.000000	-1	2	4.000000			
3	2	1						
-3	1	4.000000	-3	2	4.000000			
0	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	2.000000
1	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	-2.000000
1	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	2.000000
2	4	1						
2	3	2.000000	2	4	-2.000000	2	5	2.000000
2	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	2.000000
2	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	-2.000000
3	4	1						
2	3	2.000000	2	4	-2.000000	2	5	-2.000000
3	4	1						
0	3	2.000000	0	4	-2.000000	0	5	-2.000000
3	4	1						
-1	3	2.000000	-1	4	2.000000	-1	5	2.000000
3	4	1						
-3	3	2.000000	-3	4	2.000000	-3	5	2.000000
10	b3u /x							
1	2	1						
1	1	4.000000	1	2	4.000000			
2	2	1						
1	1	4.000000	1	2	-4.000000			
3	2	1						
3	1	4.000000	3	2	4.000000			
3	2	1						
1	1	4.000000	1	2	4.000000			
1	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	2.000000
2	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	-2.000000
2	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	-2.000000	-2	5	2.000000
3	4	1						
3	3	2.000000	3	4	2.000000	3	5	2.000000
3	4	1						
1	3	2.000000	1	4	2.000000	1	5	2.000000
3	4	1						
-2	3	2.000000	-2	4	-2.000000	-2	5	-2.000000

```
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8-----+
      symOrb v2.3d
** Nsym, Isym1, Jsym1 **
```

```
      8
      1   1   1   1   1   1   1   1
      1   1   1   1   1   1   1   1
```

D2h with angular momentum= {{0, 3}, {0, 3}}

Number of atoms= 6

Equivalent atoms

a01 a02

a03 a04 a05 a06

Positions of atoms

```
0  0          Hold[1.26517]  1
0  0          -Hold[1.26517] 2
0  Hold[1.79046] Hold[2.272]  3
0  -Hold[1.79046] Hold[2.272] 4
0  Hold[1.79046] -Hold[2.272] 5
0  -Hold[1.79046] -Hold[2.272] 6
```

D2h Positions of atoms

```
6
      0.0000000000      0.0000000000      1.2651700000      1      1
      0.0000000000      0.0000000000     -1.2651700000      1      2
      0.0000000000      1.7904600000      2.2720000000      2      3
      0.0000000000     -1.7904600000      2.2720000000      2      4
      0.0000000000      1.7904600000     -2.2720000000      2      5
      0.0000000000     -1.7904600000     -2.2720000000      2      6
```

```
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+-----8-----+
```

3-4. 【c:¥dvsxa¥exec¥d2h24n.bat】 プログラム全自動実行バッチファイル

```
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+
```

```
@echo off
if exist f01 goto err1
if exist f25 goto err2
%dvdir%¥object¥d2h24n.exe
copy %dvdir%¥data¥d2h24 f25
call %dvdir%¥exec¥makef05scfs
call %dvdir%¥exec¥existf05
if exist F05exist.txt goto fexist
goto err3
:fexist
del F05exist.txt
goto scattrun
:scattrun
```

```
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7-----+
```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
call %dmdir%\%exec%\dvscat
if exist converge.bat goto del1
goto cont1
:del1
del converge.bat
goto cont1
:cont1
if exist convd.txt goto del2
goto cont2
:del2
del convd.txt
goto cont2
:cont2
if exist notconv.txt goto del3
goto cont3
:del3
del notconv.txt
goto cont3
:cont3
call %dmdir%\%exec%\cnvchk150
call converge.bat
if exist convd.txt goto cont4
if exist notconv.txt goto cont4
del converge.bat
goto scatrun
:cont4
del converge.bat
call %dmdir%\%exec%\contrdall
dir/w *.sca
call %dmdir%\%exec%\netc
call %dmdir%\%exec%\bndodr
call %dmdir%\%exec%\popanls
rename F08P F08P_S
call %dmdir%\%exec%\popanl
call %dmdir%\%exec%\atlist >atlist.out
call %dmdir%\%exec%\bllist >bllist.out
call %dmdir%\%exec%\prests
call %dmdir%\%exec%\wavnum <%dmdir%\%data%\zero
call %dmdir%\%exec%\make104 <%dmdir%\%data%\three
call %dmdir%\%exec%\lvlshn
call %dmdir%\%exec%\hlgap
call %dmdir%\%exec%\hlgaps
type i08
type f08e
if exist notconv.txt goto notconv
del convd.txt
goto end
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
: notconv
echo;
echo *****
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
echo *****
echo *** SCAT (NonSpin version) has not been converged yet. ***
echo *****
echo *** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ** WARNING ***
echo *****
del notconv.txt
goto end
:err1
echo ***ERROR*** f01 already exist
goto end
:err2
echo ***ERROR*** f25 already exist
goto end
:err3
echo ***ERROR*** F05 not exist
goto end
:end

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

3-5. 【c:\¥dvxa¥Macros¥eduDV.mac】 eduDV メニュー秀丸エディタマクロ

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

```

menu
"01. D $\infty$ h 対称 【等核二原子分子】 A2 型分子 (H2, O2, N2 など)...",
"02. C $\infty$ v 対称 【異核二原子分子】 AB 型分子 (一酸化炭素や塩化水素など)...",
"03. D $\infty$ h 対称 【直線 AB2 型分子】 B-A-B 型分子 (二酸化炭素など)...",
"04. D $\infty$ h 対称 【直線 A2B2 型分子】 B-A-A-B 型分子 (アセチレンなど)...",
"05. C $\infty$ v 対称 【直線 ABC 型分子】 A-B-C 型分子 (シアン化水素など)...",
"06. C $\infty$ v 対称 【直線 ABCD 型分子】 A-B-C-D 型分子 (HCNO など)...",
"07. C2v 対称 【折れ線 AB2 型分子】 AB2 型分子 (水や硫化水素など)...",
"08. C3v 対称 【三角錐 AB3 型分子】 AB3 型分子 (アンモニアなど)...",
"09. D2h 対称 【エチレン型分子】 A2B4 型分子 (エチレンなど)...",
"10. D3h 対称 【平面正三角形型分子】 AB3 型分子 (三フッ化ホウ素など)...",
"11. D4h 対称 【平面正四角形型分子】 AB4 型錯イオン ([PtCl4]2- など)...",
"12. D6h 対称 【平面正六角形型分子】 A6B6 型分子 (ベンゼンなど)...",
"13. Td 対称 【正四面体型分子】 AB4 型分子 (メタンや四塩化炭素など)...",
"14. Oh 対称 【正八面体型分子】 AB6 型分子 (六フッ化硫黄など)...",
"15. Td 対称 【正四面体型分子】 [A(BC)4] 型錯体 ([Ni(CO)4] など)...",
"16. Oh 対称 【正八面体型分子】 [A(BC)6] 型錯体 ([Cr(CO)6] など)...",
"17. D2h 対称 【正八面体型】 [M(H2O)6]n+ アクア錯イオン...",
"18. Td 対称 【正四面体型】 [M(L)4]n+ or [M(L)4]n- 錯イオン...",
"19. Oh 対称 【正八面体型】 [M(L)6]n+ or [M(L)6]n- 錯イオン...",
"20. 対称なし 【単原子】 原子軌道関数を見るときなどに便利です...",
"21. 対称なし 【単原子イオン】 原子軌道関数を見るときなどに便利です...",

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
;
if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥a2menu.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abmenu.mac";
else if(result==3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ab2menu.mac";
else if(result==4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥a2b2menu.mac";
else if(result==5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abcmenu.mac";
else if(result==6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥abcdmenu.mac";
else if(result==7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c2v12menu.mac";
else if(result==8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥c3v13menu.mac";
else if(result==9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d2h24menu.mac";
else if(result==10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d3h13menu.mac";
else if(result==11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d4h14menu.mac";
else if(result==12)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d6h66menu.mac";
else if(result==13)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥td14menu.mac";
else if(result==14)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥oh16menu.mac";
else if(result==15)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥td144menu.mac";
else if(result==16)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥oh166menu.mac";
else if(result==17)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥mh2o6menu.mac";
else if(result==18)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ml4menu.mac";
else if(result==19)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ml6menu.mac";
else if(result==20)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥atommenu.mac";
else if(result==21)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥ionmenu.mac";
;
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

3-6. 【c:¥dvxa¥Macros¥eduDV¥d2h24menu.mac】 d2h24 メニュー秀丸エディタマクロ

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
menu "d2h24n (ノンスピン版・全自動実行)...",
"d2424s (スピン版・全自動実行)...",
"d2h24 (F01・F25 作成のみ)...";
if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d2h24n.mac";
else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d2h24s.mac";
else if(result==3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥d2h24.mac";
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

3-7. 【c:¥dvxa¥Macros¥eduDV¥d2h24n.mac】 ノンスピン全自動秀丸エディタマクロ

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
loadll hidemarudir + "¥¥DengakuDLL.dll"; // 田楽 DLL のロード
if (!result) {
    message "DengakuDLL.dll をロードできませんでした。 ";
    endmacro;
}
$path_dvdir = getenv("dvdir");
$dirname = "d2h24n_" + year + month + day + hour + minute + second;
if (!dllfunc("MKDIR", "/p " + $path_dvdir + "¥¥CALC¥¥" + $dirname)) {
    message "新規フォルダの作成に失敗しました。 ";
    endmacro;
}
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

```

-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7
if (!dllfunc("SETCURDIR", $path_dvdir + "¥¥CALC¥¥" + $dirname)) {
    message "新規フォルダに移動できませんでした. ";
    endmacro;
}
runsync2 $path_dvdir + "¥¥EXEC¥¥D2H24N.BAT"; // 分子軌道計算システム eduDV
の D2H24N.BAT の実行
openfile "F01";
readonlyopenfile "F06Z";
readonlyopenfile "BN8";
readonlyopenfile "I08";
readonlyopenfile "F08P";
readonlyopenfile "F08P_S";
readonlyopenfile "F08E.hlgaps";
readonlyopenfile "F08E";
endmacro;
-----+-----1-----+-----2-----+-----3-----+-----4-----+-----5-----+-----6-----+-----7

```

4. コンパイル

Windows のコマンドプロンプト画面で

```
C:¥dvxa>setdvxa.bat[Enter] (C:¥dvxa>setdvxa[Enter]と打ち込んでも同じ)
```

```
C:¥dvxa>makedv d2h24[Enter]
```

```
C:¥dvxa>makedv d2h24n[Enter]
```

```
C:¥dvxa>makedv d2h24s[Enter]
```

と打ち込めば, Open Watcom Fortran77 Version 1.9 コンパイラーによるコンパイル作業が終了し,

```
C:¥dvxa¥object¥d2h24.exe
```

```
C:¥dvxa¥object¥d2h24n.exe
```

```
C:¥dvxa¥object¥d2h24s.exe
```

ができあがる.

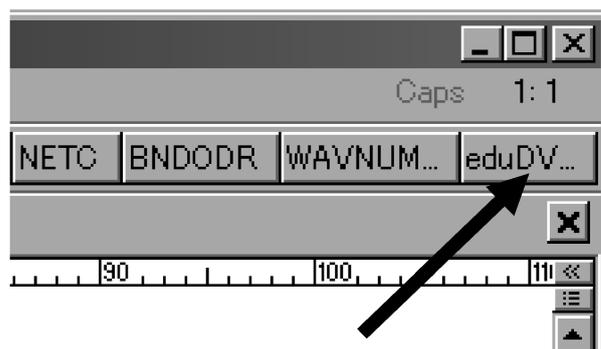


図 1. 【eduDV...】 ボタン

5. 使用方法 (例: エチレン分子の電子状態計算)

① “DV-X α 法のための統合支援環境” [4]が構築されている Windows パソコンにて, 秀丸エディタを立ち上げる. なお, 本学の学生実習用パソコンは起動するたびにハードディスク内容が初期状態に戻るの
ので, 秀丸エディタを他用途で使う場合を想定し, DV-X α 法計算支援環境の C:¥dvxa ¥Macros¥SCAT.reg
を秀丸エディタで読み込む作業は毎回行う必要がある. 秀丸エディタのその他(O)→設定内容の保存/復元
(U)...で SCAT.reg を読み込むと, 教育用分子軌道計算システム eduDV が実行できる状態になる.

②秀丸エディタの上右端のボタン【eduDV...】(図1)をクリックすると、21項目のプルダウンメニュー(図2)が現れる。09. D_{2h}対称【エチレン型分子】A₂B₄型分子(エチレンなど)... を選択する。

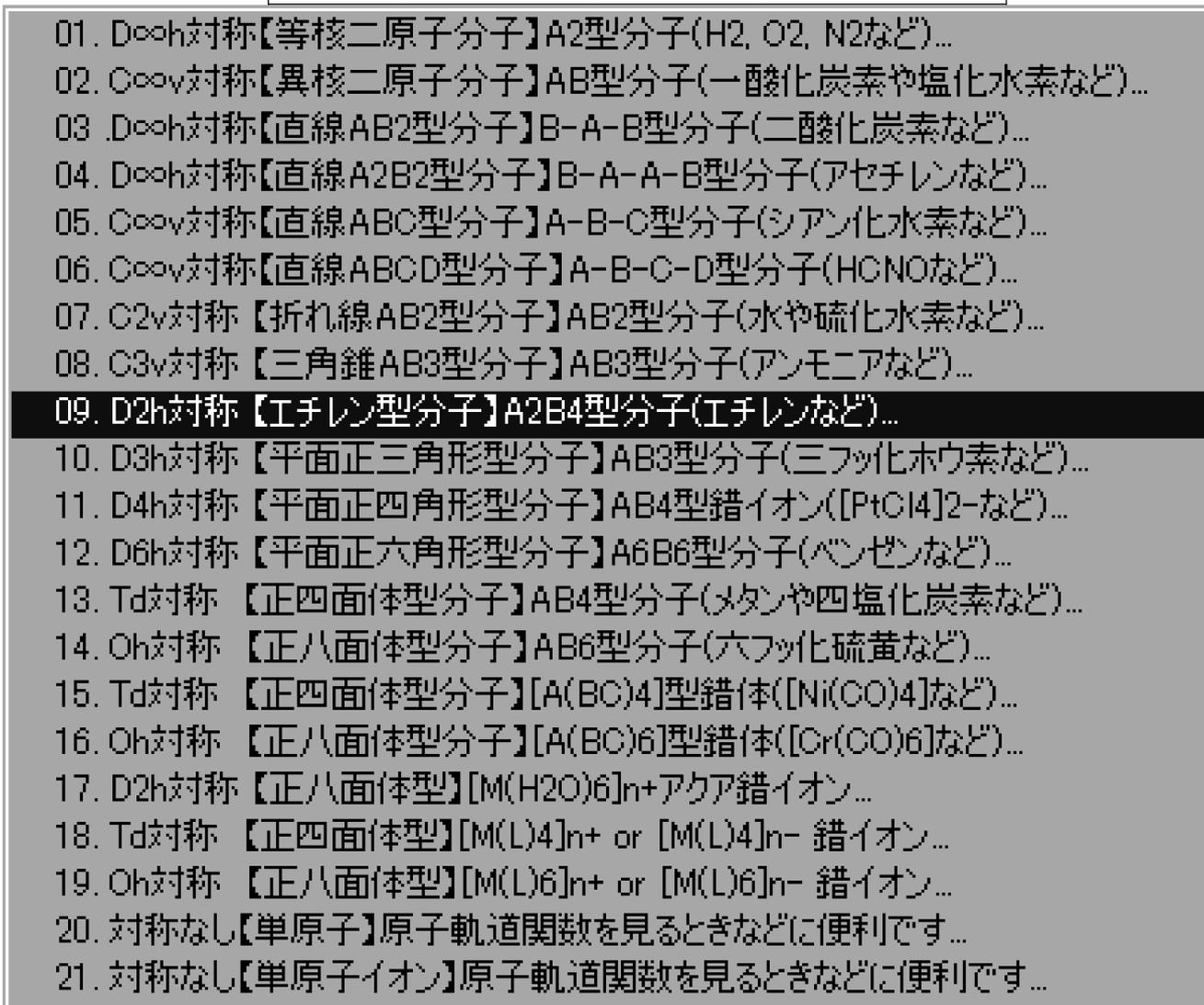


図2. eduDVのプルダウンメニュー

③すると図3のようにプルダウンメニューでスピン分極は考慮しないDV-X α 法分子軌道計算(ノンスピ版SCAT)を全自動で実行するのか, スピン分極を考慮したDV-X α 法分子軌道計算(スピン版SCAT)を全自動で実行するのか, それともDV-X α 法分子軌道計算は実行せずに, その入力ファイル(座標と原子番号が書かれた入力ファイルF01と, 対称軌道(実数型球面調和関数の線形結合式)が書かれた入力ファイルF25)を準備するだけの作業を行うのかを訊いてくる。ここでは

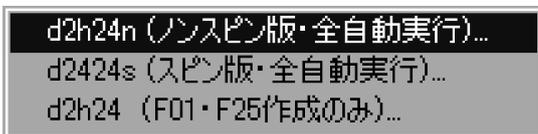


図3. d2h24メニュー

d2h24n(ノンスピ版・全自動実行)... を選択する。

④会話式で原子番号や原子間距離・角度を以下のように入力する(図4)。

なおエチレン分子の場合, 炭素(C)の原子番号は6, 水素(H)の原子番号は1, C-C間の原子間距離は1.339 Å, C-H間の原子間距離は1.087 Å, のH-C-Hの原子間角度(\angle HCH)は121.3°である[17]。

```

C:\WINDOWS\system32\cmd.exe

*** Program D2h24(sym0rb version)
*** for A2B4 type molecule (e. g. C2H4)

Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Central Atom A, Z = ? 6
Input Atomic Number(Z) (1 < Z < 94) of Terminal Atom B, Z = ? 1
Input Distance(angstrom), A - A = ? 1.339
Input Distance(angstrom), A - B = ? 1.087
Input Angle(degree)( 0 deg.< Angle < 180 deg.), B-A-B = ? 121.3
    
```

図4. プログラム d2h24n 実行画面

⑤DV-X α 法分子軌道計算 (ノンスピ版 SCAT) が実行され, マリケン・ポピュレーション・アナリシスを使ったセルフ・コンシステントな方法 (セルフ・コンシステント・チャージ法) で各原子軌道の電子数がセルフ・コンシステントになるまで繰り返し計算が行われ (この場合は 26 サイクルで収束する), 各分子軌道のエネルギー固有値表 (f08e) が秀丸エディタ画面に出力される (表1).

表1. エチレンの分子軌道エネルギー固有値表

f01 f06z bn8 i08 f08p F08P_S F08Ehlgaps f08e						
MO	Occupancy	Symmetry	(RY)	(HR)	(EV)	Occupancy
1	↓					
2	↓					
3	↓					
4	↓					
5	↓					
6	↓					
7	↓					
8	1	1 ag	-19.12137	-9.56069	-260.11814	2.00000↓
9	2	1 b1u	-19.11995	-9.55997	-260.09879	2.00000↓
10	3	2 ag	-1.14682	-0.57341	-15.60085	2.00000↓
11	4	2 b1u	-0.81988	-0.40994	-11.15323	2.00000↓
12	5	1 b2u	-0.65510	-0.32755	-8.91172	2.00000↓
13	6	3 ag	-0.49652	-0.24826	-6.75442	2.00000↓
14	7	1 b3g	-0.42771	-0.21386	-5.81840	2.00000↓
15	8	1 b3u	-0.21721	-0.10860	-2.95482	2.00000↓
16	9	1 b2g	0.31794	0.15897	4.32505	0.00000↓
17	10	2 b2u	0.88390	0.44195	12.02418	0.00000↓
18	11	4 ag	0.88691	0.44345	12.06507	0.00000↓
19	12	3 b1u	0.92814	0.46407	12.62605	0.00000↓
20	13	2 b3g	1.36072	0.68036	18.51062	0.00000↓
21	14	4 b1u	1.44265	0.72133	19.62515	0.00000↓

表1では、各分子軌道のエネルギー固有値が左より、リュードベリ (rydberg, Ry), ハートリー (hartree, hr), エレクトロンボルト (electron volt, eV) で示されている。右端の数字は、各分子軌道における占有電子数である。すでに秀丸エディタ画面に出力されているポピュレーション解析プログラム (POPANL) の出力 (f08p) (表2) を見れば、各分子軌道がどの原子 (炭素または水素) のどの原子軌道 (C-1s, C-2s, C-2p, H-1s) から構成されているかを読みとることができる。

表2. エチレンの分子軌道のポピュレーション解析結果

```

-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  ag  FOR  LEVEL
E( 1)  -260.1181 EV
( 1 1s) 0.9999 ( 1 2s) 0.0001 ( 1 2p) 0.0001 ( 2 1s) 0.0001
E( 2)  -15.6008 EV
( 1 1s) 0.0000 ( 1 2s) 0.7117 ( 1 2p) 0.0636 ( 2 1s) 0.2247
E( 3)  -6.7544 EV
( 1 1s) 0.0000 ( 1 2s) 0.0006 ( 1 2p) 0.7311 ( 2 1s) 0.2683
E( 4)  12.0651 EV
( 1 1s) 0.0002 ( 1 2s) 0.2878 ( 1 2p) 0.2052 ( 2 1s) 0.5069
CHRG OF  ag  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 1s 0) 1.9997 ( 1 2s 0) 1.4245 ( 1 2p 0) 1.5897 ( 3 1s 0) 0.9862 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
(1) 4.7037
(3) 0.6202 0.6760
-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  b1g  FOR  LEVEL
CHRG OF  b1g  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  b2g  FOR  LEVEL
E( 1)  4.3250 EV
( 1 2p) 1.0000 (
CHRG OF  b2g  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 2p 1) 0.0000 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  b3g  FOR  LEVEL
E( 1)  -5.8184 EV
( 1 2p) 0.3918 ( 2 1s) 0.6082 (
E( 2)  18.5106 EV
( 1 2p) 0.6082 ( 2 1s) 0.3918 (
CHRG OF  b3g  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 2p-1) 0.7836 ( 3 1s 0) 1.2164 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
(1) 0.4232
(3) 0.7209 0.8559
-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  au  FOR  LEVEL
CHRG OF  au  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF  b1u  FOR  LEVEL
E( 1)  -260.0988 EV
( 1 1s) 0.9998 ( 1 2s) 0.0001 ( 1 2p) 0.0000 ( 2 1s) 0.0001
E( 2)  -11.1532 EV
( 1 1s) 0.0000 ( 1 2s) 0.3773 ( 1 2p) 0.1758 ( 2 1s) 0.4469
E( 3)  12.6260 EV
( 1 1s) 0.0002 ( 1 2s) 0.4028 ( 1 2p) 0.0580 ( 2 1s) 0.5390
E( 4)  19.6251 EV
( 1 1s) 0.0001 ( 1 2s) 0.2198 ( 1 2p) 0.7662 ( 2 1s) 0.0140
CHRG OF  b1u  BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 1s 0) 1.9995 ( 1 2s 0) 0.7548 ( 1 2p 0) 0.3517 ( 3 1s 0) 0.8940 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
(1) 2.7100
(3) 0.7919 0.4981
-----

```

```

-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF b2u FOR LEVEL
E( 1) -8.9117 EV
( 1 2p) 0.5663 ( 2 1s) 0.4337 (
E( 2) 12.0242 EV
( 1 2p) 0.4337 ( 2 1s) 0.5663 (
CHRG OF b2u BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 2p-1) 1.1327 ( 3 1s 0) 0.8673 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
( 1) 0.7565
( 3) 0.7523 0.4912
-----
    
```

```

-----
MULLIKEN POPULATION ANALYSIS OF b3u FOR LEVEL
E( 1) -2.9548 EV
( 1 2p) 1.0000 (
CHRG OF b3u BLOCK
NO. OF ELECTRONS IN I ORBITAL OF X ATOM
( 1 2p 1) 2.0000 (
CHRG(X ATOM, Y ATOM)
( 1) 2.0000
-----
    
```

表 1 と表 2 を読みとった結果を分かりやすいように整理しなおすと、表 3 のようになる。

表 3. エチレンの分子軌道計算結果

M.O.	eV	電子数	C-1s	C-2s	C-2p	H-1s
4b _{1u} (LUMO+5)	19.625	0	0.01%	21.98%	76.62%	1.40%
2b _{3g} (LUMO+4)	18.511	0	—	—	60.82%	39.18%
3b _{1u} (LUMO+3)	12.626	0	0.02%	40.28%	5.80%	53.90%
4a _g (LUMO+2)	12.065	0	0.02%	28.78%	20.52%	50.69%
2b _{2u} (LUMO+1)	12.024	0	—	—	43.37%	56.63%
1b _{2g} (LUMO)	4.325	0	—	—	100.00%	—
1b _{3u} (HOMO)	-2.955	2	—	—	100.00%	—
1b _{3g} (HOMO-1)	-5.818	2	—	—	39.18%	60.82%
3a _g (HOMO-2)	-6.754	2	0.00%	0.06%	73.11%	26.83
1b _{2u} (HOMO-3)	-8.912	2	—	—	56.63%	43.37%
2b _{1u} (HOMO-4)	-11.153	2	0.00%	37.73%	17.58%	44.69%
2a _g (HOMO-5)	-15.601	2	0.00%	71.17%	6.36%	22.47%
1b _{1u} (HOMO-6)	-260.099	2	99.98%	0.01%	0.00%	0.01%
1a _g (HOMO-7)	-260.118	2	100.00%	0.00%	0.00%	0.00%

⑥表 3 の内容を直感的に理解するために、それぞれの分子軌道の成分を図示するプログラム LVLSHM を実行する. eduDV では LVLSHM の入力ファイル L04, L05 が自動的に準備されて、LVLSHM が実行されているので、秀丸エディタの【DV PLOT】ボタンをクリックして L07 を選択するだけで図を表示することができる. ここでは以下のように L04, L05 を編集してから改めて【LVLSHM】ボタンをクリックして LVLSHM を再実行し、図を作成した (図 5).

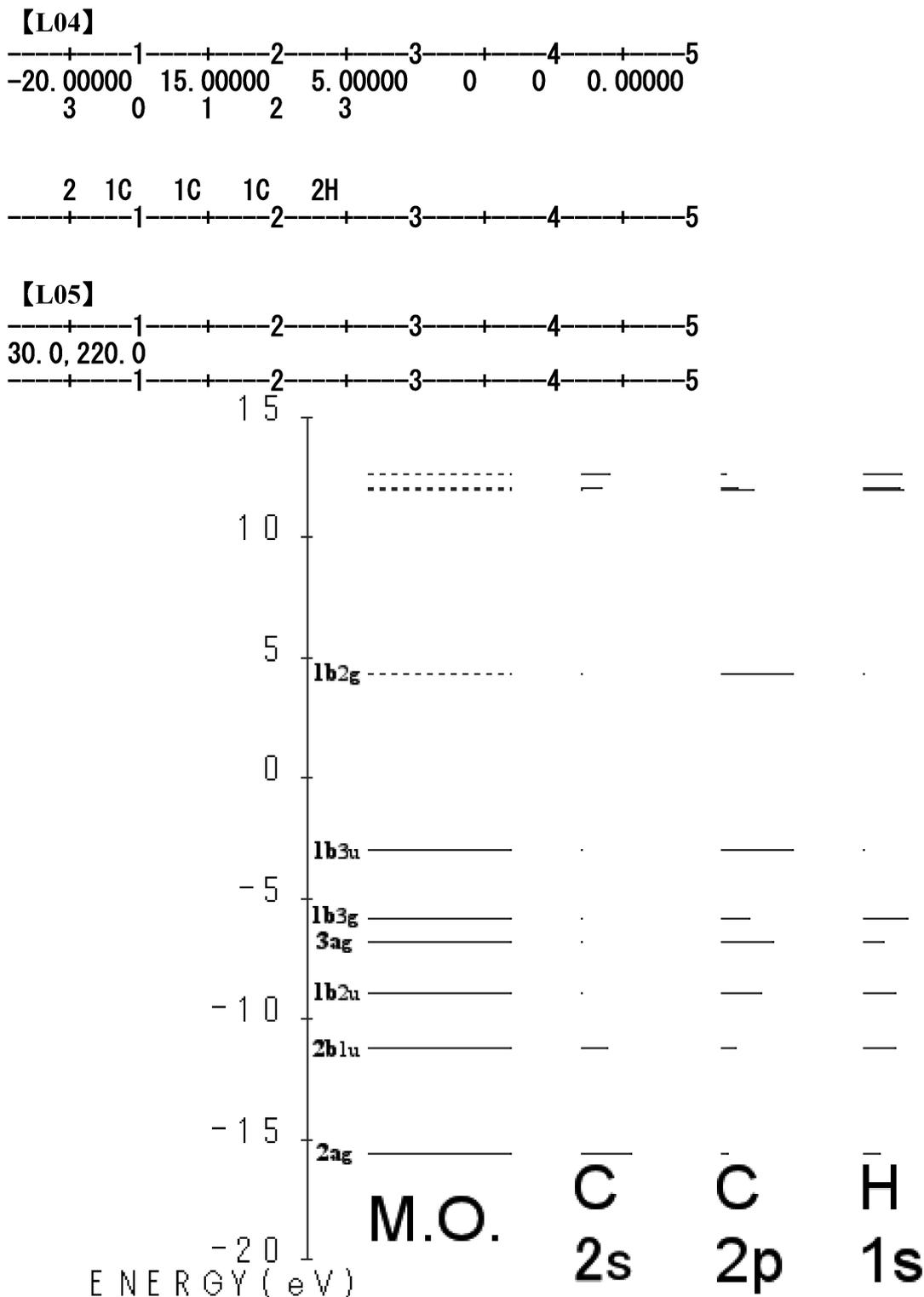


図 5. エチレンの分子軌道エネルギー準位図

⑦eduDVでは、全分子軌道(波動関数)および電子密度、静電ポテンシャルについて、VESTAで読めるデータファイルを作成するプログラム(CONTRDALL)が全自動で実行されている。秀丸エディタのF01タブをつまんで(クリックして)をアクティブにし、【VESTA】ボタンをクリックすればVESTAが立ち上がる。その後の操作の詳細についてはマニュアル[7]を参照されたし。全分子軌道の等値表面図(図6～図19)、静電ポテンシャルマップ(図20)を示す。

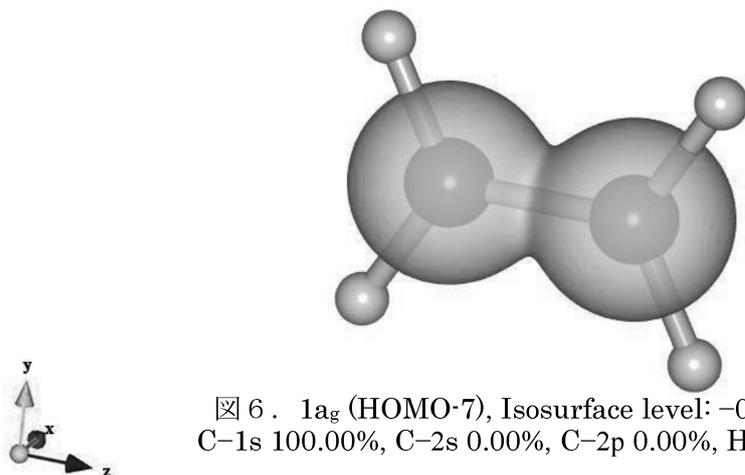


図6. $1a_g$ (HOMO-7), Isosurface level: $-0.005a_0^{-3/2}$
C-1s 100.00%, C-2s 0.00%, C-2p 0.00%, H-1s 0.00%

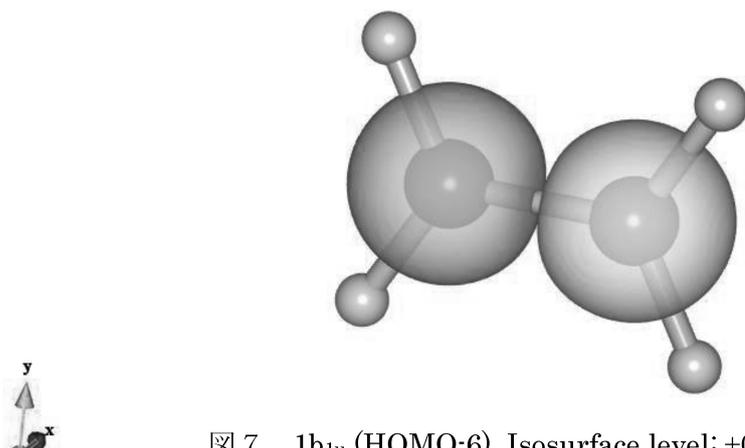


図7. $1b_{1u}$ (HOMO-6), Isosurface level: $\pm 0.005a_0^{-3/2}$
C-1s 99.98%, C-2s 0.01%, C-2p 0.00%, H-1s 0.01%

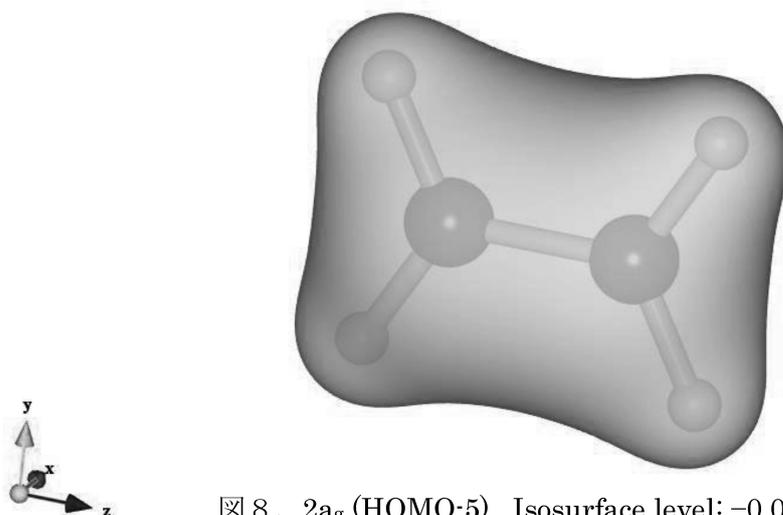


図8. $2a_g$ (HOMO-5), Isosurface level: $-0.05a_0^{-3/2}$
C-1s 0.00%, C-2s 71.17%, C-2p 6.36%, H-1s 22.47%

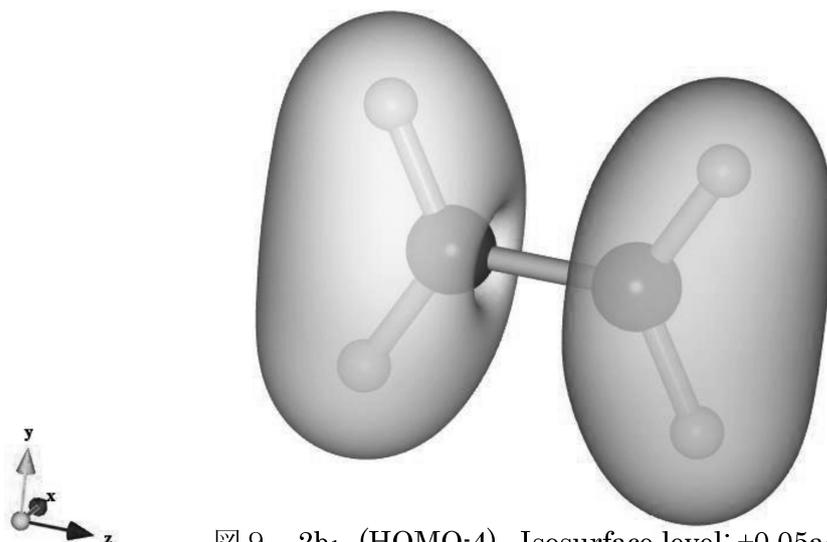


図 9 . $2b_{1u}$ (HOMO-4) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
C-1s 0.00%, C-2s 37.73%, C-2p 17.58%, H-1s 44.69%

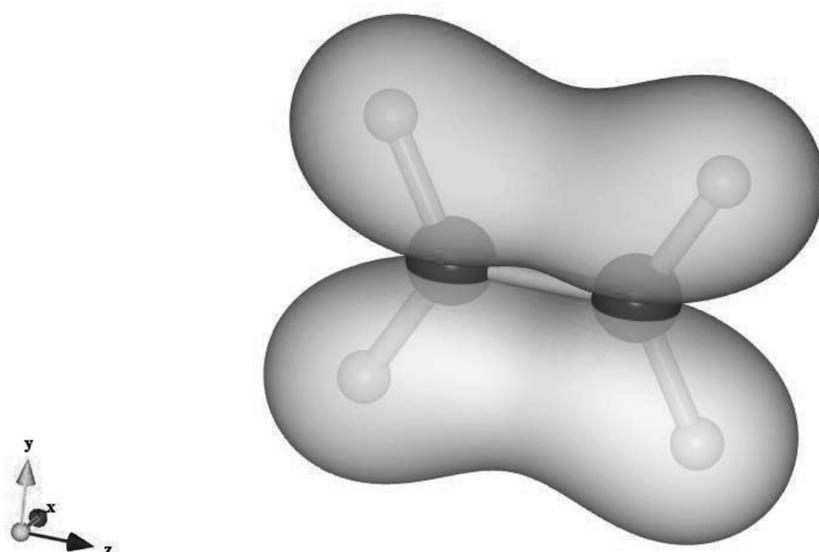


図 1 0 . $1b_{2u}$ (HOMO-3) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
C-2p 56.63%, H-1s 43.37%

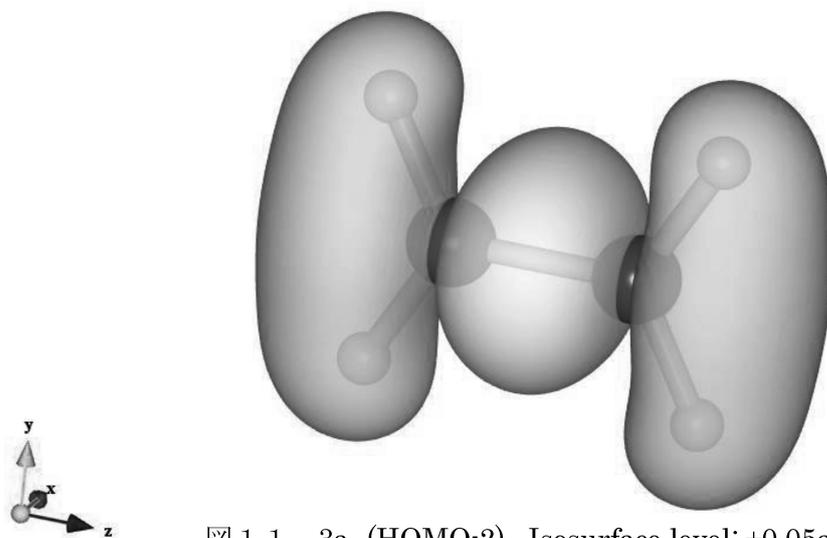


図 1 1 . $3a_g$ (HOMO-2) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
C-1s 0.00%, C-2s 0.06%, C-2p 73.11%, H-1s 26.83%

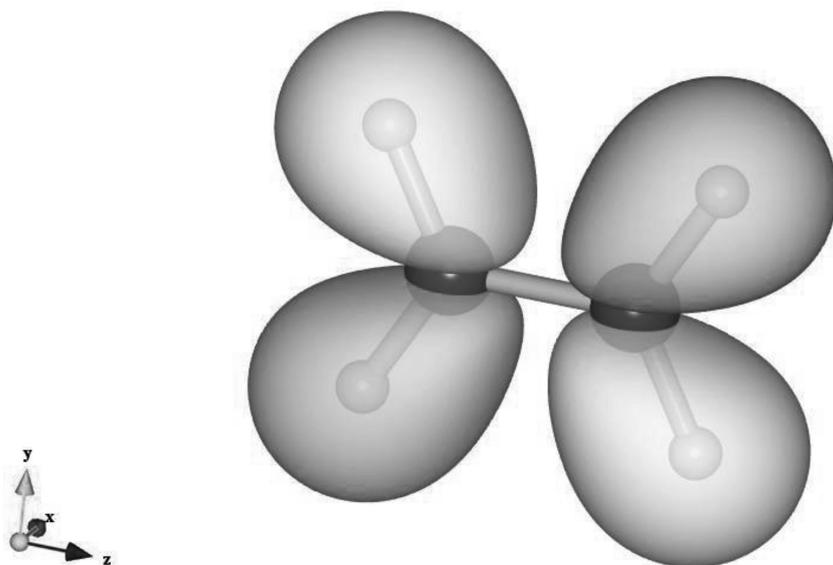


図 1 2 . $1b_{3g}$ (HOMO-1) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
 C-2p 39.18%, H-1s 60.82%

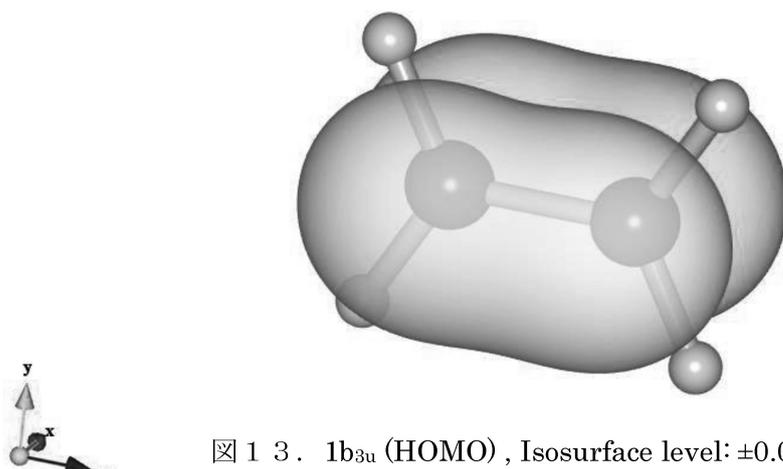


図 1 3 . $1b_{3u}$ (HOMO) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
 C-2p 100.00%

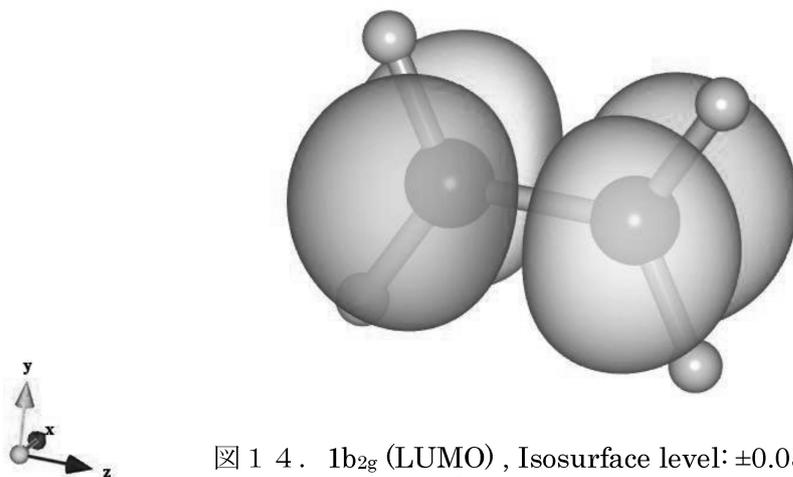


図 1 4 . $1b_{2g}$ (LUMO) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
 C-2p 100.00%

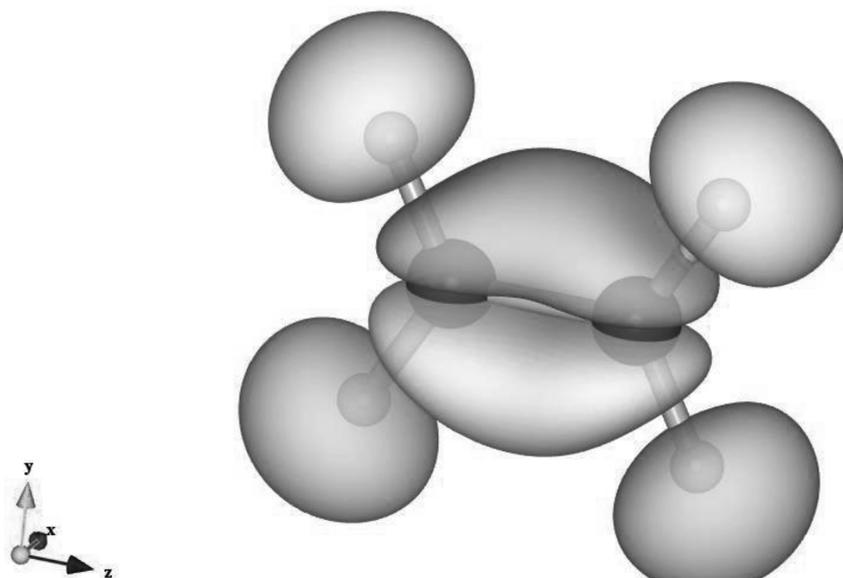


図 1 5 . $2b_{2u}$ (LUMO+1) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$, C-2p 43.37%, H-1s 56.63%

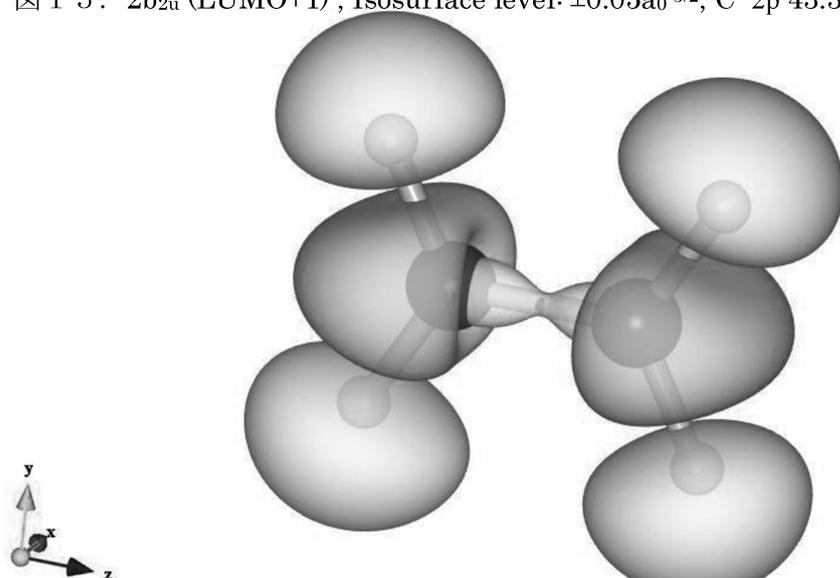


図 1 6 . $4a_g$ (LUMO+2) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$, C-1s 0.02%, C-2s 28.78%, C-2p 20.52%, H-1s 50.69%

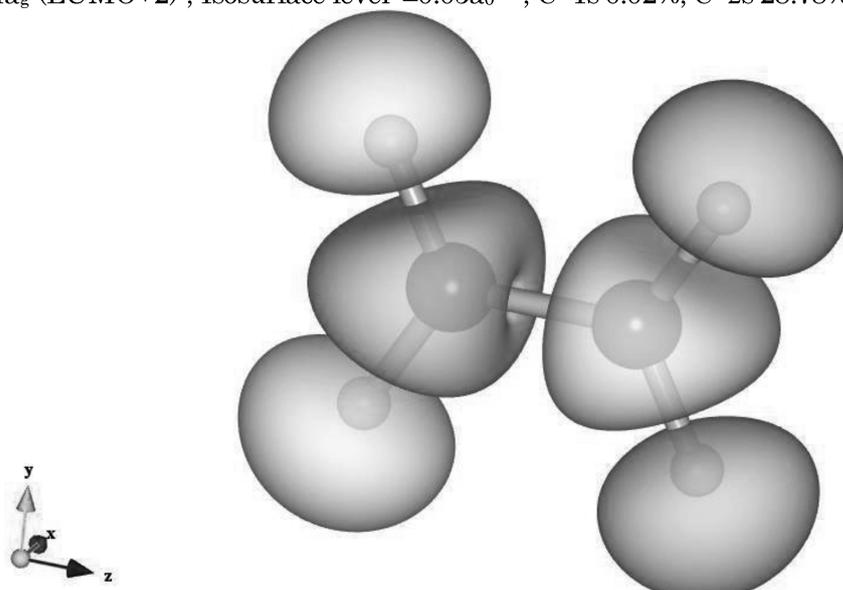


図 1 7 . $3b_{1u}$ (LUMO+3) , Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$, C-1s 0.02%, C-2s 40.28%, C-2p 5.80%, H-1s 53.90%

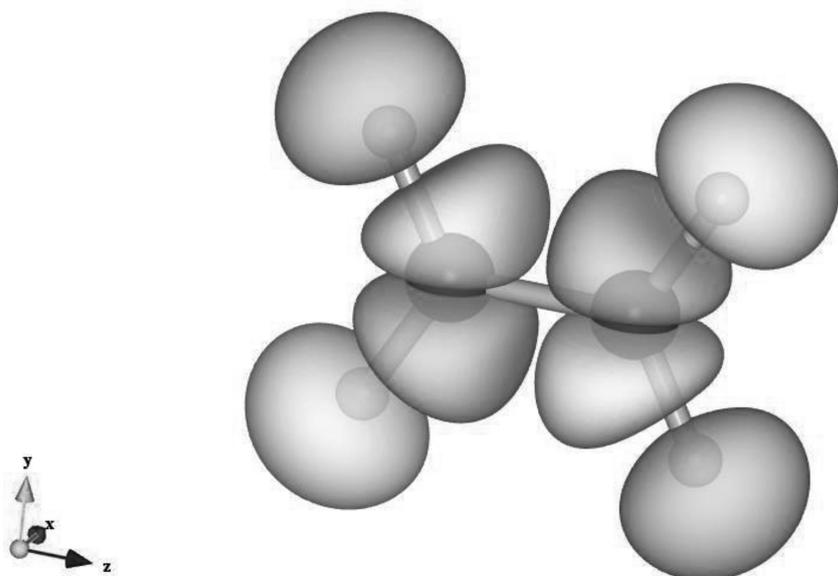


図 1 8 . $2b_{3g}$ (LUMO+4), Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
 C-2p 60.82%, H-1s 39.18%

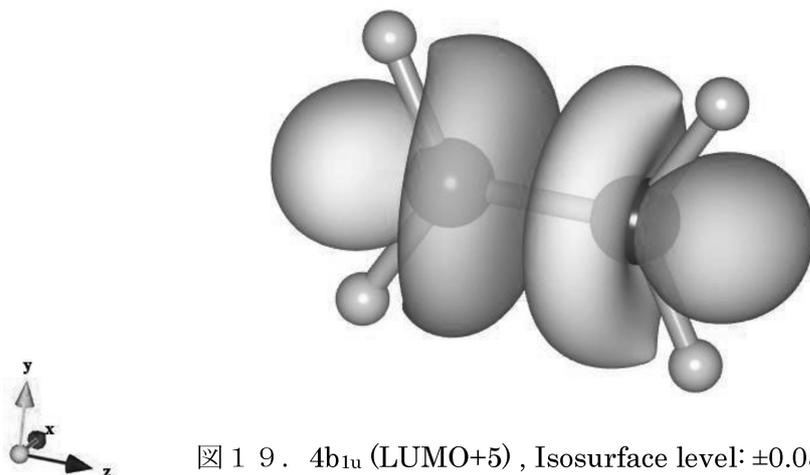


図 1 9 . $4b_{1u}$ (LUMO+5), Isosurface level: $\pm 0.05a_0^{-3/2}$
 C-1s 0.01%, C-2s 21.98%, C-2p 76.62%, H-1s 1.40%

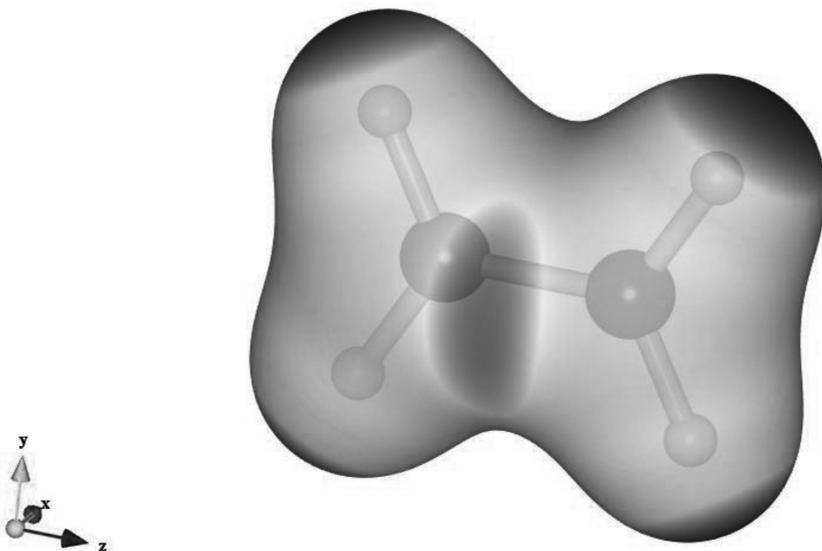


図 2 0 . 静電ポテンシャルマップ(電子密度の isosurface level: $0.02 a_0^{-3}$)

6. まとめ

エチレン型 A_2B_4 型 (D_{2h} 対称) 分子が計算できるプログラム $d2h24$ シリーズ ($d2h24n$, $d2h24s$, $d2h24$) を開発し, 教育用分子軌道計算システム $eduDV$ に組み込むことに成功した. エチレンはもとより, この形の分子であれば (原子間距離と角度の実験データは調べる必要がある) 他の分子 (例えば酸化剤としてロケットエンジンの推進剤として利用されている四酸化二窒素 N_2O_4 や, 繊維や金属の洗浄に用いられているテトラクロロエチレン C_2Cl_4 など) でもエチレンと同じ手順で電子状態を計算することができる.

炭素-炭素間の多種多様な結合パターンの代表例として, $eduDV$ では共役系 1.5 重結合のベンゼン (C_6H_6 , D_{6h} 対称), 二重結合のエチレン (C_2H_4 , D_{2h} 対称), 三重結合のアセチレン (C_2H_2 , $D_{\infty h}$ 対称) を取り扱えるようになった. 残る単結合のエタン (C_2H_6 , D_{3d} 対称) が計算できるプログラム $d3d26$ を前述のように来年度開発できれば, 炭素-炭素間の多種多様な結合の学習が量子化学の立場からできるようになる.

参考文献・URL

- [1] 坂根弦太, “DV- $X\alpha$ 分子軌道計算プログラムと三次元可視化システム VENUS の大学基礎化学教育での活用”, 日本教育情報学会第 22 回年会 (岡山) 論文集, 2D3, 198-199 (2006).
- [2] 坂根弦太, 小和田善之, “教育用 F01・F25 準備システム $eduDV$ と錯体計算用 F05 準備システム MAKEF05SCFS”, *Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$* , 20(1&2), 247-251, (2007).
- [3] 門馬綱一, 泉富士夫, 坂根弦太, “3 次元可視化システム VESTA と DV- $X\alpha$ 法計算支援環境の開発”, *Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$* , 20(1&2), 252-253, (2007).
- [4] Genta Sakane, Koichi Momma, Fujio Izumi, “Building of an Integrated Assistance Environment for the DV- $X\alpha$ Method”, 7th Award for Distinguished Contributions, Memorial Award Lecture, *Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$* , 21(1&2), 13-17, (2008).
- [5] 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム $eduDV$ の開発”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, 31, 9-17, (2010).
- [6] 坂根弦太, “化学が大好きな高校生・大学生のみなさんへ, 分子軌道計算を今すぐ始めよう!, 教科書に出てくる原子, 分子, 錯体の楽しい電子状態計算~パソコンで簡単に始められる周期表の全元素を対象とした分子軌道計算~, <http://www.chem.ous.ac.jp/%7Eegsakane/fun/index.html#edudv>
- [7] 坂根弦太, “はじめての DV- $X\alpha$ 法分子軌道計算支援環境-タブエディタ (秀丸エディタ) 上で使う DV- $X\alpha$ 法計算支援環境利用の手引き-”, 1-146, (2010), <http://www.chem.ous.ac.jp/%7Eegsakane/HidemaruDV/HidemaruDV.pdf>
- [8] 坂根弦太, “人材育成のための授業紹介, 化学, 教育用分子軌道計算システム $eduDV$ を利用した電子についての基礎化学教育”, *JUCE Journal (大学教育と情報)*, 18 (4), 15 (2010), http://www.juce.jp/LINK/journal/1002/03_03.html
- [9] Hirohiko Adachi, Masaru Tsukada, Chikatoshi Satoko, “Discrete variational $X\alpha$ cluster calculations. I. Application to metal clusters”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 45(3), 875-883 (1978).
- [10] 足立裕彦監修, 小和田善之, 田中功, 中松博英, 水野正隆共著, “はじめての電子状態計算 ■DV- $X\alpha$ 分子軌道計算への入門■”, 三共出版, 1-190, (1998).
- [11] 小和田善之, 山田善信, “はじめての電子状態計算 ■DV- $X\alpha$ 分子軌道計算への入門■”, ダウンロード・ページ, 次世代版 $dvscat$ プログラム, $dvxa_v1_04$, <http://chem.sci.hyogo-u.ac.jp/hajimete/download.html>
- [12] 有限会社サイト企画, “秀まるおのホームページ”, ソフトウェア, 秀丸エディタ, <http://hide.maruo.co.jp/software/hidemaru.html>
- [13] 泉富士夫, “泉 富士夫の粉末回折情報館”, 3D Visualization System VENUS, 11.1.2 The assistance environment for the DV- $X\alpha$ method, http://homepage.mac.com/fujioizumi/visualization/VENUS.html#assistance_environment
- [14] Koichi Momma, Fujio Izumi, “VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis”, *Journal of Applied Crystallography*, 41(3), 653-658 (2008), <http://dx.doi.org/10.1107/S0021889808012016>
- [15] 門馬綱一, “JP-Mineral”, Software, VENUS system, VESTA(Visualization for Electronic and Structural Analysis), http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html
- [16] Open Watcom, version 1.9, <http://www.openwatcom.org/>
- [17] 日本化学会編纂, 化学便覧基礎編 改訂 5 版, 第 II 巻, 16.1 分子構造, 表 16.3 有機化合物の構造定数, p. II-802, 丸善, 2004 年, 化学書資料館, <https://www.chem-reference.com/>

学士力を保証するための英語 e-Learning 構築のシステム設計

情報処理センター

岩崎彰典

秋田県立大学総合科学教育研究センター

岡崎弘信

環太平洋大学次世代教育学部

木戸和彦

1. はじめに

大学全入時代の到来により学生は多様化し、一方で「学士力の保障」も求められている。英語力の「学士力の保障」のためには、個々の学習者の弱点をリアルタイムに把握・記録し、次の学習ステップを提示できるような e-Learning システム——総合評価だけでなく具体的な語彙数、語彙難度、リーディングスピードなどで個別に診断し医師のように学習者の処方を行うシステム——が効果的である。すでにリスニングに関しては、岡崎が「PLIAM(your Personal Listening Manager)」を開発している[1]。また、リーディング用の e-Learning システムは「PREMA(your Personal Reading Manager)」としてすでに開発中である[2]。PREMA の更なる発展を図るため、英語教育者、システム開発担当者が協力して将来のシステムに必要な機能及びその実現可能性を検討した。

本稿では、PREMA をさらに補完し、学習者の弱点(解析による診断結果)を基に、次の学習ステップを提示するためのシステムについて提案する。

2. 目的

リーディング能力を評価するためには、学習者の覚えている語彙数、語彙の難度、語彙の使われている頻度などがある。語彙の難度の指標としてはいろいろな「学習語彙表」が提案されている。さらに、学習者のリーディング能力を解析するに当たっては、学習者の学習分野によって「学習語彙表」を使い分ける必要がある。

本研究では、開発中の e-Learning が広く英語教育者に使えるよう、分野毎の「学習語彙表」のデータベースの作成、学習者の読解力の適切な解析及びそれに基づいて次のステップを学習者に提示することができること。さらに学習者の読解力の解析自体も、収集データに基づき適応していくような e-Learning システムの構築を目的とする。

3. 現在の PREMA の改良点と問題点

我々が PREMA の更なる改良に必要と考えている要件は、学習者自身が英文を選択できること、その英文の難易度がその場で分かること、学習者の到達度に応じた適切な評価ができること、それに基づく次の学習ステップの提示できることである。ここで最初の問題点となっていることは「題材がインターネット上に存在する Web ページが対象なので、実際に読み始めてみないと、学習者のレベルに応じたものかどうか判断できないという点である。

研究グループのなかで検討を行ったところ、PERM の改良点と問題点として以下の課題が浮上してきた。

1. 現在、学習者への英文の提示は教員が行っているが、e-Learning 上の画面で学習者が

主体的に選択し学習できるようにすること。このとき、学習者が選択した英文の語彙レベル・文章レベルが「学習語彙表」に照らせ合わせて学習者の語彙レベルに対してどの程度のレベルなのかを判定・表示し自分に合った英文を選択できること。このときの問題点としては、「学習語彙表」を学習者クライアント側に置く必要があるが、トラフィック及び「学習語彙表」のセキュリティに問題がある。

2. 分野毎の「学習語彙表」のデータベースを構築する。問題点としては、「学習語彙表」は改変されるものであり、「学習語彙表」を必要とする教員クライアントとのインターフェイス、語彙難度の解析法の開発が必要である。
3. 学習者に合わせた適切な評価を行う。本システムの一番重要な機能であり、学習者の読解力解析（診断）の主要な部分を占める。そのためには、多くの基礎データの蓄積が必要であり、その解析手法も開発しなければならない。
4. 単一大学内だけではなく、様々な大学の学術分野に対応ができ、分野に応じた機能の最適化が行えること。問題点はその大学に設置するサーバーの管理・運営を如何に行うかである。

すでに学習者クライアントのブラウザ上からからコピー&ペーストをしなくても e-Learning システム上から読みたいニュース選択ができるようになっている（図1）。課題はこのなかで如何にしてその文章の語彙レベル・文章レベルを評価するかである。



図1 e-Learning システム上の Web サイト画面

4. 設計の思想

主管大学, 各大学, 学習者という階層構造 (一元化管理でなく分散システム) に基づき, 各階層に必要なモジュールを開発する. このときに, 信頼性, ネットワークトラフィック, セキュリティ, 各大学のサーバー管理に関し十分に考慮した設計を行う必要がある. 設計上最も困難と考えられることは, 非常に多様に及ぶニーズに対し如何にして柔軟なモジュールを開発するかにある. 考えられる手段としては, 例えば各モジュールが持つデータベースに基づき, それに応じた対処法を選択していくという方法が考えられる. それは, 多様な学習者に対しても言えることである.

更に, 主管する全システムに関しても, 多様化・グローバル化にどう対処していくかが研究グループで議論になったが, 今後の課題ではあるが設計思想として考慮する必要がある.

5. 学習者の解答に対する適切な評価

ここでは当面している問題の学習者の解答に対する適切な評価について述べる. 我々は, 学習者に対する適切な評価・指導に当たり, 評価の履歴・解析・予測が必要と考えている. 予測は, 学習者に次のステップを提示するために必要なものである. 予測に関しては木戸の「言語テストスコアにおけるカオス的時系列の短期予測」の研究がある[3]. 評価の解析はすでになりに研究が進んでいるが, システム設計者はそれらのモジュール化と全体システムへの組み込み設計を行っている. 現時点における構想中のシステム概念図を図2に示す.

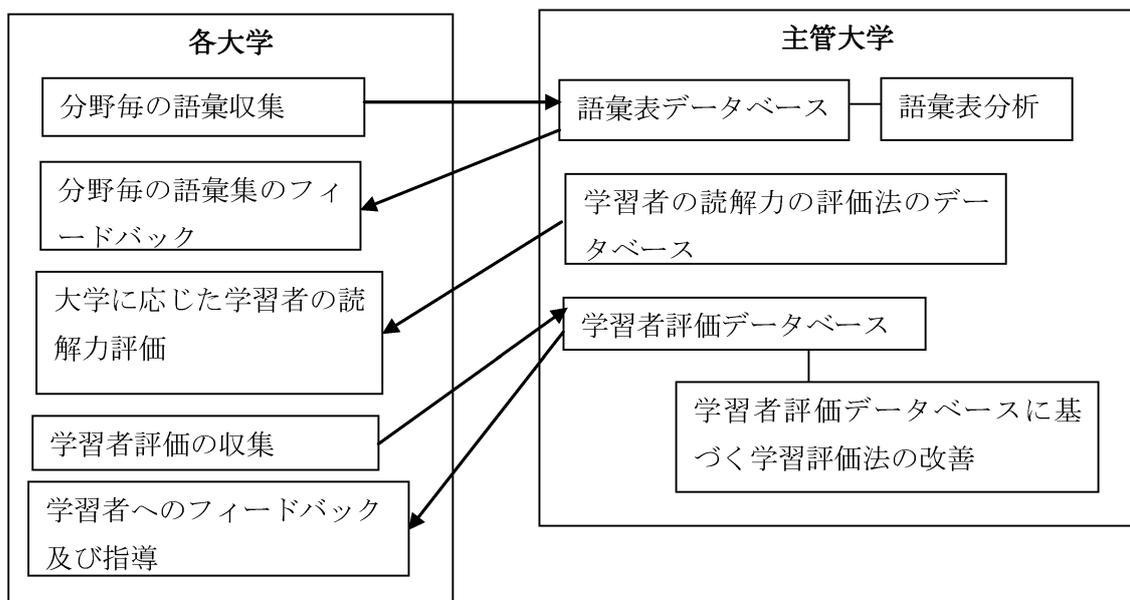


図2 構想中のシステム概念図

4. まとめ

考えている最終的なシステムはかなり大規模なものであり、実現には多年を要する。研究グループの役割分担を決め、各モジュールのあり方を担当する。システム設計者は各モジュールのプログラミング、モジュール間インターフェイス、システム全体の設計仕様を担当する。まだ、研究は端緒にすぎたばかりであり成果はこれからであるが、個々の研究成果について今後発表していく。

参考文献

- [1]英文多読・速読を効果的に行うための e-ラーニングシステムの開発, 岡崎弘信, 創価大学英文学会, 第 64 号, 2009
- [2]日本人英語学習者の弱点を集中的に個別矯正するリスニングプログラムの開発と実践研究, 岡崎弘信, 平成 18 年度～平成 19 年度科学研究費補助金(基盤研究(c))研究成果報告書, 2008
- [3]言語テストスコアにおけるカオス的時系列の短期予測, 木戸和彦, 岡崎弘信, 岩崎彰典, 外国語教育メディア学会 2011, 2011 (発表予定)

考古地磁気データを用いた日本における過去 2000 年間の
地磁気変動標準曲線の作成について

On geomagnetic secular variation curve from archeomagnetic dataset

*島山 唯達 (岡山理科大学 情報処理センター)

Tadahiro Hatakeyama (Information Processing Center, Okayama University of Science)

**山本 真央 (岡山理科大学 総合情報学部 生物地球システム学科)

Mao Yamamoto (Department of Biosphere-Geosphere System Science, Okayama University of Science)

Abstract

We are constructing a series of geomagnetic secular variation models during the past 2000 years in Japan from 610 direction dataset in an archeomagnetic database. The mean directions for every 50 years and its confidence limit cones (circular and ellipsoidal) are determined there. Furthermore, secular variation curves are also determined by two spline methods and by smoothed spline method with ABIC minimization.

1. はじめに

我々は過去の地球磁場（地磁気）の変動がどんなものであったかを調べている。地磁気はさまざまな要因で変動している。短くは秒単位から日周期、年周期、11年周期といった主に地球の自転公転によるものや太陽風などの地球外的要因の影響を受けた変動から、長いものでは、数十年～数十億年に至るまでの地磁気そのものの長周期変化（これを「地磁気永年変化」と言う）まで、さまざまなタイムスケールを持っている。この中には周期性がはっきりしないものが多く、中には地磁気極性逆転のような他の変化と比べて著しく激しい変化もある。また、周期解析以前にデータのカバーが良くない事情もあり、いまだ全貌が掴めていない。

人間が組織的かつ連続的に地磁気を測定したのは、機械で過去百数十年、コンパスや伏角計を用いたものでも過去四百年程度しかない。それよりも過去に遡って地磁気変動の様子を探るためには、古地磁気学的手法を使って過去のある時点の地磁気の方位や強度を推定し、それを繋いでいかなければならない。本研究では、昨年度より開始された日本の考古地磁気学の再検討と発展を目指す研究グループの一環として、これまでに集められた考古地磁気から、日本における過去 2000 年分の高密度・高精度地磁気永年変化曲線を定義することを目的としている。

この 10 年の間にヨーロッパ等では組織的に考古地磁気の測定、解析、および年代推定法としての検討が行われ、標準カーブとなる地磁気永年変化曲線を引く努力が続けられてきた^[1]。一方日本では古くは Hirooka (1971)^[2] や Shibuya (1980)^[3] によって、大阪を基準とした永年変化の標準曲線が発表されている。これらはいずれも手で引かれたものである (図 1)。一方、Tsunakawa (1992)^[4] はスプラインにスムージングを加えその重みを ABIC 最小化法で決定する手法で地磁気永年変化曲線を引いた。

*corresponding author: 岡山市北区理大町, hatake@center.ous.ac.jp

**現 名古屋大学太陽地球環境研究所

今回我々は、広岡ら(2006)^[5]によって集められた日本の遺跡(主に窯跡)から得られた考古地磁気データを用いて、「50年ごとの平均方位とその信頼範囲を求めること」、および「データを接続する永年変化曲線をいくつかの方法で求めること」の2点について解析を行った。

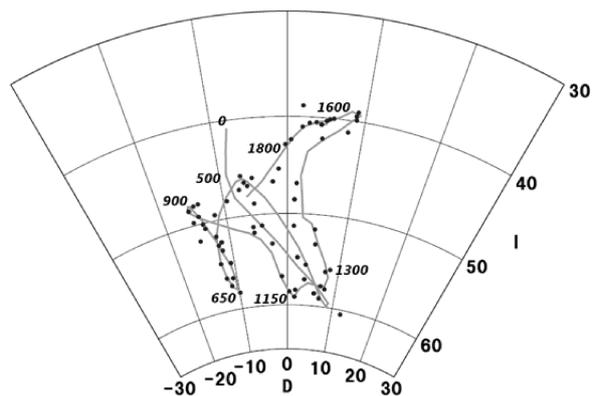


図1: Shibuya (1980)によるAD1~1600年の地磁気永年変化モデル。点は各年代(25年ごと)の平均方位、線は手で引いた永年変化曲線。カーブは平均値を無理に通らないよう引かれている。

2. データについて

2.1. 考古地磁気学データとは

古地磁気学は過去に形成された岩石に残された、形成時や変質時の地磁気の化石(残留磁化)を実験室内で調べる学問である。古地磁気で利用される残留磁化の主なものは、火山などから噴出した火成岩が冷却する途中で磁性鉱物のキュリー温度を下回ったとき獲得する熱残留磁化や海底や湖底に磁性鉱物を含む碎屑物が堆積し脱水・属性作用時に獲得する堆積残留磁化などである。前者は主として火山から噴出した火山岩が対象であるが、過去の人類が窯で焼成した土器、それから窯そのものも対象となる。これら考古遺物を扱った古地磁気学を特に考古地磁気学(Archeomagnetism)という。考古地磁気学で扱われるこれらの考古遺物が持つ熱残留磁化は非常に短い時間で獲得されたことが明らかであること、残留磁化獲得後の化学的、もしくは熱的な変質が少ないこと、また、年代が明らかなものが多いことから、考古地磁気学は過去の地球磁場とその振る舞いを調べるために大変有用であり、利用されてきた。

考古学試料(資料)のうち、とくに日本において考古地磁気学測定の対象として有力なものは、土器から陶磁器までの焼成された製品、および、土器等を焼いた窯^{かま}や住居中の竈^{かまど}など人為的な火にあぶられた形跡がある建造物、の2つである。前者は非常に安定性が良く強い熱残留磁化を保持しているが、焼成時の方位がしっかり取れず、古地磁気方位データを求めるのには不適切である(このような試料は古地磁気強度を求めるのに適した資料である)。一方、後者は前者と比べ、熱残留磁化としての素性は若干劣るが(それでも玄武岩などの一般的な古地磁気試料と比べてはるかに良い方向・強度データを持っている)、窯跡等がそのまま発掘されれば、非常に良い定方位試料を得ることができて、良質な考古地磁気方位データが得られる。

2.2. データベース

日本における考古地磁気学の発展は1950年代後期にさかのぼる^[6]。もっとも組織的、大規模、かつ本格的に行われた考古地磁気学の研究は大阪府堺市・和泉市の陶邑遺跡群^{すえむら}に見つかった須恵器窯跡群である。ここからは約500基に窯跡が発見・発掘され^[7]、そのうち約180基から考古地磁気方位データが得られた^[2]。これらを中心とした考古地磁気データベースは幾度かまとめられたが、国際的な発表はHirooka(1983)^[8]を最後になされていなかった。その後も日本各地の遺跡からデータは増え続け、広岡ら(2006)がまとめたデータベースでは約2000基に達する(これでもまだ全ての考古地磁気データは網羅されていない)。

2.3. データの取り扱い

地磁気永年変化モデルを作成するために、広岡ら(2006)のデータベースから東海・北陸・近畿3地域の窯跡などのうち年代が振ってあるデータ 610 基(サイト)を抜き出して使用した。これらは日本列島の中心部に位置しているが、サイトは東西、南北方向共に約 200km に渡って分布している(図 2)。そのため、方位(伏角 I、偏角 D)のデータをサイト間の差異無しにそのまま扱うわけにはいかない。特に伏角)はサイトの緯度に大きく依存するので、「日本の考古地磁気データ」とひとくくりにするためには、何らかの補正をする必要がある。今回は、仮想地磁気極(VGP)を共有するような形⁹⁾で、伏角・偏角を大阪府堺市付近(北緯 34.52°, 東経 135.53°)での値に変換してから、推定年代を 50 年ごとにまとめて使用した。

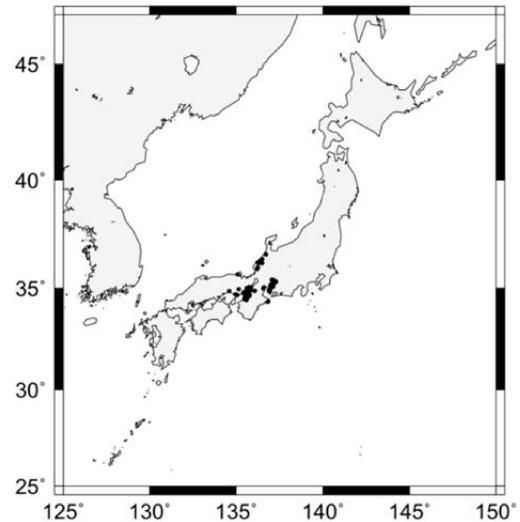


図 2: 広岡ら(2006)の考古地磁気データベースの分布。年代が記載されている 610 サイト(窯)は近畿・北陸・東海の 3 地方に集中している。

3. 解析

日本における AD0~1600 年の標準磁場方位モデルは以下の 3 つの要素を含んでいる。

- A. ある時間における磁場の方位。考古地磁気方位データの平均値がこの不偏推定と考えると差し支えない(地磁気がゆっくりと変動していること、かつ方位データだけを使用していることから、厳密にはこの平均値は区間の平均磁場の不偏推定値ではない¹⁰⁾のだが、この場合その誤差は極めて小さいと考えられる)。→ 3.1.節
- B. 時間変化する方位データを表す曲線。この曲線は A の点をつなぐように引いたものと、必ずしも A の点を通らないものの 2 種類が考えられる。前者はデータが時間誤差をほとんど含まず、時間の精度が 1 年単位である場合、かつ、各時代に十分なデータが存在する場合には、1 年ごとの移動平均を取って得ることができる。また、そうでない場合も適切な方法である年代ごとの A 点を結んでいくことで取得できる。一方、後者は、データ自身が質・量ともに不十分であるという場合に必ずしも各時代の平均方位を通らなくても、もっともらしい(ある程度なめらかな)曲線を引ければそちらの方が良からうという考え方から発生する。どちらが適切であるかを断定することは容易ではない。今回は両方について考察した。→ 3.2.節
- C. 平均方位の信頼限界。A に記したように平均方位はその時代の磁場(短い期間の平均地球磁場)の推定値であるが、その推定値がどの程度信頼おけるかと言う区間推定の半径。今回は、円的になるもの(Fisher 統計)および楕円的になるもの(Bivariate Fisher 法)の 2 種類を施した。→ 3.3.節

A, B, C それぞれについて、以下のような解析をした。

3.1. 50 年ごと時間平均方位

データを年代ごとに 50 年ごとに分割し、それぞれの平均方位を求めた。平均方位の出し方は古地磁気学でよく用いられる単位球面上における平均法（単位ベクトルの和）である。窓内にあるすべてのサイトのデータ $(D_1, I_1), (D_2, I_2), \dots, (D_N, I_N)$ に対し、その方向余弦の合計を

$$x = \sum_{i=1}^N x_i, \quad y = \sum_{i=1}^N y_i, \quad z = \sum_{i=1}^N z_i,$$

のように計算し（ただし

$$x_i = \cos I_i \cos D_i, \quad y_i = \cos I_i \sin D_i, \quad z_i = \sin I_i$$

この (x, y, z) が指す方位を平均方位とする。

（以降に記載する各図を参照）

3.2 地磁気永年変化曲線の作成

日本における地磁気永年変化曲線（単位球面上で定義される）をいくつかの方法で求めた。生データ、および 3 つの手法による変化曲線を D, I ごとに描いたものが図 3 である。

(a) 3 次の自然スプライン補間

I, D を独立に 3 次の自然スプライン関数で補間した。節点は 50 年ごとのデータの平均値である。このやり方ではデータが必ずインターバルごとに平均方位を通ることになる（図 4）。

(b) 2 次の B スプライン基底補間

(a) 同様に節点を 50 年ごとの平均方位にして、今度は基底を 2 次の B スプライン関数にした。50 年後の点が縛られているので、

(a) 同様複雑なカーブを描くが、若干滑らかな変化をするようである（図 5）。

(c) ABIC 最小化法を用いて滑らかさを決定したスムージング

スプライン補間にスムージングを導入し、その度合い（重み）を ABIC を用いて決定する方法は石黒, 荒畑(1982)^[11]によって原理的に示され、Tsunakawa (1992) によって永年変化曲線へ応用されたが、ここでも同様の手法でカーブを求めた。ただし、Tsunakawa (1992)と

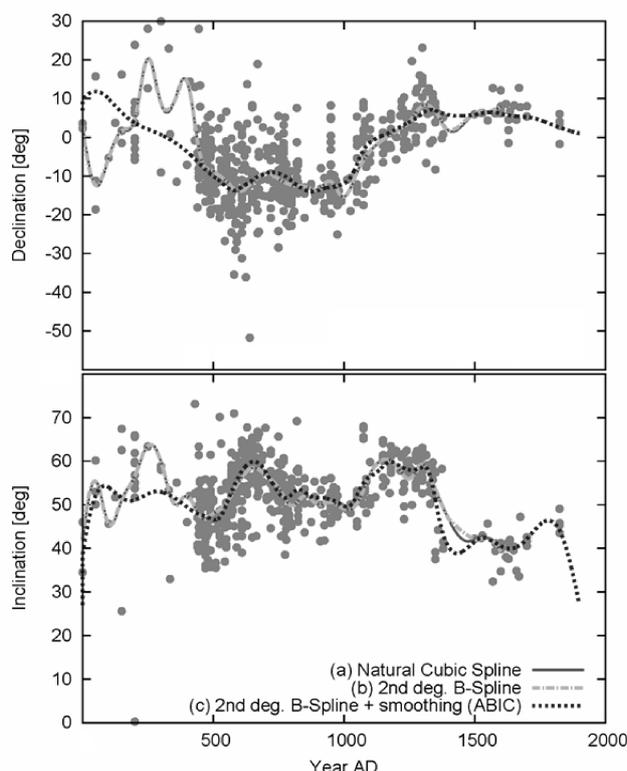


図 3: (a)3 次自然スプライン, (b)2 次 B スプライン基底, および (c)2 次 B スプライン+スムージングによる偏角(上)と伏角(下)の変化曲線。(a), (b)はごく細かい変化を除けばこの図上でほぼ重なっているが、(c)は特にデータが少ない 5 世紀以前と 14~16 世紀ごろで大きく異なる。

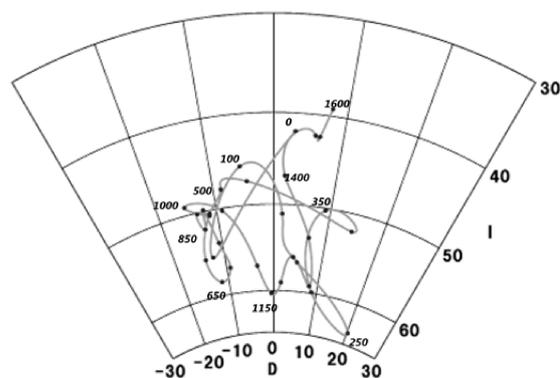


図 4: (a)3 次自然スプライン補間による D-I カーブ。中世須恵器が発達した時代(5~10 世紀)はデータが多いが、偶然西偏約 10 度、伏角 50~55 度付近に集中していて、時間分解能が悪いことがわかる。図中の各点は AD1(0)~1600 年の間の 50 年ごとの平均方位。

違い、方向余弦の代わりに I, D を用いて独立に計算し、各データにおける試料数の重みを考慮した。結果的に評価した関数は、

$$L(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - \sum_{j=1}^M a_j s_j(x_i)}{\delta_i} \right]^2 + u^2 \sum_{j=1}^M (\Delta a_j)^2$$

である。ここで、 (x_i, y_i) はデータ点 (x は時間、 y はデータ)、 δ_i はその誤差または信頼精度、 $s_j(x)$ は B スプライン基底 (M はスプライン分割区間数)、 \mathbf{a} はスプラインの係数ベクトル、および Δa_j は係数のラプラシアンで、重み u^2 を ABIC 最小化法^[12] で決定する。その結果 (図 3c) や (図 6) のように、(a), (b) と比べてだいぶ滑らかな曲線が得られた。カーブは 50 年ごとの平均方位を通らない。また AD250 年付近の高伏角東偏の点や 15 世紀前後の平均値方面にはほとんど振れていない。一方でデータの密集する 5~13 世紀付近では、(a), (b) と整合性がある。

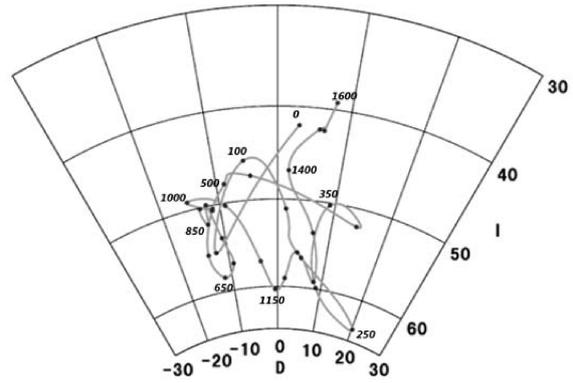


図 5: (b) 2 次 B スプライン基底による D-I カーブ。

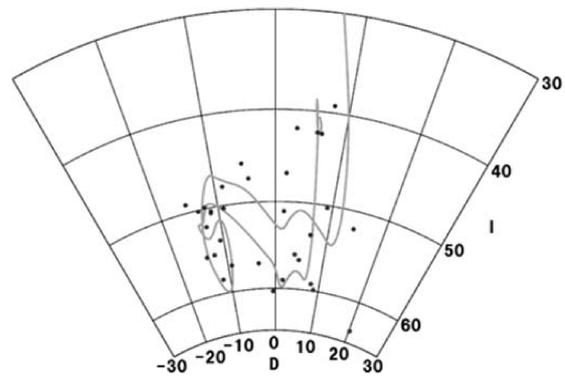


図 6: (c) 2 次 B スプライン基底+スムージングによる D-I カーブ。スムージングがかかっているため、各時代の平均方位を通らない。

(a)~(c) のカーブと図 1 の Shibuya (1980) による曲線を比較すると、最も多くのデータ (大阪府の陶邑から出土した須恵器窯) のある 5~10 世紀について非常に狭い範囲で密集している時代の解釈が異なることがわかる。手による補間ではなるべく分離しやすい曲線を選択しているが、スプラインによる補間(a), (b) では平均方位 (下の図 7, 図 9 のように信頼限界が重なり合う) を結ぶため、非常に複雑な曲線となっている。一方、スムージングをかける補間(c) では、図 1 と比べても過剰にスムージングされている。

3.3. 平均方位の信頼限界の決定

Fisher 統計

平均方位 (3.1 節) の信頼限界は Fisher(1953)^[13] で定義された以下のような方法で決められることが多い^[14]。3.1 に記したサイト内合ベクトル (x, y, z) の長さ $R (\leq N)$ は分布の集中が高いほど N に近く、集中度パラメータ (の不偏推定値) k は $k = (N - 1) / (N - R)$ と求めることができる。平

均方位からの離隔が正規分布的になる 1 軸対称な Fisher 分布

$$f(\theta; k) = \frac{k}{4\pi \sinh k} \exp[k \cos \theta]$$

における、中心値 (平均方位) の 95%信頼限界小円 (コーン) の半径 (単位球における中心角) は、

$$\alpha_{95} = \cos^{-1} \left[1 - \frac{N - R}{R} \left(20^{\frac{1}{N-1}} - 1 \right) \right] \sim \frac{140}{\sqrt{kN}} [\text{度}]$$

と求めることができる。この信頼限界円は古地磁気学では多くの場合用いられるが、基本的には等方的な誤差を考慮することが前提である。データのばらつきに比べて永年変化の時間変化が十分小さい (変化が遅い) 場合はこの考え方を踏襲して差し支えない (図 7)。

修正 Bivariate Fisher 法

一方で、今回のようなデータセットから一定期間の窓を作ってデータを取り出す場合、その間に地磁気に変化することを考慮する必要もあろう。その場合は想定する分布が円ではなく、地磁気永年変化方向に伸びたものになると考えるのが自然である (図 8)。このような歪んだ形をフィットする統計にはいくつかあるが、ここでは Le Goff et al. (1992) [15] による Bivariate Fisher 法を若干手直しして採用した。中心の値は上記の単位ベクトルの平均方位で与えた上で、その方向が鉛直下向き (Z 軸方向) になるよう適当な座標変換をすると、分布は単位球の下部に集まる。そこで、この分布の平均値 (0, 0, z̄) の周りで慣性テンソル、

$$\begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i y_i & \sum x_i (z_i - \bar{z}) \\ \sum x_i y_i & \sum y_i^2 & \sum y_i (z_i - \bar{z}) \\ \sum x_i (z_i - \bar{z}) & \sum y_i (z_i - \bar{z}) & \sum (z_i - \bar{z})^2 \end{pmatrix}$$

を用いて主成分分析をすると、その第 1 主成分

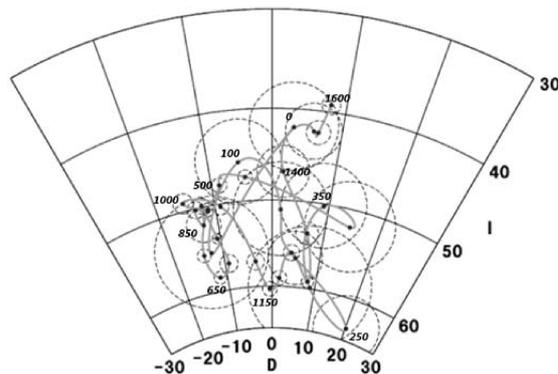


図 7: Fisher 統計による、各時代の 95%信頼限界円の表記。ただし、各サイト内のデータのばらつきも考慮している。カーブは(b)の 2 次 B スプライン基底による補間曲線。投影はステレオネット (等角投影) で球面上の円 (小円) は投影上でも円になる。半径は前頁下式で求められる α_{95} 。

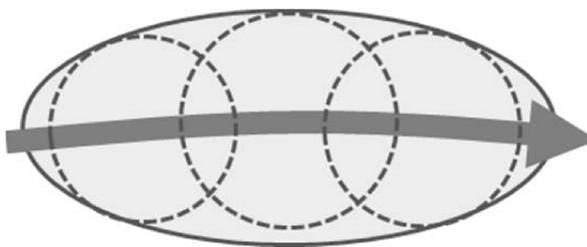


図 8: Bivariate Fisher 統計の概念図。完全な同時性があるデータでは、誤差は基本的に円になる (図の点線) が、50 年程度の時間幅があっても、その間に永年変化が無視できないだけあれば、その窓内で採取したデータの分布は磁場の変動方向へ伸びるはずである。

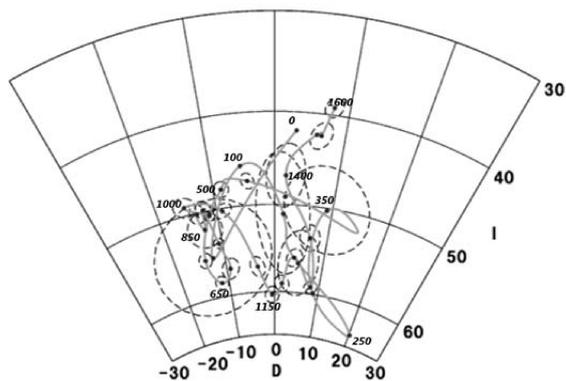


図 9: 修正 Bivariate Fisher 統計法による、各時代の 95%信頼限界楕円の表記。図 7 同様、各サイト内のデータのばらつきも考慮している。カーブは(b)の 2 次 B スプライン基底による補間曲線。図 7 同様ステレオネットへの投影なので、第 1 主成分と第 2 主成分の固有値 (分散) が同じ場合は Fisher 的になり図中で円として表される。

の方向が図 8 の伸び (すなわち期待される永年変化の方向)、第 2 主成分の方向がそれと垂直な方向になるべきである (第 3 主成分は動径 z 方向である)。図 9 は球面上に投影した信頼楕円である。おおむね、永年変化曲線に沿った方向に伸びていて、まったく独立に求められた永年変化曲線と大きな矛盾がない。つまり、前節(b)の曲線は一部のデータ不足の点を除けば良いモデルになっていると言える。

4. まとめ

考古地磁気学によって得られた 600 余のデータについて、さまざまな統計的手法および補間法を使用して、日本の 1~17 世紀における地磁気の変化をモデル化した。平均方位の確からしさについては、**Bivariate Fisher** 法による楕円の伸長方向が永年変化曲線と一致することから、日本の考古地磁気試料データもこのような解析に適すことが示された。

スムージングを入れないスプライン関数による補間は時間区切りごとの平均方位を通るので、球面上ではキंकのようなものになりがちであるが、**Bivariate Fisher** 法の示す楕円とは調和的な変化曲線を描いている。キंकが地球物理的に意味があるかどうかは不明であるが、より良い永年変化曲線を引くためには、球面上でのスプラインなどを使用した方が良いかもしれない。

一方で ABIC 最小化法によるスムージングの評価をしたカーブでは、キंकはできないものの、大きく変化する部分のデータを無視しがちである。単純な D, I におけるラプラシアンをスムージングの基底とする代わりに、球面上での滑らかさによって評価すべきかもしれない。

ABIC 最小化法によって一見過剰とも思えるスムージングの重みを最適な値として選出したということは、「このデータは非常に質が低く、情報量が多くない」という評価の表れである。今後、データそのものの再検討も必要であろう。

謝辞

データの取り扱いおよび解析法について、大阪大谷大学広岡公夫教授、同中村浩教授、岡山理科大学鳥居雅之教授、熊本大学渋谷秀敏教授をはじめ多くの方にご意見を頂いた。本研究の一部は、山本真央の岡山理科大学総合情報学部生物地球システム学科卒業研究として行われた。本研究は科学研究費補助金 (基盤研究 (C) 21500991 代表: 鳥居雅之) の援助を受けて行われた。皆様に感謝いたします。

References and Notes

- [1] AARCH 計画 (Archaeomagnetic Application for the Rescue of Cultural Heritage, <http://dourbes.meteo.be/aarch.net/>) による各種研究成果など。
- [2] Hirooka, K., "Archaeomagnetic study for the past 2000 years in southwest Japan", Mem. Fac. Sci. Kyoto Univ. Ser. Geol. & Min., 38, 167-207, 1971.

- [3] Shibuya, H., "Geomagnetic Secular Variation in Southwest Japan for the Past 2,000 Years by Means of Archaeomagnetism", MS thesis, Osaka University, 54pp, 1980.
- [4] Tsunakawa, H., "Bayesian approach to smoothing palaeomagnetic data using ABIC", *Geophys., J. Int.*, 108, 801-811, 1992.
- [5] 広岡公夫, 中島正志, 鳥居雅之, 中村浩, 吉原新, 時枝克安, 成亨美, "東アジアにおける中世古窯の考古地磁気データベースの作成とそのデジタル化", 文部省科学研究費補助金特定領域研究報告書, pp135, 2006.
- [6] たとえば, Kawai N., Hirooka, K., Sasajima, S., Yaskawa, K., Ito, H., and S. Kume, "Archaeomagnetic studies in southwestern Japan", *Ann. Geophys.*, 21, 574-578., 1965.
- [7] 中村浩, "泉北丘陵に広がる須恵器窯", 新泉社, pp93, 2006.
- [8] Hirooka K., "Results from Japan", in "Geomagnetism of baked clays and recent sediments" eds. Creer, K. M., Tucholka, P. and Barton, C. E., Elsevier, 150-157, 1983.
- [9] Irving, E., "Paleomagnetism and its application to geological and geophysical problems", Wiley, New York, 1964.
- [10] Hatakeyama, T. and M. Kono, "Shift of the mean magnetic field values: Effect of scatter due to secular variation and errors", *Earth Planets Space*, 53, 31.44, 2001.
- [11] 石黒真木夫, 荒畑恵美子, "ベイズ型スプライン回帰", *統計数理研究所彙報*, 30, 29-36, 1982.
- [12] Akaike H., "Likelihood and the Bayes procedure", in *Bayesian statistics*, eds. Bernardo, J. M., DeGroot, M. H., Lindley, D. V. and A. F. M. Smith, University Press, Valencia, 143-166, 1980.
- [13] Fisher, R., "Dispersion on a sphere", *Proc. R. Soc. Lond.* A217, 295-305, 1953.
- [14] たとえば, 小玉一人, 「古地磁気学」, 東京大学出版会, pp249, 1999 などとも参考にする
とよい。
- [15] Le Goff, M., Henry, B. and L. Daly, "Practical method for drawing a VGP path", *Phys. Earth Planet. Inter.*, 70, 201-204.

「岡山オルガノンにおける大学連携による教育の共有化」

—ライブ型遠隔授業や VOD 方式による e-Learning 教育—

竹内 渉^{A, B, C}、木村 宏^C、佐藤 大介^C、岡戸 真理子^C

^A建築学科、^B情報処理センター、^C岡山オルガノン大学教育連携センター

Key Words : e-Learning、テレビ会議システム、学習管理システム、大学連携、単位互換制度

1. はじめに

大学コンソーシアム岡山では、連携する大学間で互いに学生を受入れ、それぞれの受入大学において修得した単位を所属大学の正規の単位として組み入れることができる「単位互換制度」がある。しかしこの単位互換制度を活用して他大学が提供する授業を受講する場合には、学生は受入大学まで直接移動して受講する必要がある。そのため他大学の授業を受講するためには学生の時間的負担および費用的負担が発生することとなり、単位互換制度の活用は限定的である。こうした学生の負担を軽減するため、『岡山オルガノン^{※1}』の構築」事業において、連携する 15 大学間においてライブ型および VOD (Video On Demand) 型の e-Learning 教育を平成 21 年度より検討を開始し、平成 22 年度に試行実施した。

本論では、2 つの方式による e-Learning 教育の試行実施による、大学間の教育共有化の成果と課題について報告する。

2. 『岡山オルガノン』の構築」事業の概要

岡山県内全大学の高等教育機関の連携及び相互協力により、各大学の持つ知的資源の積極的活用、地域社会・産業界との連携によって、「時代に合った魅力ある高等教育の創造」と「活力ある人づくり・街づくりへの貢献」の実現を目指し、平成 18 年 4 月にこれらの学長懇談会が協力し「大学コンソーシアム岡山」を立ち上げ活動を開始した。これにより、大学間の連携がこれまでよりも一層の強化につながった。そこで更なる発展をめざし、新たに『岡山オルガノンの構築』—学士力・社会人基礎力・地域発信力の融合を目指した教育—」事業を岡山県内の 15 大学^{※2} (以下、「連携校」という) が連携して申請を行い、文部科学省の平成 21 年度「大学教育充実のための戦略的大学連携支援プログラム^{※3}」に採択された。これは各大学が個別に実施している優れた取組を大学間で共有・相互連携することで、各取組を発展・充実させ、地域活性化の担い手となる人

^{※1} オルガノン“organon”とは、アリストテレスの論理学関係の 5 つの著作の総称として、「学問を構築する上で基礎となる機関・道具」という意味であり、本取組では「大学教育の基礎となる部分・原動力」と解釈し命名された。各大学が持つ特色を生かし、大学間の連携によりさらに強化していくことで、地方大学の活性化と再生につなげられるという期待が込められている。

^{※2} 連携校：岡山理科大学（代表校）、岡山大学、岡山県立大学、岡山学院大学、岡山商科大学、川崎医科大学、川崎医療福祉大学、環太平洋大学、吉備国際大学、倉敷芸術科学大学、くらしき作陽大学、山陽学園大学、就実大学、中国学園大学、ノートルダム清心女子大学

^{※3} 国公立大学間の積極的な連携を推進し、各大学における教育研究資源を有効活用することにより、当該地域の知の拠点として、教育研究水準のさらなる高度化、教育活動の質保証、個性・特色の明確化に伴う機能別分化と相互補完、大学運営基盤の強化等とともに、地域と一体となった人材育成の推進を図ることを目的としている。

材育成に資することを旨とした総合的教育充実事業である。

本取組の目標は、学士力、社会人基礎力、地域発信力の向上であり、これらを融合させることで地域創生型の人材を育成することであり、具体的には、e-Learning 方式による教育共有の実現、FD・SD 活動の共同実施、学生個々のコンピテンシー向上を目指すキャリア形成教育の共同実施と教育指導者の育成、地域創生・環境教育に関わる教養教育の創出、地域経済界との連携による人材育成教育などである。

本取組では多種多様な取組が展開されているが、本論では、その中でも e-Learning 方式による教育共有の実現に向けた取組に焦点を当てて以下論述する。

3. e-Learning による教育の共有化に向けたシステム構築について

(1) ライブ方式による遠隔授業

①通信回線

ライブ型遠隔授業を 15 大学で同時にインターネット回線を通じて接続し、比較的安定した運用が可能となるインターネット通信網として、NTT フレッツ・グループの IP-VPN 環境を採用した。そのため全連携校に B フレッツ回線を新たに敷設してもらった^{※4}。

しかし、この IP-VPN 環境はベスト・エフォート型サービスであり、HD 画質対応のテレビ会議システムを運用するためには、さらに確実に強力な通信網について検討を行う必要があった。そこで、インターネット通信網として、岡山県が運営する県内全域を結んだ高速大容量光ファイバ網である「岡山情報ハイウェイ」の活用について岡山県と平成 22 年 4 月に協議を行った。岡山情報ハイウェイを活用すれば、十分な通信帯域を確保することができるだけでなく、岡山県内の高校との通信も可能となり高大連携を進める可能性があったからである。しかし協議の結果、連携校すべてが岡山情報ハイウェイに接続されていない現状や高大連携を行う環境として双方に同様のテレビ会議システムが必要である点等から、「『岡山オルガノン』の構築」事業の補助期間中の岡山情報ハイウェイ活用については断念した。

②テレビ会議システム等の導入

ライブ型方式による e-Learning 実現のため、全連携校が同時に接続可能なテレビ会議システムの導入を検討した。本システムは、双方向によるライブ型遠隔授業、教職員や学生同士のコミュニケーションツールとして活用するものであり、以下の要件を満たすことが必要であると考えた。

- ・授業中の質疑や討論の声が明瞭に聞こえる。
- ・ホワイトボード等の板書が鮮明に見える。
- ・音声・映像の乱れや劣化が少ない。

これらの条件を満たすため、平成 20 年より販売されているデジタルハイビジョン (High Definition: HD) 対応のシステムが妥当であると判断し、平成 21 年 10 月に大学教育連携センターにて連携校共通の要求仕様書を作成し、競争入札を実施した。平成 22 年 1 月までに各連携校はテレビ会議システム一式 (表 1) の購入および設置を完了した。

^{※4} 本取組では、接続回線使用料等のランニング経費については、補助期間中より各大学の経常経費より支出することで同意が得られているため、補助期間終了後も同様の運用が可能である。

表 1 全連携校導入のテレビ会議システム一式

品 名	メーカー・型番
HD ビデオ会議システム	SONY・PCS-XG80
ビデオアノテーション用タブレット ^{※5}	SONY・MTE-450/K0
HD データソリューションソフトウェア ^{※6}	SONY・PCSA-DSG80
HD 多地点接続用ソフトウェア ^{※7}	SONY・PCSA-MCG80
マトリックス・ミキサー	audio-technica・AT-MX44

表 2 岡山理科大学導入の多地点接続用サーバー一式

品 名	メーカー・型番
多地点接続用サーバー	SONY・PCS-VCS20
ギガアクセス VPN ルーター	YAMAHA・RTX1200
無停電電源装置	APC・SUA750JB

また、平成 21 年度に導入したテレビ会議システム一式に含まれる HD 多地点接続用ソフトウェアでは 6 拠点、カスケード接続方式で最大 10 拠点（表示方法や画質などに制限がある^{※8}）まで同時に接続することができるが、連携校が 15 大学あるため、平成 22 年度前期提供のライブ型遠隔授業では単位互換等履修生募集時に拠点数制限をかけていた。そのため、全連携校が同時にテレビ会議接続を可能にするには、現有のシステムとの組み合わせに配慮しながら、多地点接続装置（MCU: Multi point Control Unit）の導入が必要であった。そこで、平成 22 年 4 月に要求仕様書を作成し、6 月に発注（受注生産：要 2 か月）、8 月に多地点接続用サーバー一式（表 2）の購入および設置・全連携校のテレビ会議システムでの調整が完了した（図 1）。本サーバーは連携校全体で 1 台購入することで、20 拠点まで同時に接続できるようになっており、本取組では岡山理科大学の情報処理センターに設置した。平成 23 年 2 月には本装置のバージョンアップを行い、遠隔授業向けの機能として表示方法の種類としてレクチャーモードが追加された。

ただし、本サーバーの操作については、テレビ会議システム同様に付属のリモコンで操作するのではなく、同一のネットワーク上にあるパソコンを使用して Web ブラウザ経由で遠隔操作をする必要があった。本取組において契約しているフレッツ・グループ（IP-VPN）サービスでは、IP アドレス数が最大 20 個までとなっており、各大学のテレビ会議システムや多地点接続装置（MCU）を操作するためのコントロール用のパソコンに対し、個々に IP アドレスを割り当てるだけの十分な IP アドレスが確保できていなかった。そのため、平成 23 年 2 月に全連携校にギガビット VPN ルーター（YAMAHA・RTX1200）を設置してもらった。これにより、グローバル IP アドレスを各拠点にある 1 台のルーターに割り当てるだけで、その配下に接続したテレビ会議システムやパソコンにはプライベート IP アドレスを割り当てることができ、これまで多地点接続装置の操作が全連携校で可能となり、さらにテレビ会議システムも複数台同時に 1 つの拠点（大学）から双方向通信ができるようになった。

※5 ペンタブレットを活用して手書きメモや図をテレビ会議システムの画面上に自由に書き込むことができる。

※6 カメラ映像とパソコン画面を合成して同時に受信者に送信することができる。

※7 3 拠点以上を同時に接続することで、カスケード接続により最大 10 地点まで多地点会議ができる。

※8 HD 解像度は未対応、音声検出モードのみ対応。

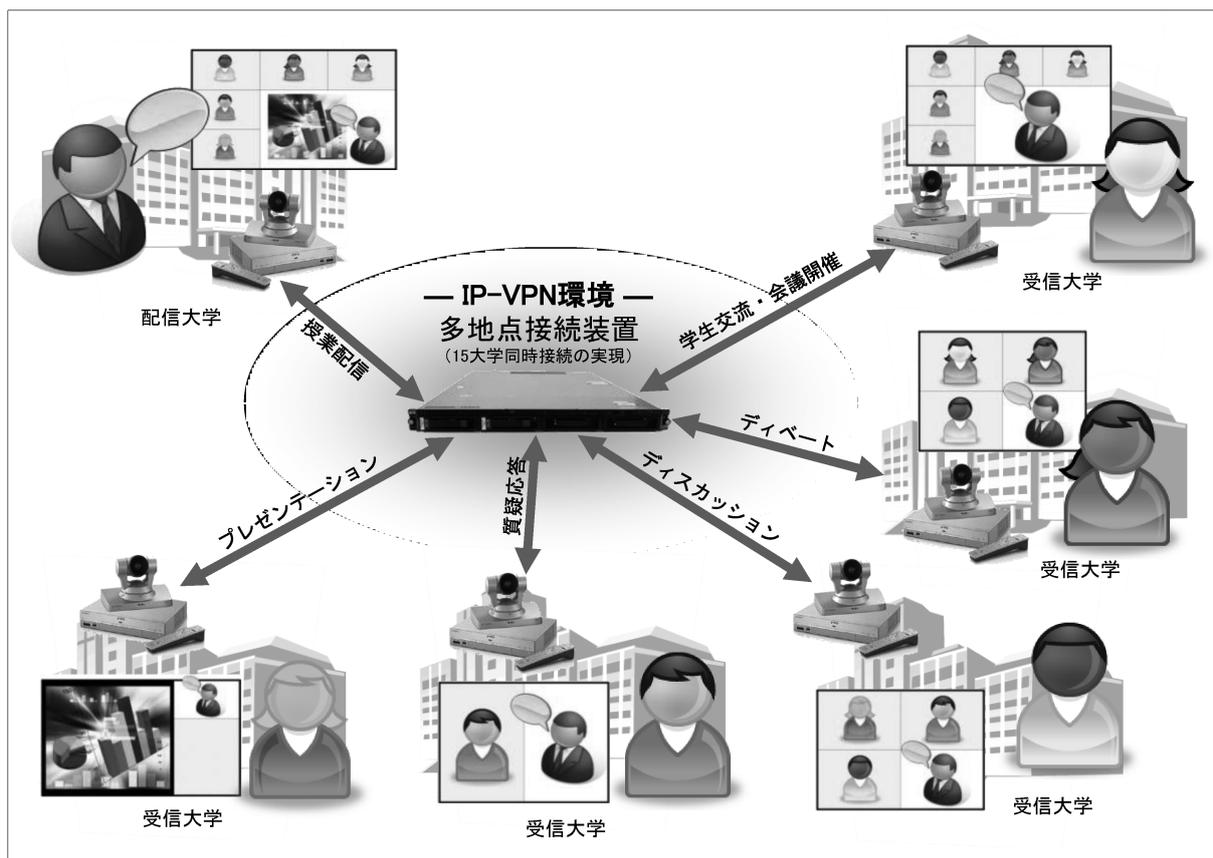


図 1 テレビ会議システム等導入概要図

③接続試験および通信確認

テレビ会議システムが全連携校に順次設置され、テレビ会議システムの接続が首尾よく運用できるよう確認作業を行う必要があった。そのため、表 3 のような日程で接続試験・通信確認を繰り返し行った。運営委員会やデモンストレーションで使用したことにより、連携校関係者が一堂に会してテレビ会議システムについての理解と確認ができ、さらに岡山オルガノンの計画・趣旨に沿った最も教育効果の高い運用を行うための情報交換・問題確認ができた。また、教職員が実際の操作や教室環境について理解する良い機会となった。さらに、ICT 活用教材作成講習会（9月1日開催）や双方向コンテンツ委員会（12月22日開催）において、参加拠点数が多い時は多地点接続装置を使用してもらうことで、連携校教職員が多地点接続と通常接続の違いについて感じ取ってもらうことができた。

（2）VOD 方式による遠隔授業

①学習管理システムの導入・構築

VOD 方式は学習の補助教材等として広く一般的に用いられるようになってきており、学習管理システム（Learning Management System ; LMS）により学習者はインターネット上で VOD を視聴し授業を受講することができるようになる。そこで、LMS を整備するにあたり、大学の授業で供することが可能であり、実績のあるシステムの活用を検討した。その結果、岡山理科大学教員によって開発され、加計教育コンソーシアムでの 8 年間の授業使用実績がある学習管理システム「MOMOTARO」を本取組では採用した。

平成 21 年 12 月より授業用コンテンツの配信用サーバーおよび学習管理システムの設置調整を

表 3 テレビ会議システム接続試験・通信確認日程

時 期	内 容
平成 22 年 1 月	試験通信・音響調整 岡山商科大学より「経営学特殊講義Ⅱ」を 4 大学に試験配信
2 月	音響調整を含めた試験通信
3 月	連携校間の運営委員会で活用
4 月	ライブ型遠隔授業配信開始<<前期>> ライブ型遠隔授業開始式 ^{※9}
6 月	連携校間で授業や配信体験等での受配信デモンストレーションを実施
8 月	連携校全体での多地点接続用サーバーの総合接続テスト
9 月	ライブ型遠隔授業配信開始<<後期>>
12 月	連携校間で授業や配信体験等での受配信デモンストレーションを実施
平成 23 年 2 月	ギガアクセス VPN ルーターの接続テスト
3 月	多地点接続用サーバーを用いた受配信デモンストレーションを実施

表 4 学習管理システム構成

種 類	品 名
ハードウェア	IBM System X Series 3250 M2
ソフトウェア	Red Hat Enterprise Linux 5 Standard Momotaro System True Image Echo Linux
SSL	ベリサイン セキュアサーバー

行い、インフラ手配・システム構築・試験運用を平成 22 年 3 月に完了した（表 4）。本取組では学習管理システムが組み込まれたサイトの名称を、「学生が学習する場」「親しみやすい名称」を考慮して、「まなびオルガノン」（<https://manabi-organon.jp>）と命名した。平成 22 年 4 月より LMS「まなびオルガノン」を運用するため、連携校教職員を対象にテストアカウントを発行し、自由にログインをすることでシステム操作等の使用体験してもらった。また、VOD デモ動画配信や受講方法について説明した動画配信、利用方法についての講師用・教務用・学生用の各マニュアルを整備し、学生や教職員が実際の操作や運用、受講方法について理解することができ、個々の利用者に対応した学習管理システムの円滑な実施体制を整えた。

②e-Learning 用パソコンの導入

連携校によっては VOD 方式による遠隔授業を受講する環境として、パソコンの台数やコンピュータ設置教室（自由利用可能な教室）等が、通常授業での利用等から不足する事態が想定された。そのため、学生の学習環境強化・支援が必要となる連携校では、本取組において当該大学の受講想定数に応じ、e-Learning 用パソコンの導入を行った（表 5）。e-Learning 用パソコンについては

^{※9} ライブ型遠隔授業の開始を記念して連携校関係者および報道関係者を対象として、5 つの拠点に実際にテレビ会議システムで接続し、デモンストレーションを行った。

表 5 e-Learning 用パソコン購入大学一覧

大学名	購入台数
岡山大学	20
岡山県立大学	50
岡山商科大学	20
環太平洋大学	50
倉敷芸術科学大学	10
くらしき作陽大学	50
山陽学園大学	5
就実大学	50
中国学園大学	40
ノートルダム清心女子大学	20
総 計	315

表 6 撮影編集用機材一式

品 名	メーカー・型番
HDV カムコーダー	SONY・HVR-A1J
UHF ワイヤレスマイクロホンパッケージ	SONY・UWP-V1
リモコン三脚	SONY・VCT-PG11RMB
ハードキャリングケース	SONY・LCH-HCE
クロマキーバック紙装置	スーパーリア メンテ
背景バック紙 (ブルー)	スーパーリア メンテ
ノート型パソコン	SONY・VPCS11AGJ
共有コンテンツ作成ソフト	CyberLink・StreamAuthor

大学教育連携センターで作成した共通仕様にに基づき大学ごとに競争入札を行い購入し、設置調整は平成 22 年 3 月に完了した。設置調整の際は、パソコンの基本設定をはじめ、学生の使用管理方法等を定めると共に、学習管理システム専用ホームページへのアクセス制限やシステムの環境復元の設定等を行っている。

③撮影機材の購入

VOD コンテンツを制作する上で必要な撮影編集用機材の一式を平成 22 年 2 月に競争入札を実施し、3 月に購入した (表 6)。これらは本取組事業における連携校間の VOD 方式による遠隔授業用コンテンツを作成するための機材である。また、連携校における VOD コンテンツの撮影・編集で使用するため、平成 22 年 3 月 23 日に本機材一式を用いて VOD コンテンツ撮影を行うためのスタジオを岡山理科大学内に仮設営した。こうした機材を導入したことにより、学生に提供される科目の撮影が可能となり、またこれまでに開催したシンポジウム等の内容を VOD コンテンツとして作成したことにより、VOD コンテンツ作成の手法について確認できた。

4. e-Learning による教育の共有化に向けた連携校の準備について

(1) 遠隔授業に関する制度上の整備

平成 21 年度の本取組開始時に遠隔授業を進めるにあたって、まず各連携校に対して「メディアを利用した教育に関する学則・規程類」の整備について依頼を行った。面接（対面）方式の授業とは異なり、ライブ方式では学生は担当教員から離れた教室で受講し、VOD 方式では学生は担当教員の授業ビデオを視聴することにより受講することになる。そのため、多様なメディアを活用した正規の授業を今後展開していく上で、単位認定の根拠となる学則または規程等について、各大学で検討してもらい、その整備報告を平成 22 年 9 月までに全連携校から受けた。こうした整備が行われたことにより、連携校間での単位互換制度においてライブ方式および VOD 方式による遠隔授業を学生に提供することが可能となった。

また VOD 方式での遠隔授業では、面接授業に相当する教育効果を有するための条件を満たしていることを考慮する必要がある。そこで、学習管理システム「MOMOTARO」が「大学設置基準第二十五条第二項」や「平成十三年文部科学省告示第五十一号」との関係について、その条件を

表 7 学習管理システムにおける大学設置基準第二十五条第二項の規定との関係について

平成十三年文部科学省告示第五十一号	学習管理システムにおける対応
通信衛星、光ファイバ等を用いることにより、多様なメディアを高度に利用して、文字、音声、静止画、動画等の多様な情報を一体的に扱うもので、次に掲げるいずれかの要件を満たし、大学において、大学設置基準第二十五条第一項に規定する面接授業に相当する教育効果を有すると認めたものであること。	インターネットを用いて、事前に撮影された授業動画コンテンツ（Video On Demand；文字、音声、静止画、動画等を含む）を公開し、学生は個別アカウントでログインし学習を行う。
一 同時かつ双方向に行われるものであって、かつ、授業を行う教室等以外の教室、研究室又はこれらに準ずる場所（大学設置基準第三十一条第一項の規定により単位を授与する場合においては、企業の会議室等の職場又は住居に近い場所を含む。以下次号において「教室等以外の場所」という。）において履修させるもの	双方向性は保たれるが、同時性は保つことができない。そのため本要件は満たしていない。
二 毎回の授業の実施に当たって、指導補助者が教室等以外の場所において学生等に対面することにより、又は当該授業を行う教員若しくは指導補助者が当該授業の終了後すみやかにインターネットその他の適切な方法を利用することにより、設問解答、添削指導、質疑応答等による十分な指導を併せ行うものであって、かつ、当該授業に関する学生等の意見の交換の機会が確保されているもの	学生等が授業動画コンテンツを視聴後、学習管理システムに備わる次の機能によって十分な指導が当該授業を行う教員から実現できる。 <ul style="list-style-type: none"> ・アンケート集計機能：設問解答 ・提出物管理機能：添削指導 ・掲示板機能：質疑応答 ・チャット機能：学生等の意見交換の機会 以上の観点から、本要件を満たし、面接授業に相当すると考えられる。

満たしていることを連携校に報告した（表 7）。

（2）e-Learning 専門スタッフ配置および VOD コンテンツ制作

平成 22 年度に大学教育連携センターに e-Learning 専門スタッフを 1 名新規に雇用し、VOD コンテンツ制作や学習管理システムの管理・運用、利用時の学生に対するサポート体制を強化した。

VOD コンテンツ制作に向け、まず制作スケジュールの調整を図った。平成 22 年春より各大学で平成 23 年度および平成 24 年度提供の VOD 方式の単位互換提供科目について調査を行い、夏休みまでにスケジュール調整を行った。全連携校からの VOD 提供科目を早期に確認したことで、コンテンツ制作を計画的に行い、科目設定においても他の連携校と調整を行うことができ、学生に対して提供教育領域と教育手法の多様化につなげることができた。平成 22 年 8 月より VOD 科目の撮影・編集を開始し、平成 22 年度後期より 3 科目を配信した（写真 1）。配信した科目については内容の正確性と鑑み、概ね 3 年間は継続して VOD 方式科目として提供する予定である。修正が必要な場合は各提供科目・担当講師個別に対応する。平成 23 年度配信用のコンテンツについても、平成 22 年度後期に撮影・編集を行い、他の科目についても随時、平成 23 年度に継続して撮影・編集を行う予定である。

VOD コンテンツの撮影は岡山理科大学でのスタジオ撮影を基本としており、VOD 科目担当講師が岡山理科大学まで出向き、撮影を行っている（写真 2）。撮影および編集業務は大学教育連携センターの e-Learning 専門スタッフが行っている。試験的に平成 22 年度後期に、就実大学の「日本美術史 b」（平成 23 年度後期提供）について毎週の対面授業を撮影に行ったが、90 分間続けての撮影で撮り直しができない点などスタッフ側の負荷が大きく、また担当講師も追加・修正等あれば別撮りが必要となるなどの課題があり、現段階ではスタジオ撮影を基本としている。

なお、岡山理科大学から配信する科目のうち 3 科目（インターネット入門、アルゴリズム入門、環境考古学）は、加計サイバーキャンパスからコンテンツの提供を受けている。

（3）講習会の実施

①多地点接続用サーバー操作講習会

平成 22 年度後期の授業開始前に当該開講期に多地点接続用サーバーを用いてライブ方式による遠隔授業配信を行う可能性がある大学（岡山商科大学、倉敷芸術科学大学）の関係者に集ってもらい、9 月 9 日に本サーバーの操作方法について設置業者による講習会を行った。この多地

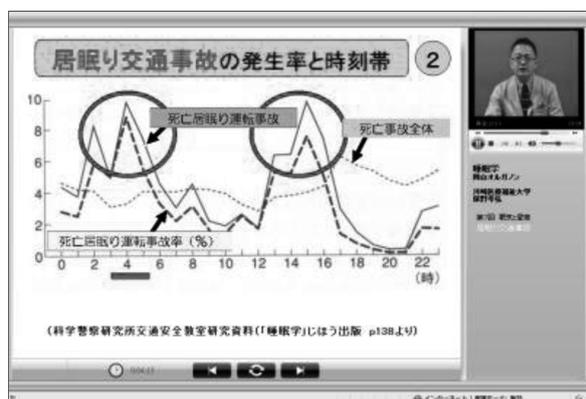


写真 1 VOD 授業の画面



写真 2 スタジオ撮影の様子

点接続用サーバーは通常のテレビ会議システムのリモコン操作とは異なるため、多地点接続用サーバーに接続されたコントロールパソコンを使用する必要があった。多地点接続用サーバーへのパソコンからの制御方法、「ルーム」や「議長権限」の考え方などについての説明を行った。なお、他の連携校関係者に対しても、平成 23 年 3 月に操作説明を行った。

②ICT 活用教材作成講習会

ICT 活用教材作成講習会とは、教職員に対して e-Learning 活用法や VOD 教材作成法の講習会を開き、その手法や取組における必要性について学習する機会として開催する講習会である。ICT 技術を用いた教育実施の普及率は低く、講習会を実施することで教職員が積極的に e-Learning 活用法や VOD 教材作成法について、特に本取組事業で導入するライブ型遠隔授業や VOD 型 e-Learning について、深くそして広く学習・習得し、多様な教育の提供につなげたいと考えた。

まず、平成 21 年度の ICT 活用教材作成講習会は e-Learning 運営委員会と同日の平成 22 年 3 月 25 日（木）15:00～15:30 に岡山理科大学で実施した。参加者は各大学から選出された e-Learning 運営委員 28 名であった。今回の講習会は、平成 22 年度に稼働する学習管理システムの機能や加計教育コンソーシアムでの VOD 型 e-Learning の実際の運用手法についての講習会を行った。

続いて、平成 22 年度には、9 月 1 日（水）13:00～16:30 に「e-Learning 著作権セミナー ～e-Learning における著作権の取扱いについて～」(講師：放送大学 ICT 活用・遠隔教育センター 尾崎 史郎 教授)と題して、テレビ会議システムを活用した同時ライブ中継による講習会を行った。メイン会場は岡山理科大学であり、多地点接続装置を用いてサテライト会場として 12 の大学、合計 131 名（教員：73 名、職員：58 名）が参加した。VOD コンテンツに含まれる著作権の取り扱いについて、講師が著作権について e-Learning に対する法整備が十分になされていない現状にも触れながらも、質疑応答で活発な議論が展開され、連携校教職員に理解を深めてもらうことができた。また、今回が初の多地点接続装置の本格的な運用となったが、マイク操作の不慣れ等で一時的に音が聞こえづらかったりノイズが入ったりしたものの、特段の通信不具合もなく無事に終わることができた。今回の運用により、参加者の多くからテレビ会議システムの活用について強い手応えを感じたといった感想が寄せられ、今後のさらなる活用が期待でき、その実現を目指していきたい。

5. e-Learning による単位互換制度の実施について

(1) 単位互換に関する連携校間の合意

これまで大学コンソーシアム岡山において、面接（対面）方式での単位互換制度が実施されてきている。学生が受入大学まで直接移動して受講する必要があり、岡山県南の一部の大学間での受講が中心となっていた。e-Learning による単位互換制度を新たに岡山オルガノンで整備し、平成 22 年度より学生に提供を開始した。

単位互換制度を開始するに当たり、大学コンソーシアム岡山で既に締結している「参加大学相互間の単位互換に関する協定書」を活用することとした。理由として、大学コンソーシアム岡山の仕組みを共同利用することは、補助事業終了後の円滑な事業展開も視野に入れており、これにより学生は既存の制度と同様の方法で単位履修することができる体制を整えられると考えたためである。そこで、連携校間で『「岡山オルガノン」の構築』事業における単位互換制度に関する『「大学コンソーシアム岡山」参加大学相互間の単位互換に関する協定書』の利用同意書』を作成

し、同意を得た。これに基づき、平成 21 年度中に、「平成 22 年度単位互換履修生募集要項」や履修手続きの流れ図（図 2、図 3）等を岡山大学オフィスが中心となり作成し、連携校に配布した。

（２）遠隔授業の実施

平成 22 年度遠隔授業科目として、ライブ方式 5 科目、VOD 方式 3 科目を配信した（表 8）。ライブ方式では、配信大学および受信大学の教職員や TA がテレビ会議システムの操作を担当し実施した。VOD 方式では、VOD 科目の担当教員や受講学生のヘルプ窓口として大学教育連携センタースタッフが対応した。実際に単位互換科目として実施したことで、テレビ会議システムや学習管理システムの使用法、定期試験実施方法等対面方式による授業とは異なる課題も把握でき、個々に対応したことで平成 23 年度以降の円滑な実施につなげることができた。

平成 23 年度はさらに科目を増やし、e-Learning による単位互換制度を継続して実施する予定である（表 9）。

6. 実践の成果と課題

テレビ会議システムの整備により、これまで他大学の授業を履修する場合は直接受講する大学まで学生が移動する必要があったが、今後は所属大学内の教室において他大学の授業を受講できるようになった。ただし、ライブ型遠隔授業に関しては大学間の授業時間帯の調整が今後の課題である。現在は、8:40、12:45、16:45 を共通の開始時刻として設定し、一部の科目で運用しているが、今後は開始時刻の徹底について連携校間で協議が必要である。また、大学間の学年暦の違いによる補講対策として、各配信大学では講義をビデオ撮影し、受講できなかった大学へ後日送付して、補講を行う体制を採用している。

また、平成 22 年度後期の 2 科目（倉敷まちづくり基礎論、倉敷まちづくり実践論）は土曜日開講を試験的に実施したが、土曜日に通常授業を行っていない大学では職員の配置等についても今後検討する必要がある。

テレビ会議システムの運用面ではノウハウの蓄積・共有化も必要であり、OHC（Over Head Camera）や RGB 信号スイッチャーの活用等、先行して連携校で導入・実用している方式等本取組での様々な実践例を通して連携校間でノウハウを蓄積していくことが肝要である。

表 8 平成 22 年度遠隔授業科目一覧

方式	開講期	科目名	大学名	履修者数	
ライブ	前期	経営学特殊講義Ⅰ（岡山経営学）	岡山商科大学	1	
		基礎環境医学（リベラルアーツ選択Ⅱ）	川崎医科大学	3	
	後期	経営学特殊講義Ⅱ（岡山経営学）	岡山商科大学	5	
		(3科目)	倉敷まちづくり基礎論	倉敷芸術科学大学	4
			倉敷まちづくり実践論	倉敷芸術科学大学	7
VOD	後期 (3科目)	アルゴリズム入門	岡山理科大学	8	
		スポーツ産業論	吉備国際大学	53	
		睡眠学	川崎医療福祉大学	117	
合 計				198	

表 9 平成 23 年度遠隔授業科目一覧

方式	開講期	科目名	大学名
ライブ	前期 (7 科目)	大学と社会	岡山大学
		経営学特殊講義Ⅰ (岡山経営学)	岡山商科大学
		個人・社会と医療考	川崎医科大学
		哲学	川崎医療福祉大学
		倉敷まちづくり基礎論	倉敷芸術科学大学
		まちづくりインターンシップ	倉敷芸術科学大学
		特別支援教育総論	くらしき作陽大学
	後期 (7 科目)	音楽の鑑賞	岡山県立大学
		経営学特殊講義Ⅱ (岡山経営学)	岡山商科大学
		岡山学	岡山理科大学
		スポーツ栄養学	環太平洋大学
		倉敷まちづくり実践論	倉敷芸術科学大学
		宗教思想	山陽学園大学
		現代子ども学入門	中国学園大学
		VOD	前期 (6 科目)
環境と社会	岡山理科大学		
インターネット入門	岡山理科大学		
アルゴリズム入門	岡山理科大学		
音楽療法概論	くらしき作陽大学		
食心理学	くらしき作陽大学		
後期 (12 科目)	パーソナル ファイナンス :		岡山商科大学
	金融資産運用・不動産Ⅰ		
	環境と社会		岡山理科大学
	インターネット入門		岡山理科大学
	アルゴリズム入門		岡山理科大学
	環境考古学		岡山理科大学
睡眠学	川崎医療福祉大学		
レクリエーション論	環太平洋大学		
スポーツ産業論	吉備国際大学		
現代中国論	山陽学園大学		
日本人の思想	就実大学		
日本美術史 b	就実大学		
運動生理学	中国学園大学		

また、現在多地点接続装置の通信環境は NTT フレッツ・グループを使用しており、画質については一定の通信帯域が確保できるものとしているが、時間帯等によってはパケットロスが発生し映像の乱れはある時もある。しかし全般的に、音声の跡切れ等はなく授業での運用は可能である

と判断している。

VOD 方式では、学習管理システムの導入や e-Learning 用パソコンの設置により、パソコンを所有していない学生は大学のパソコン設置教室で、またパソコンを所有している学生はいつでも、どこでも居ながらにして、パソコンとインターネットの環境さえあれば、大学の授業を受講することができる環境が整った。

現在 VOD 方式の e-Learning を進めていく上での課題は、大きく分けて 2 点ある。1 点は VOD の撮影方法についてである。当初 VOD の撮影については、実際の教室での授業を撮影する方法とスタジオで撮影する方法を想定していた。ただ、VOD コンテンツ制作を行う人員が不足しており、毎週授業が行われている大学まで出向き撮影することは実際上困難であり、また撮影と同時に PowerPoint の画面とカメラ映像を同期させながら編集を行うため、各大学での撮影者代理も立てにくいのが現状である。そこで、現在はスタジオ収録を原則としているが、VOD コンテンツ制作では、各連携校から教室での授業撮影への要望も出ており、今後より汎用性の高い撮影の方法を検討する必要がある。

もう 1 点は VOD コンテンツに含まれる著作権の取り扱いの方法である。VOD をインターネット上で配信することは、現行の法律では登録された限られた会員にのみ公開されるとは言え、「公衆送信」とみなされ、著作物の使用について著作権者から許諾を得る必要がある。そのため、VOD コンテンツに含まれる第三者の著作物や VOD コンテンツ自体の著作権をどのように扱うか、また通常の教室で行われている授業を VOD コンテンツとして作成した場合学生の発表等の著作権や学生の肖像権をどのように扱うか等、一定のガイドラインを作成し、連携校間で共通認識を図る必要があり、その整備を急ぐ必要がある。

また、単位互換制度として連携校の学生への PR・広報活動についても今後の課題である。これまで単位互換制度が学生に十分に浸透していなかった点、および面接（対面）方式と遠隔方式の違いについてより学生にわかりやすく説明し、履修者の拡大を図っていく必要がある。そのためには、広報手法も重要であるが、学生にとって興味・関心の強い科目を提供することや、また教職課程や資格取得のための科目などを連携校間で共有することで、学生により活用してもらえると考えている。教職課程においては、今回連携している 15 大学中 14 大学で課程認定されており、こうした教育の共有化も十分に考えられる。ただし、その際一大学の教員に負荷がかかってしまうことのないよう、教員評価への反映や待遇面等での各連携校の配慮も必要になってくるが、十分な議論ができていないのが現状である。

7. おわりに

『岡山オルガノン』の構築」事業では、ライブ方式および VOD 方式による遠隔授業を岡山県内の連携する大学間で初めて導入した。こうした取り組みにより、学生に対して多様な媒体を活用したより質の高い教育の提供が可能となったが、実施面において多々課題は残る。しかしながら、新たな教育手法が岡山県内の大学にもたらされ、また大学間で教育の共有化が図られた点は大きな成果である。さらに、平成 21 年度より検討を始め、平成 22 年度は 8 科目、平成 23 年度は 31 科目が単位互換による遠隔授業科目として配信される点は、高く評価できると自負している。今後継続して取り組んでいくことで、連携校各大学の特色を出しながら、有効的な活用がさらに図られるはずである。

本事業の実施に当たり、本学情報処理センターにはライブ型授業の受講室、および通信機器の

設置場所の提供など、多大なご協力をいただいたことに対し感謝いたします。また、学習管理システムの運用に関して、多くのご指導とご協力をいただいた、総合情報学部情報科学科・大西研究室の方々、および加計サイバーキャンパスの関係者の方々にも感謝申し上げます。

参考文献

1. 岡山オルガノン大学教育連携センター, 「岡山オルガノン」の構築 -学士力・社会人基礎力・地域発信力の融合を目指した教育- 中間報告書 (平成 21 年 9 月～平成 22 年 9 月) (2010).
2. 岡山オルガノン公式ホームページ, <http://okayama-organon.jp/>
3. まなびオルガノン, <https://manabi-organon.jp/>
4. 大学コンソーシアム岡山, <http://www.consortium-okayama.jp/>
5. 文部科学省ホームページ, <http://www.mext.go.jp/>

LMS「MOMOTARO」Ver.9 の特徴

三木 啓一郎, 大西 荘一, 井川 真弓, 時岡 貴幸, 大倉 将人

岡山理科大学大学院 総合情報研究科 情報科学専攻

1 はじめに

岡山理科大学ではインターネットを利用した大大・高大連携授業を提供する「加計サイバーキャンパス」を平成 17 年に開設し、継続している。加計サイバーキャンパスは本学情報科学科大西研究室で開発された Web アプリケーションである LMS (Learning Management System) 「MOMOTARO」で構築されている。現在では、加計サイバーキャンパス[1]をはじめ、吉備国際大学の通信教育用「メディア授業」[2]、岡山オルガノンの「まなびオルガノン」[3]、岡山理科大学専用の「岡山理科大学学習管理システム」[4]、科学 Try アングル岡山の「KTO サイバースクール」[5]の 5 つの e-Learning システムが MOMOTARO で構築されている。開発が開始されてからほぼ 10 年が経った今でも、これらの利用者やシステム管理者から改善の案、要望が尽きることは無く、日々様々な機能の追加や既存の機能の改善が行われている。本論文では 2011 年 3 月に行われたバージョンアップについて述べ、その機能や必要性について考察する。

2 加計サイバーキャンパス

2.1 受講生数

平成 23 年度の配信科目数は前期後期ともに 21 科目である。平成 21 年度、平成 22 年度及び 23 年度前期の受講者数を表 1 に示す[6]。

表 1 平成 21・22・23 年度加計サイバーキャンパス学校別履修者数

	岡山理科大学	倉敷芸術大学	千葉科学大学	吉備国際大学	九州保健福祉大学	吉備国際大学短大部	高等学校	計
21 年度前期	1249	111	51	7	20	4	35	1477
後期	1460	94	77	17	124	2	24	1798
合計	2709	205	128	24	144	6	59	3275
22 年度前期	1331	22	8	19	23	0	27	1430
後期	1469	22	23	13	56	0	22	1605
合計	2800	44	31	32	79	0	49	3035
23 年度前期	1199	23	11	10	44	0	24	1311

3 LMS「MOMOTARO」

3.1 概要

LMS「MOMOTARO」とは、大西研究室で独自開発された Learning Management System（学習管理システム）である。動画配信と遠隔授業の支援機能を持ち、大学間連携教育や高大連携教育を可能にしている。平成14年に Ver1.0 が開発されてから現在まで新機能開発が繰り返され、最新は Ver9.1 が使用されている。

3.2 主な機能

MOMOTARO は講義を提供する科目を逐次追加し、科目ごとに管理する手法を取っている。主な機能としては「動画配信」、「アンケートの提出・集計機能」、それに伴った受講者の「出席管理」、PDF等の「資料配布」、「課題提出機能」、「テスト問題作成・採点機能」、「コミュニケーション機能（メール、チャット、掲示板）」、「お知らせ機能」、「ライブ授業サポート機能」などが挙げられる。

3.3 現在の MOMOTARO 利用状況

現在 MOMOTARO が利用されている遠隔授業サービスを列挙する。前述した「加計サイバーキャンパス」、「岡山理科大学学習管理システム」、「メディア授業」、文部科学省戦略GPの「まなびオルガノン」、文部科学省戦略GPの「KTO サイバースクール」の計5つの e-Learning システムに MOMOTARO は利用されている。「加計サイバーキャンパス」、「まなびオルガノン」、「メディア授業」のサーバは業者のデータセンタに、「岡山理科大学学習管理システム」は本学情報処理センターに、「KTO サイバースクール」は大西研に、それぞれ設置されている。

これらの利用者のニーズは若干異なっている。MOMOTARO は近年各種設定によるフレキシブル化を進めており、ニーズにあわせて各機能を選択することが可能である。

4. Ver.9 で追加及び改善された主な仕様

4.1 受講生 ID の登録

講義を受講する利用者は最初に ID の登録を行う。後述する CSV による自動一括登録も行えるが、各期第一回目の講義で手作業で必要事項を入力し登録を行っている。（図1）

■ 受講登録

氏名(漢字)	姓: <input type="text"/> 名: <input type="text"/> 注: 全角で入力してください
氏名(カタカナ)	姓: <input type="text"/> 名: <input type="text"/> 注: 全角で入力してください
所属高校・大学	<input type="text"/> 所属を選択してください
学部	<input type="text"/> 所属を選択してください
学科	<input type="text"/> 所属を選択してください
学年・権限	<input type="text"/> 選択してください
学生番号	<input type="text"/>
E-Mail	<input type="text"/> ▼ 確認のため、もう一度入力してください。
パスワード	登録完了後、あなたの認証パスワードとなります。 忘れないようにしてください。 6文字以上20文字以内で入力してください。 ▼ 確認のため、もう一度入力してください。

図1. 新規受講登録画面

■ 受講登録

ID	<input type="text"/> 注: 半角英数字で入力してください
氏名(漢字)	姓: <input type="text"/> 名: <input type="text"/> 注: 全角で入力してください
氏名(カタカナ)	姓: <input type="text"/> 名: <input type="text"/> 注: 全角で入力してください
所属高校・大学	<input type="text"/> 所属を選択してください
学部	<input type="text"/> 所属を選択してください
学科	<input type="text"/> 所属を選択してください
学年・権限	<input type="text"/> 選択してください
学生番号	<input type="text"/>
E-Mail	<input type="text"/> ▼ 確認のため、もう一度入力してください。
パスワード	登録完了後、あなたの認証パスワードとなります。 忘れないようにしてください。 6文字以上20文字以内で入力してください。 ▼ 確認のため、もう一度入力してください。

図2. IDを指定する受講登録画面

ログイン時などに必要となる ID は、ver7 までは受講生の利便性を考慮して登録時に MOMOTARO により自動生成されていた。しかし、受講生が ID を忘れてしまうトラブルが多発したため、ver8 では登録時に受講生の意思により手入力で ID の文字列を入力する機能を追加した(図 2)。Ver9 ではそれに加えてさらに管理者の利便性を考慮して ID の一括登録機能を追加した。自動生成かマニュアル入力かはシステムの設定で選択することができる。

CSV ファイルによる一括登録

学生 ID を一括して登録する手法として MOMOTARO は CSV ファイルによる一括登録機能を実装している。CSV ファイルとはカンマ区切りのテキストファイルであり、excel ファイルを変換して使うことが想定されている(図 3)。[7]

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	I101000	I101000	テスト	学生1	テスト	ガクセイ	U1	test1@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
2	I101001	I101001	テスト	学生2	テスト	ガクセイ	U1	test2@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
3	I101002	I101002	テスト	学生3	テスト	ガクセイ	U1	test3@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
4	I101003	I101003	テスト	学生4	テスト	ガクセイ	U1	test4@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
5	I101004	I101004	テスト	学生5	テスト	ガクセイ	U1	test5@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
6	I101005	I101005	テスト	学生6	テスト	ガクセイ	U1	test6@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
7	I101006	I101006	テスト	学生7	テスト	ガクセイ	U1	test7@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
8	I101007	I101007	テスト	学生8	テスト	ガクセイ	U1	test8@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
9	I101008	I101008	テスト	学生9	テスト	ガクセイ	U1	test9@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	インターネット
10	I101009	I101009	テスト	学生10	テスト	ガクセイ	U1	test10@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	危機管理
11	I101010	I101010	テスト	学生11	テスト	ガクセイ	U1	test11@a.b	aaaaaa	岡山理科大学	総合情報学部	情報科学科	危機管理



Excel 上で変換

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	I101000,I101000,テスト,学生1,テスト,ガクセイ,U1,test1@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
2	I101001,I101001,テスト,学生2,テスト,ガクセイ,U1,test2@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
3	I101002,I101002,テスト,学生3,テスト,ガクセイ,U1,test3@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
4	I101003,I101003,テスト,学生4,テスト,ガクセイ,U1,test4@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
5	I101004,I101004,テスト,学生5,テスト,ガクセイ,U1,test5@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
6	I101005,I101005,テスト,学生6,テスト,ガクセイ,U1,test6@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
7	I101006,I101006,テスト,学生7,テスト,ガクセイ,U1,test7@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
8	I101007,I101007,テスト,学生8,テスト,ガクセイ,U1,test8@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
9	I101008,I101008,テスト,学生9,テスト,ガクセイ,U1,test9@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット												
10	I101009,I101009,テスト,学生10,テスト,ガクセイ,U1,test10@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,危機管												
11	I101010,I101010,テスト,学生11,テスト,ガクセイ,U1,test11@a.b,aaaaaa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,危機管												

図 3 Excel で作成された一括登録用ファイルと変換された CSV ファイル

この CSV ファイルを MOMOTARO 管理者ページ内の『CSV による受講生追加』画面から読み込ませると図 4 のようになる。

ID	氏名	カナ	学生番号	所属	学年	メールアドレス	パスワード	受講科目
A110003	テスト学生1	テストガクセイ	I101000	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test1@a.b	aaaaaa	インターネット 入門,
A110004	テスト学生2	テストガクセイ	I101001	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test2@a.b	aaaaaa	インターネット 入門,
A110005	テスト学生3	テストガクセイ	I101002	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test3@a.b	aaaaaa	インターネット 入門,
A110006	テスト学生4	テストガクセイ	I101003	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test4@a.b	aaaaaa	インターネット 入門,
A110007	テスト学生5	テストガクセイ	I101004	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test5@a.b	aaaaaa	インターネット 入門,

図 4 MOMOTARO システム上で登録した例

CSV ファイル書式

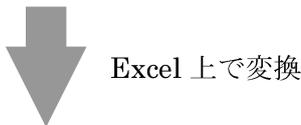
左から ID, 学生番号, 苗字, 名前, 苗字フリガナ, 名前フリガナ, 学年, メールアドレス, パスワー

ド、学校、学部、学科、受講科目(カンマ区切りで複数登録可能)となる。

ID が自動登録の場合 CSV に記述された ID 部分は無視される。また、空白や LMS 内に存在しない学校名、学部名、学科名、科目名はエラー扱いとされ登録を行えないようにしている。(図 5)

```

70 80 90 100 110
aa,岡山理科大学,,情報科学科,インターネット入門↓
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,↓
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
aa,岡山理科大学,総合情報学部,情報科学科,インターネット入門
    
```



学生番号	所属	学年	メールアドレス	パスワード	受講科目
I10I000	組織コードが存在しません	U1	test1@a.b	aaaaaa	インターネット入門,
I10I001	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test2@a.b	aaaaaa	インターネット入門,
I10I002	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test3@a.b	aaaaaa	インターネット入門,
I10I003	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test4@a.b	aaaaaa	空白,
I10I004	岡山理科大学 総合情報学部 情報科学科	U1	test5@a.b	aaaaaa	インターネット入門

図 5 空白部がある CSV ファイル登録時の挙動

また、CSV ファイルを読み込んだ際にデータベースに氏名、学生番号を既に登録されている受講生の情報と照合し、合致しておれば受講科目のみを反映させる。既に受講登録されているが CSV ファイル上にその科目の登録が無い場合は『その科目の第一回目の講義に出席し受講生が受講登録を行ったが教務部に提出した受講届に記入漏れがあった』と見なし受講登録を削除する。CSV 上に受講科目として記載されているにもかかわらずデータベース上で受講登録されていない場合はそのまま受講登録を行う。

IDとパスワード

ID とパスワードが同一なのは、セキュリティの面から好ましい状態ではない。MOMOTARO システムでは、ID と同一のパスワードを設定できないようにしている。新規受講登録画面からの通常の登録時に同一のパスワードを受け付けなくすることはもちろんだが、既に登録済みの ID でパスワードが ID と同一に設定されているものは、ログイン後のトップ画面で科目が表示される右側のカラムを非表示にし、パスワード変更を促す注意文が表示される。



図 6. 通常時のトップ画面

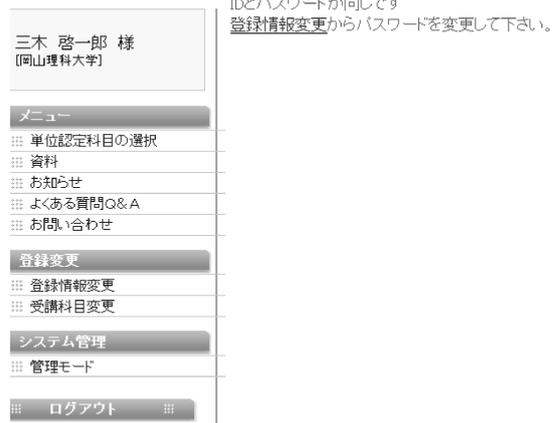


図 7. ID とパスワードが同一の場合のトップ画面

4.2 出席カード

ログの一括抽出

学生が対面授業出席時及び VOD 視聴後に提出するアンケートを出席カードと呼び、その提出をもって出席としている(図 8)。アンケートであるため、当然その結果を講師が閲覧する機能は備わっていたが、Ver8 までは各アンケートの結果を個別に表示することしかできなかった。学生の出席状況や成績の書類を作成する際、全ての学生の全ての出席カードを順に開き、内容をコピー&ペーストして一つの文書にまとめる必要がありかなり面倒であった。この問題を解決するため、これら個別の出席カードを一括して見られる形式に整形し、外部のエディターで閲覧できるような形式に出力する機能が要求され、ワンクリックで CSV 形式の出席カード一覧表を出力する機能を開発し、Ver9 に実装した。

■ 提出物

出席アンケート 【第0回 ネットワーク基本技術】制限時間: 制限なし 問題数: 4

この講義はLIVEで受講しましたか? (必須)

Yes No

(01) 本日の講義でよく理解できた(役立った)内容 (アンケート) (必須)

(02) 本日の講義で難しかった内容 (アンケート) (必須)

(03) 今回の講義の感想 (アンケート) (必須)

(04) 授業の難易度はどうでしたか? (アンケート) (必須)

難しかった
 やや難しかった
 普通
 やや優しかった
 優しかった

図 8 出席カード例

	A	B	C	D	E	F
1	科目名	インターネット入門				
2	提出者	学生番号	ID	提出回	提出日時	出席カード内容
	テスト学生1	I10I000	A110003	1	2011/06/2	(1) 授業の難易度を選択してください。(易しい1~5難しい)(必須) : 4 (2) 新しい発見があれば記述してください。 : (3) 理解できなかった点や質問などがあれば記述してください。 : ルータとハブの違いが分からなかった。 (4) その他感想などを記述してください。(必須) : 難しい用語が多く内容が理解し辛かった。
3	テスト学生1	I10I000	A110003	2	2011/06/2	(1) 質問内容 授業の難易度を選択してください。(易しい1~5難しい)(必須) : 少し優しい (2) 新しい発見があれば記述してください。 : (3) 理解できなかった点や質問などあれば記述してください。 : (4) インターネットの特徴を箇条書きで列挙しなさい。(必須) : 動画を見るなり調べものしたりする (5) その他感想などを記述してください。(必須) : 講義内容の説明を聞いた

図 9 出力された CSV ファイルの例

4.3 返信メールフォームの改善

各科目の出席確認画面には、受講者へメールでコメントを送信する機能がある。旧バージョンではこの入力欄が全角 21 文字×5 列と若干小さく設定されており、長文のメールを記入する時に見づらく、受講者へ頻繁に長文を送る利用者にとっては使いにくかった。そのためこの記入欄を全角 43 文字×10 列まで拡張した。

4.4 出席カードの講師コメント機能の改善

旧バージョンでは学生の出席カードに対する講師のコメントは上項で述べた出席確認画面のコメント送信欄のみであったため、出席カードに対する個別の講師コメント送信する場合、出席確認画面から出席カードを開いて、その内容を確認し、再度出席確認画面に戻ってコメントを送信する必要があり、きわめて操作性が悪く、講師の負担となっていた。今回、出席カードのページにコメント欄を設け、同一ページ内からコメントの送信が行えるよう改善した。また、講師が出席カードに対しコメントを送信したかどうかの確認を出席確認画面で容易に判断できるよう、コメントを送信した場合ピンク色に色付けた。したがって、講師が出席カードの内容を確認した場合緑色、さらにコメントを送信した場合はピンク色になる。(図 10)

今回の改善で、講師の出席カードに対するコメントの送信が容易になり、教育の質向上につながると考える。

The screenshot shows the '出席確認画面' (Attendance Confirmation Screen) with a table of students. An arrow points from the '出席マークをクリック' (Click attendance mark) instruction to the table. Another arrow points from the '出席カード' (Attendance Card) label to a detailed view of a student's card. This view includes a '提出物内容確認' (Submission Content Confirmation) section with a table of items and their content, a '確認チェック欄' (Confirmation Check Column) with a checked box for '提出物確認' (Submission Confirmation), and a text area for '以下に入力した内容を受講生に送信する' (Send the following input content to the student). A final arrow points from the '確認チェックボックスを選択し 提出物確認ボタンをクリック' (Select the confirmation check box and click the submission confirmation button) instruction to the checked box.

名前	学生番号	所属△	1	2	3	4	5
テスト学生1	I10I000	岡山理科大学	L	L	L	L	L
テスト学生2	I10I001	岡山理科大学	L	L	L	L	L
テスト学生3	I10I002	岡山理科大学			L	L	L
テスト学生4	I10I003	岡山理科大学	V	V	V	V	V

出席確認画面

出席マークをクリック

項目	内容
(1) 質問内容 授業の難易度を選択してください。(易しい1~5難しい)(必須)	普通
(2) 新しい発見があれば記述してください。	
(3) 理解できなかった点や質問などあれば記述してください。	
(4) インターネットの特徴を箇条書きで列挙しなさい。(必須)	相互通信が可能である。
(5) その他感想などを記述してください。(必須)	ハブとルータの違いが分からなかった。
提出時間	2011/06/25(土) 13:53:51
提出IPアドレス	localhost
提出件数	0

出席カード

1	2	3	4	5
L	L	L	L	L
L		L	V	
V	V	V	V	V

確認チェック欄: 提出物確認

以下に入力した内容を受講生に送信する

出席カードの内容を確認
確認チェックボックスを選択し
提出物確認ボタンをクリック

送信情報を自分の登録メールアドレスに送信する。
確認画面へ

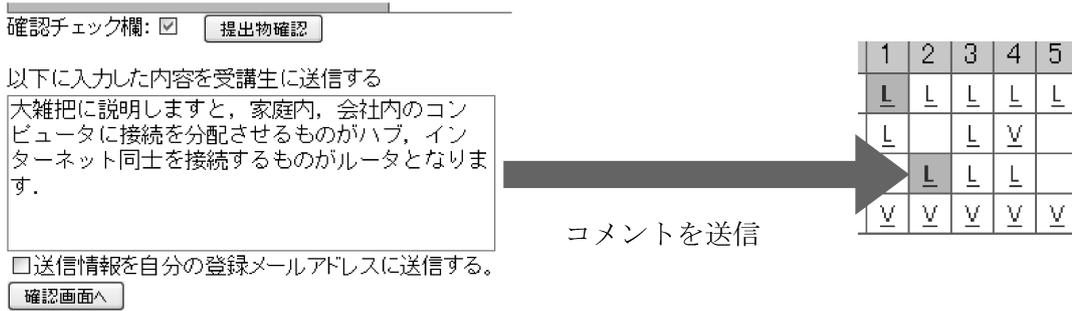


図 10 コメント返信と確認マーカー変動の流れ

4.5 メールログの一括ダウンロード

旧バージョンでは各メールのログを一括で見ることができず、内容を確認するには逐一クリックして個別の画面を呼び出す必要があった(図 11)。講師にとって大変手間と労力を強いていた。Ver.9 に各メールのタイトル、送信者、送信先、送信日時、本文を羅列した CSV ファイルを出力する機能を追加した(図 6.2)。

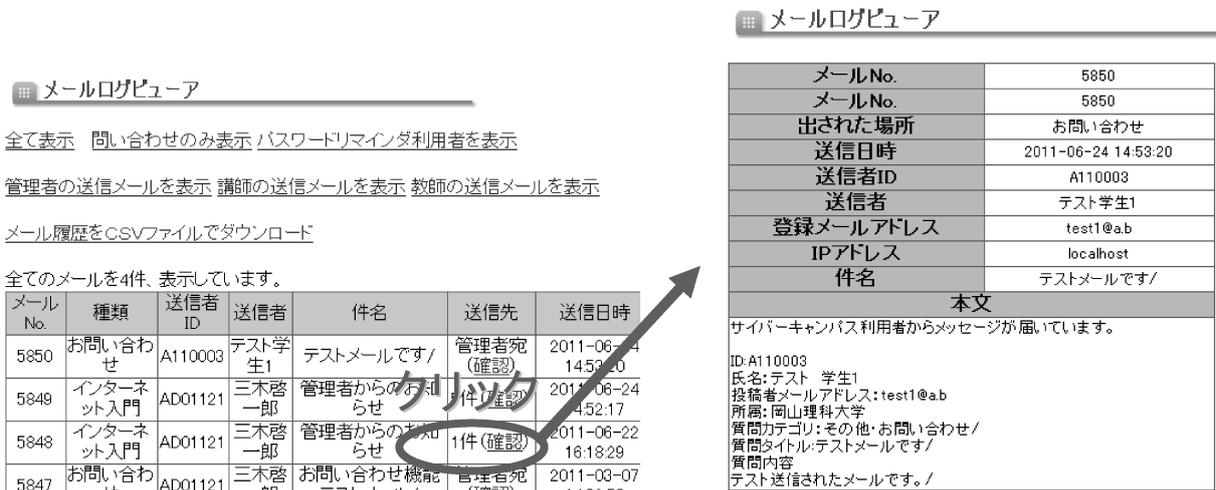


図 11 表示されるメールログ

	A	B	C	D	E	F	G
1	メール番号	種類	送信者	送信先	送信日時	タイトル	本文
	5850	お問い合わせ	テスト学生1	管理者宛	2011/6/24 14:53	テストメールです/	サイバーキャンパス利用者からメッセージが届いています。 ID:A110003 氏名:テスト 学生1 投稿者メールアドレス:test1@ab 所属:岡山理科大学 質問カテゴリ:その他_お問い合わせ/ 質問タイトル:テストメールです/ 質問内容 テスト送信されたメールです。/
2	5849	インターネット入門	三木啓一郎	テスト学生3 テスト学生4 テスト学生5 テスト学生6 テスト学生7	2011/6/24 14:52	管理者からのお知らせ	“受講者名”さん サイバーキャンパス 管理者からのお知らせです。 テスト送信です。
3	5848	インターネット入門	三木啓一郎	テスト学生1	2011/6/22 16:18	管理者からのお知らせ	“受講者名”さん 管理者からのお知らせです。 test
4							サイバーキャンパス利用者からメッセージが届いています。

図 12 出力された CSV ファイル

4. 6 教科別お知らせ最終更新日時表示

MOMOTARO にはログイン直後のトップページに表示される「全体へ向けてのお知らせ」と、「各教科ごとのお知らせ」の二種類のお知らせ機能が実装されている。過去のバージョンでは教科別お知らせは各教科をクリックすると表示される教科別メイン画面に表示されていた。各教科をクリックし、逐一教科別メイン画面を表示しなければ、教科別のお知らせの更新状況が分からなかった。Ver. 9 ではトップページに各教科のお知らせの更新状況が分かるように最終更新日時欄を設けた。

5. おわりに

LMS 「MOMOTARO」は、開発を開始してからほぼ10年になる。大学間連携、高大連携等の独立した組織間の連携を可能にする機能、教育の質を向上させる機能、講師の作業を支援する機能等、仕様はかなり充実してきたが、LMSは奥が深くまだ「完成」とは言えない。今後、個々の機能を向上させるとともに、新しくユニバーサルデザイン、e-ポートフォリオ、他システムとの連携に取り組みねばならない。また、近年伸長著しいスマートフォンの対応も深める必要がある。

インターネットはワールドワイドである。LMS 「MOMOTARO」も当然国際化を考えねばならない。

LMS 「MOMOTARO」のもとに教育機関、企業、一般家庭、行政機関等、様々な組織が連携し新しい教育の仕組みを作ることが最終的な目標である。

謝辞

LMS 「MOMOTARO」の開発に有益なご助言をいただきました。加計学園グループの関係者、戦略G P 「科学トライアングル岡山」の関係者、戦略G P 「岡山オルガノン」の関係者、の方々に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Cyber Campus サイバーキャンパス <http://cyber.kake-group.jp/>
- [2] Media Lectures メディア授業 <http://media-tei.jp/>
- [3] まなびオルガノン <http://manabi-organon.jp/>
- [4] 学習管理システム(岡山理科大学情報処理センター) <http://momotaro.std.ous.ac.jp/>
- [5] KTO サイバースクール <http://kto.mis.ous.ac.jp/>
- [6] 井上善勝「プログラム開発環境の構築と学習行動解析機能付き LMS の開発」
- [7] Tech 【第 63 回】 PHP で CSV データ出力 <http://blog.promob.jp/fri/2010/02/phpcsv.html>