

化学系企業で物理と化学の狭間で 考えてきたこと ～コウモリ研究者の戯言～

佐々木裕

東亜合成

November 26, 2021

- ① はじめに
 - はじめに
 - 自己紹介
 - モデル化への私のあがき
- ② 考えてきたこと
 - モデル化による現象の理解
 - 化学と物理
 - 抽象的と具体的
- ③ 私のおすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で考える

はじめに

シンポジウムのタイトル

「計算で物事を理解する予測する」
～産業界の実問題に立ち向かうサイエンス～
22人の計算科学と先端実験の先駆者たちが
産業界の実問題解決への手掛かりを開示します。

はじめに

シンポジウムのタイトル

「計算で物事を理解する予測する」
～産業界の実問題に立ち向かうサイエンス～
22人の計算科学と先端実験の先駆者たちが
産業界の実問題解決への手掛かりを開示します。

私のお話

- 「理解する」という人間の行動について、フォーカス
 - 合成化学系出身の企業研究（開発）者が
 - ソフトマター関連のシミュレーションを通して、
 - 考えてきたことを紹介。
- 21人の計算に関するタイトなお話 + おまけの与太話

自己紹介

大学時代

- 大学で三年留年し、あわや放校処分
- 望まぬ道の化学系へ（合成化学工学科）
- 学部で就職できずに、修士へ
- 研究の面白さに気づく
 - ジビニルエーテルの環化重合によるクラウンエーテル類縁体
 - Host-Guest Chemistry

企業に就職後

- 合成化学をベースとし、材料設計
 - ChemDraw の絵を、材料機能へ意味づけ
 - 経験知に基づく設計
- 留学を機会に新規材料
 - その特性評価から、材料設計の道へ
 - 例えば、レオロジー
- その後シミュレーションへ手を広げる

私の研究歴

- もともとは合成ベースの化学系出身
- カチオン重合性評価から、MO シミュレーションへ
- 高分子系材料一般の探索指針を求めて、メゾスケールシミュレーションへ。

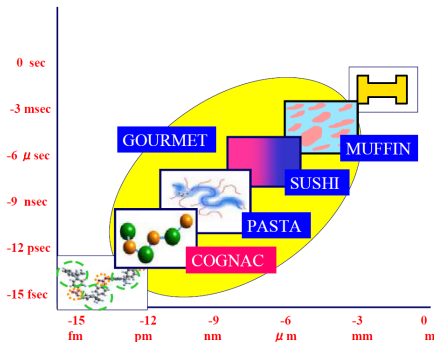
実際の内容

- 光硬化型材料の開発において
 - 各種分子構造の試作と要求特性との相関を模索
 - オキセタン化合物の有効性の再発見
- シミュレーションをベースとしたモデル化へ
 - オキセタンの反応性について
 - 表面偏析のモデル化
 - ネットワークポリマーとネットワーク理論
 - フルアトム MD シミュレーションと粗視化

OCTA との出会い

OCTA とは

- ソフトマテリアルに対する統合的なシミュレータ
 - COGNAC、PASTA、SUSHI、MUFFIN
 - GOURMET というシミュレーションプラットフォーム



- マルチスケール
- マルチフィジックスの統合
- シームレス
ズーミング

統合的な理解を目指して

- マルチスケールな取り扱いで階層的な構造をイメージ
 - メゾスケールの重要性
 - ローカルには、自由エネルギーを最小化
 - ローカルの微視的状态の個数倍 \neq グローバル
 - 実事象では、平衡状態を達成できるとは限らない
 - 時間遷移の過程で準安定状態でトラップ
 - 開放系での議論も重要
 - 生物学での、ホメオスタシス（恒常性）
 - 自己組織化の理解
- マルチフィジックスは、人間の勝手な都合
 - 自然はあるがままに捉えるべき
 - 階層ごとの切り分けは無意味な場合も多い
- シームレスズーミングは幻想

実事象の統合的な理解は一筋縄では行かない！

自己組織化という概念

自己組織化という概念

- 材料開発でのナノテクノロジーという文脈で注目
- ボトムアップ式のナノテクノロジー
- 工学的には、自己集合体とは区別しない事が多い

自己集合体（平衡条件近傍で形成）とは区別する立場

プリゴジンの散逸構造

- 非平衡開放系において
- 平衡構造の不安定化
- 自発的に形成された秩序構造

J.M. Lehn の主張

- 超分子科学の提唱者
- 分子自身の分子情報に従って、機能を有する組織を形成

- ① はじめに
 - はじめに
 - 自己紹介
 - モデル化への私のあがき
- ② 考えてきたこと
 - モデル化による現象の理解
 - 化学と物理
 - 抽象的と具体的
- ③ 私のおすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で考える

モデル化による現象の理解

化学系の人間としての過去の自身に欠けていたもの

物理系では当たり前の考え方

「自然現象の背後にあるユニバーサリティーの理解と、
適正なレベルでのモデル化」

化学系企業でありがちな状態

- 教科書的なものの背後にある物理的、数学的な思想を理解することからの逃避
- 数式や物理モデルの盲目的な受認によるデータの処理
- 統計的な妥当性の確認の放棄
- 客観的な視点に基づく独立事象と従属事象の切り分けの放棄

化学と物理を比べると

化学のやり方

- 基本的には天下一を受容
 - 有り様を実感できない分子、原子を対象
 - 見えないものを受け入れる
 - 「誰が原子を見たか」
- 多様性を容認
- 熱力学が理解できていない人が、けっこう多い

物理的な考え方

- 事象に内在する一般性
- その本質に迫るためにモデル化
- 興味深い考え方：
揺動散逸定理、中心極限定理、線形応答理論、乱雑位相近似、臨界現象（転移における普遍性）、緩和挙動、スケーリング則、無次元化

ソフトマターでの印象派物理

- 印象派とは数学的な詳細をあえて大胆に無視することでシンプルに捉え、本質に迫るスタイルのこと
- 写実主義的物理との対比
- P-G de Gennes からのフランスでの潮流
- まわりの実験家とつねに対話をして、身の回りの事象に対して強い好奇心を持ち、斬新なアイデアを創出
- 大胆な発想での理解；「大いなる同一視」

抽象的に考える

- 抽象的ということを非現実的と捉え、「えそらごと」と読んでしまう人のなんと多いことか。

抽象とは

「抽象」という語については、「事物や表象からある性質・共通性・本質を抽（ひ）き出して把握する」つまり「象を抽き出す」という意味を持つ語

- 個々の事物の本質・共通の属性を抜き出して、**一般的な概念をとらえる**さま。
- 単に概念的に思考されるだけで、実際の形態・内容を持たないさま。

後者の意味の反意語は、**具体的**

抽象化は、モデル化に必須。

最近の風潮

最近の風潮

- 実事象はあまりに複雑で因果関係がわかりにくいにも関わらず、すぐに成果を求める。
- 具体的な対策、方法論を望む。
- シミュレーションに対しても考え方の指針ではなく、答えを求める。
- 概念的なものをあまり重視しない。
- そのようなアプローチは、汎用性を生み出さない。

単純化して概念へと昇華する方法論

抽象と捨象

- 捨象は捨てる行為に、フォーカスする。
- 単純化する際に、引き出す行為と捨てる行為
- どちらも不要なものに埋もれた中から、
本質につながる単純化
- 粗視化はどちらであるべきか？
- 高校時代の美術の熊井先生の走り回り画法
 - 目を細めて対象物を眺め、ディテールを無視して、
目に留まる主要な色を用いて下書き
 - 全体に共通なトーンや色合いの部分で、**全体に筆を走り回らせ**ながら書き込む。
 - 段階的に、微細なディテールへと

- ① はじめに
 - はじめに
 - 自己紹介
 - モデル化への私のあがき
- ② 考えてきたこと
 - モデル化による現象の理解
 - 化学と物理
 - 抽象的と具体的
- ③ 私のおすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で考える

MI への違和感

機械学習について

機械学習は特定の分野では非常に有効

- 回帰的手法をベースとした多変量解析
- 自動運転のようなフィードバック系

MI への違和感

- (一部の方に見られる) 思考を放棄したような無手勝流
- 少なくとも、MI を打ち出の小槌と捉えてはいけない。
- シミュレーションを実験の代替とする方法論は有効。
- 考えるための道具として有効活用すべき。
- 因果推論も確からしくできるようになってきたらしい
(昨日の杉山先生のお話)

あるべき状態

化学系研究者の立ち位置

- 試行錯誤ベースで実際に物質を合成することは必須
- 物理側からの理論的な成果を盲目的に受容しては駄目

あるべき状態

- 物理的な思考による事象の成り立ちの理解、および、モデル化への道すじを共有
- 目的を明確にし、適切な次元、スケール及び時間軸で、議論を行う
- 物質の多様性を前提とした化学的な方法論の整理と、適正なモデル化への挑戦
- 物理及び化学双方の方法論についての相互理解の深化

私のやり方

- 急がば回れ
- 備えよ常に
- 腑に落とす（落ちる）

私のやり方

- 急がば回れ
 - 慌ててやっても無駄
 - ゆっくりキチンと組み立てる
- 備えよ常に
- 腑に落とす（落ちる）

私のやり方

- 急がば回れ
 - 慌ててやっても無駄
 - ゆっくりキチンと組み立てる
- 備えよ常に
 - 見えないものにも前もって
 - 泥縄にならないように
- 腑に落とす（落ちる）

私のやり方

- 急がば回れ
 - 慌ててやっても無駄
 - ゆっくりキチンと組み立てる
- 備えよ常に
 - 見えないものにも前もって
 - 泥縄にならないように
- 腑に落とす（落ちる）
 - 消化して使いこなす
 - 頭でっかちにならない

他人の意見について

その道のプロの言うこと

- それなりの確からしさ
- 前提条件の確認が必要
 - 常識が異なる
 - 暗黙の了解が多数
- 素人が下手に使う怖さ

他人の意見について

その道のプロの言うこと

- それなりの確からしさ
- 前提条件の確認が必要
 - 常識が異なる
 - 暗黙の了解が多数
- 素人が下手に使う怖さ

「盲目的に
信じてはだめ」

自分の頭で考える

胃の腑に落とすということとは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
- Mathematics



<https://steam-japan.com/about/>

自分の頭で考える

胃の腑に落とすということとは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
- 成り立ちの美しさ
- 哲学的な統一性
- Mathematics



<https://steam-japan.com/about/>

自分の頭で考える

胃の腑に落とすということとは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
 - 成り立ちの美しさ
 - 哲学的な統一性
- Mathematics

消化（使いこなす）ために？

- 特定分野に囚われない
広範な知見
- 締め切りを決めない
- ゆっくり考える
- 自由な議論
- 数値化にこだわらない
- 目に見えないものを
大事に

まとめに代えて

私のアプローチ

- 自由に議論できる場の創設
 - Slack を利用して、「東海ソフトマター」という議論の場を設置
 - 大学、企業半々程度の参加者
 - それをベースに、Web 会議で「ザツダン会」を開催
- 基本的な知見の再整理
 - Moodle システムを利用して、LMS サイトを整備中
 - 自身の初心者としての疑問点にフォーカスして整理
 - 対象：レオロジー、高分子物理、統計等