

抽象的と書いて「えそらごと」と読んでしまう人たちへの、コウモリ研究者の戯言

簡単な自己紹介

- もともとは合成系の化学系出身
- カチオン重合性モノマーの反応性評価から、MOシミュレーションもどきへ。
- 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。

モデル化への私のあがき

- 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

化学のやり方

- 多様性の容認
- 教科書的なミクロを無批判に受容
- 熱力学が理解できていない人が、けっこう多い

物理的思考の重要性

- 物理の求める一般性
- 本質に迫るためのモデル化

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

御茶ノ水の奥村先生

P-G de Gennes

抽象と捨象を繰り返すモデル化

- 引き出す行為と捨てる行為
- 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？
- 熊井先生の「走り回り画法」

抽象的と具体的

- 抽象的ということ、非現実的と捉える人のなんと多いことか。
- 実事象はあまりに複雑で因果関係がわかりにくい。
- 最近の風潮として、すぐに成果を求める。
- 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。

私の考え方

- 急がば回れ
- 備えよ常に

基礎知識の汎用化

- データサイエンスの例
- データサイエンティストの中途採用
 - マネージメントの難しさ
 - プロの持ち腐れ
 - 現役データサイエンティストの満足度は低い
 - 手本がない
 - 周りの理解がない
 - スキルアップの時間がない
- 「データサイエンスの民主化」
 - 文系、数学苦手は関係ない
 - データをもとに客観的に考えるという基本的な概念
 - 関係者みんなに広く浅く
- 研究一般についても大事

マルチスケールとマルチフィジックス

マルチスケールが重要なのではなくて、階層的な構造

再帰的に捉えることもできるが、

ローカルには、エントロピー最大化（自由エネルギー最小化）

ローカルの個数倍 `ParseError: KaTeX parse error: Undefined control sequence: ¥new at position 1: ¥_n_e_w_` グローバル

準安定状態

生物学での、ホメオスタシス（恒常性）

自己組織化

分散システムでの自己安定化：フォールトトレラント

マルチフィジックスは、人間の勝手な都合

自然は、