

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

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。
- 実現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
- 「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