

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
 - 化学のやり方
 - 物理のやり方
 - 抽象的？
- ③ おすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で

はじめに

「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
- 21 人の計算に関するタイトなお話 + **おまけの与太話**
 - 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。

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

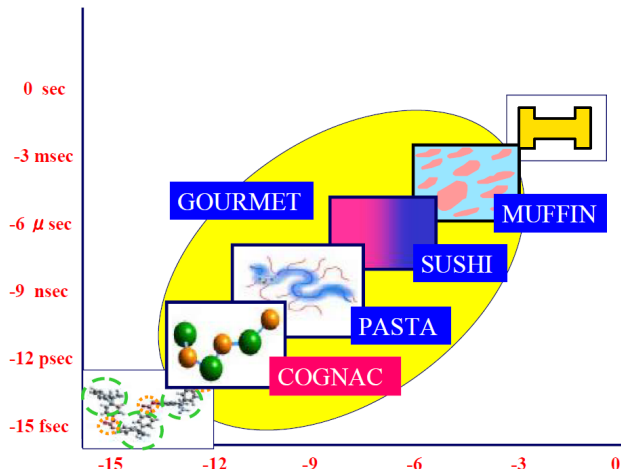
企業に就職後

- 合成化学をベースとし、材料設計
 - 経験知に基づく設計
 - ChemDraw の構造を無理やり機能へと意味づけ
- 留学を機会に新規材料
 - その特性評価から、材料評価の道へ
 - 例えば、レオロジー
- シミュレーションへと手を広げる

- 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
- 新規材料の探索
 - 光カチオン重合硬化型材料の探索
 - 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



マルチスケール？

- 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）
 - ローカルの微視的状态の個数倍 \neq 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
 - 自然はあるがままだに捉えるべき
 - シームレスズームリングは幻想

モデリングについて

化学系の人間としての過去の自身に欠けていたものが、物理系では当たり前の考え方である「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」だと感じてきました。

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
 - 化学のやり方
 - 物理のやり方
 - 抽象的？
- ③ おすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で

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

化学のやり方

- 基本的には天下りを受容
- 見えないものを受け入れる
- 分子、原子
- 有り様を実感できない
- 受験の影響（暗記科目としてすり込まれる）
- 多様性の容認
- 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

- 物理の求める一般性
- 本質に迫るためのモデル化
- 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

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 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

抽象

「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
Concrete, Specific

抽象と捨象

- 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

具体的に？

- 抽象的ということを、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。

機械学習への違和感

- （一部の方に見られる）思考を放棄したような無手勝流
-

- 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
 - 化学のやり方
 - 物理のやり方
 - 抽象的？
- ③ おすすめ
 - あるべき状態
 - 私のやり方
 - 自分の頭で

あるべき状態

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

この実材料の創成の過程において、化学系の研究者が物理側から提案された理論的な成果を盲目的に受け入れるのではなく、その背景を理解する必要があります。また、物理分野の人たちがモデルを構築する際に、物質に内在する多様性を実感しつつモデルの条件設定を適切に行っていただ

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
 - キチンと組み立てないと無駄
- 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
 - キチンと組み立てないと無駄
- 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
 - キチンと組み立てないと無駄
- 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

基礎知識の汎用化

データサイエンスの企業での使いこなし

- 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

概念の理解

説明変数と目的変数との関係をモデル化

- 例えば、ランダムフォレスト
 - 説明変数の選択への制約が少ない。
 - 過学習を影響を排除しやすい。

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

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

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？

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