

Organization

PPG

PPG Industriesでのモデリング -Scientific Computing Groupの Michael Makowskiとの対談

はじめに

PPG Industriesは、コーティング剤やガラスおよびガラス繊維、化学品のグローバルサプライヤーです。米国内に約50の製造施設を持ち、子会社を含め世界中に約120の合併会社や関連株式会社があり、従業員約34,000人以上、2002年の売上高は81億米ドルの会社です。

PPGは世界最大規模の自動車用塗料メーカーであり、工業用塗料および容器用コーティング剤、航空機用透明プラスチックシート、板ガラスおよびガラス繊維、連続ストランドガラス繊維、塩素アルカリおよび特殊化学製品、建築用コーティング剤のトップメーカーです。

対談

以下はBIOVIAが行った、Michael Makowski氏 (PPG, Scientific Computing Group) との対談を書き写したものです。

1.どのようなモデリング、シミュレーション、および/あるいはインフォマティクスのソフトウェアをあなた方の会社では使っていますか？

計算機科学については、我々は (NWChemのような) 国立研究所で開発された数種類のプログラムのライセンスも持っていますが、BIOVIA, MDLおよびGaussianの製品を主に使っています。

2. それらを何のために利用していますか？ また、あなた方の会社の長期的な目標に対して、この研究はどのように合致していますか？

我々は計算機科学を様々な問題に対して応用しています。特に我々のコーティング事業については、反応熱化学 (架橋)、最終フィルム特性 (強靭性、硬度、剛性)、混和性および拡散、界面現象、安定化および劣化メカニズム (UV吸収, HALS)、新色の開発 (特殊顔料)、流動性および平滑性 (外観)、表面効果 (ぬれ、付着)、分散安定性 (顔料の結合性) に興味を持っています。

我々の化学薬品業では、モデリングをポリマー・マトリックス中のフォトクロミック色素の発色速度論、OLED材料開発、ファインケミカルズや医薬中間体の反応メカニズムの研究に利用しています。ガラス事業では、サンクリーンというブランドで販売されている我々の自浄ガラス製品用の光触媒TiO₂の研究に最近注目しています。

我々のアプローチは、モデリングを利用して発明や開発サイクルの時間を削減し、我々の核となる技術や能力に対する根本的な考えを得て、競争上の優位性を獲得し、最終的にはコストを削減するというものです。我々はモデリングを、全ての長さや時間のスケールをカバーするという連続的な観点から捉えており、実験データと合わせてあらゆる全ての手法を用いて問題解決および価値の付加を試みています。

3. 計算機ソフトウェアを利用した研究について、科学論文や一般誌に発表したことがありますか？ もし、あるならばそれはいつどこででしょうか？

可能であれば、研究の内容を文献として公開または出版してきましたが、新たな成果を公開するための主要手段は特許出

願と一体となっています。

4. 実験ではできなかったことで、ソフトウェアが可能にしたことは何ですか？

多くの例では、実験ではどうしても答えを出せなかった問題、特にメソスケールの現象の分野や、電子構造の影響が含まれる構造-特性モデルの開発において、研究が可能になりました。

多くの場合、我々は構造-特性相関を実験的に行うよりかなり速く作り上げることが可能になりました。

5. 実験に対してコンピューター利用の科学的利点は主に何でしょうか？ 同様に財務利益はどうですか？ その利用によって、経営資源 (例えば時間や費用) を節約できましたか？

科学的な利点としては、単に経験的なモデルへの適合というよりはむしろ特定の現象に関する根本的な理解を発展させるということがあります。我々はモデリングの結果を、第一原理に基づいて特許出願を支援するものとしても利用し、それはクレームを幅広くカバーすることを可能にしました。

財務的な効果については、我々の努力を袋小路に入らないように舵取りををするという点に加えて、時間と材料の節約という面で明らかです。

6. あなたの会社または組織が、ソフトウェアに対しての初期投資 (初期費用、据え付け費、維持費を含めて) を、前述の質問でお話した様なあらゆるコスト削減で回収するのにどのくらいの時間がかかるのか教えていただけますか？

モデリングは、これらの言葉を我々が全く気にしないレベルにまで成熟してきました。モデリングに関連する諸経費を、現代の研究開発環境における技術革新の駆動力として必要な運営経費と考えています。

モデリング経費を幾度となく投資してきたプロジェクトを少なくとも一つ挙げるなど、我々のグループの者にとってはとても簡単なことです。

7. 計算機化学技術の利用により、直接的に既存のプロセスを改良することができましたか？ また、もしそうであればどの程度、あなたの会社の出費を削減しましたか？ また、将来的にはどうですか？

我々の計算化学における成果のほとんどは、プロセス改善の分野ではなく、むしろ製品の改良や最適化、あるいは新たな発見におけるものです。

8. 計算機化学技術の利用により、あなた方は競争上の優位性を得ることができましたか？

計算機化学が開発サイクルに何らかの役割を果たした商品を我々はいくつか持っています。競争上の優位性は、最初に市場に進出することや、我々の知的財産を守るための幅広い特

許戦略を展開することで達成されました。

9.将来あなた及びあなたの会社はこのソフトウェアを何に利用しようとしていますか？

我々はメソスケールでの応用の増加を目にきています。またインフォマティクス戦略との連携の可能性についても議論しています。

10.あなたの研究仲間にモデリング/シミュレーションの利用を薦めますか？

社内における我々の主な任務は「モデリングの推奨と教育プログラム」を含んでいます。この質問に対する答えはもちろんYESです。

11.あなたの組織の代表としてジャーナリストに話すことについて権限を与えられていますか？

はい。

12.同じく、あなた方が我々の製品を利用していることについてレポーターのインタビューを喜んで受けてくださいますか？

もちろんです。

Modeling at PPG Industries

- An interview with Michael Makowski, Scientific Computing group