

pirika.comの研究記録

Pirika News



ラビスタ観音崎テラスの夜鳴きそば

新しい試みで、Pirika Newsでも作ってみようと思う。

ブログは何書いても反応がない。虚空腕押しだ。

基本埋もれていくだけの代物でpirikaの記事とは相性が悪い。

Newsレターを始めてみても、結局は何のリアクションもないかもしれない。

そしたらやめてしまえばいいだけだ。

基本、1月前にあったことを書き溜めて、載せていく。

ブログがWeb上の日記というなら、月報みたいなものか。

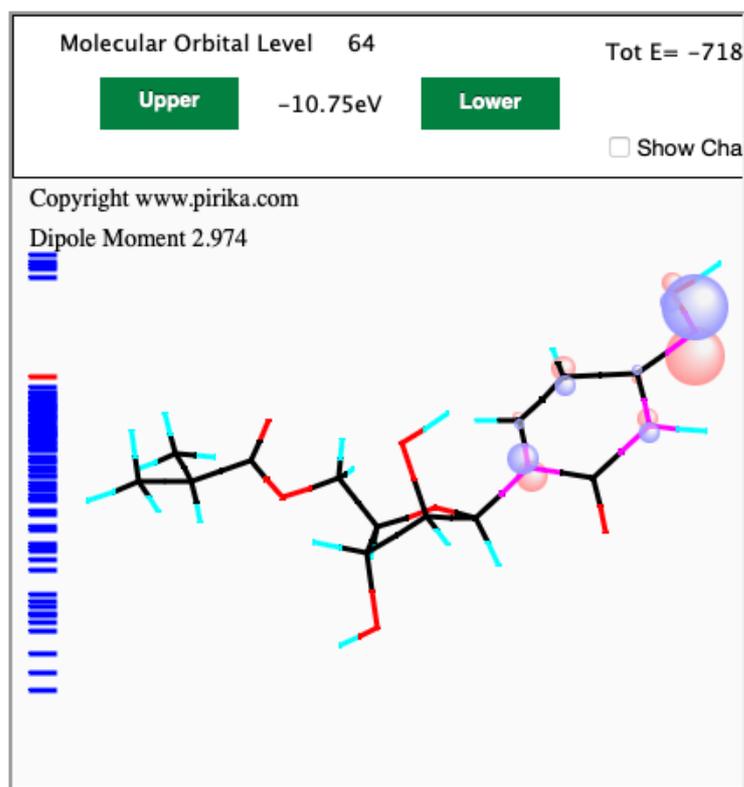
第1回は、9/28に思い立ったので、あまり書くことはない。

ブログ

去年は「平均1日に1つのブログを書く」をやってみた。WordPressに載せているJetpackの機能を使って、TwitterとLinkedInに自動投稿させていた。しかし所詮、化学の話など誰も興味ないだろう。1年でコメントが2-3件入った程度でほとんど何のリアクションもない。TwitterがXになり自動投稿を受け付けなくなり、Jetpackが自動投稿数に制限をつけ始めたのでブログ熱はかなり冷めてきた。8月は4件、9月は2件と激減だ。

私がブログを始めたのは、文章の書き方を勉強するためだ。Twitterのように文字数が限られる場合、タイトルと書き出しの3行が大事だ。LinkedInのような職業系のSNSは技術を前面においた方がよい。

そして、私にとって一番大事なのは、ブログにインタラクティブな化学を持ち込む点だ。



例えばコロナ治療薬のモルヌピラビル（メルク）の話をブログに書こうとする。

その時に、分子構造や分子軌道を描き、ブログ上でぐりぐり回転させる。

普通の人にとっては、分子模型自体があまり意味をなさないから、それが動いても興味もないだろう。

でも、化学系の研究者であったら、同じことを自分でもできるかを考えて欲しい。

その技術を持つことによって、自分の表現力がどう変わるかを考えて欲しい。

私にとっては3分でできる技術だ。

論文誌に投稿する時には何の役にも立たない技術だ。

化学系のインタラクティブなブログを書くときに、どんな機能が付いていたら楽しいか？
そういう事を想像する能力が退化して行っているのだと思う。

人間の脳がAI化して覚える事ばりに使われ、AIの方が想像力たくましく画像や文章を創作する。

そんな観点からpirika.comにたどり着いた研究者がコメントを書いてくれたら嬉しいだろうな。

HSPiP

物性推算、Y-MBの新版はAbbott先生のところへ送った。この12月にHSPiP開発者会議が行われる。その後すぐにHSPiPの新バージョンが公開される。新バージョンに関しては1月号に詳しく記載しよう。

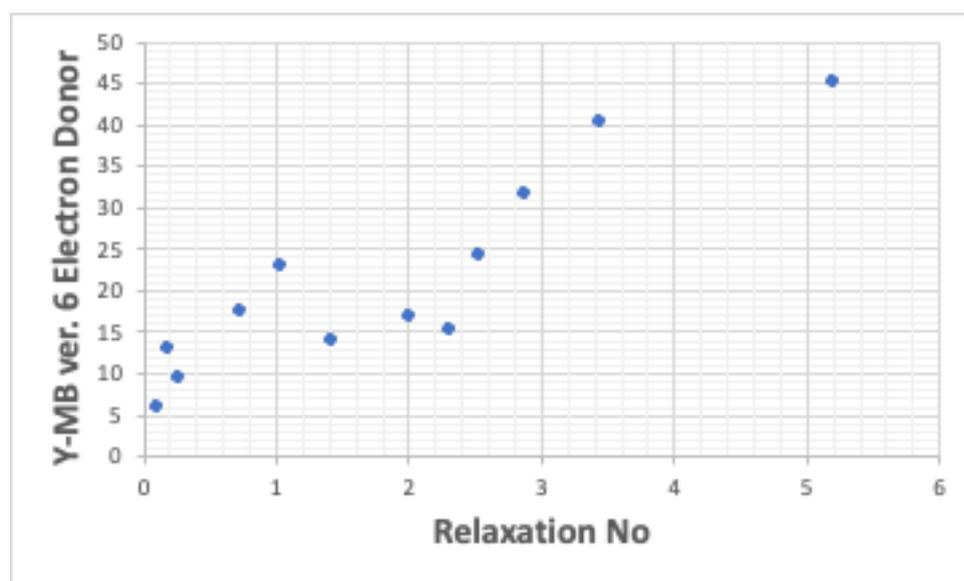
開発者会議の期間のうち12/4-6はドイツで会合がある。

Workshop HSP for Particles

on behalf of the team of Organizers, Prof. Dr. Ing. Doris Segets (Uni Duisburg), Prof. Dr. Dietmar Lerche (LUM GmbH) and Dr. Thomas Koch (KRONOS International, Inc.) you are cordially invited to our first HSP workshop at the University of Duisburg-Essen.

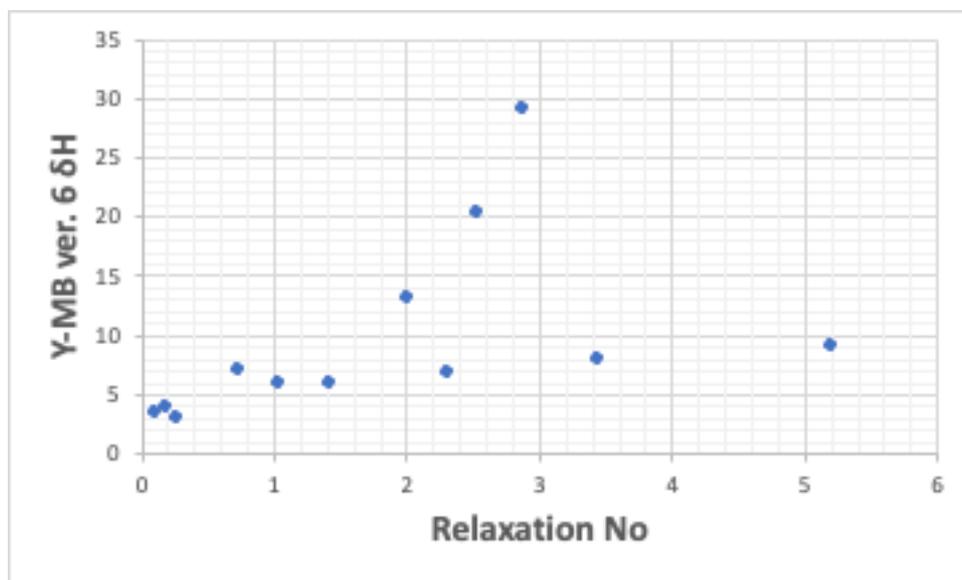
Enclosed you will find all information about our Workshop taking place from 5.12.-6.12.2023 at NanoEnergieTechnikZentrum (NETZ), Carl-Benz-Straße 199, 47057 Duisburg, Germany. We hope that you all find a way to take part.

TiO₂などの粒子分散をHSPで検討するワークショップだ。私とAbbott先生は招待されている。無機物の分散に化してはLUMISIZER用の解析、パルスNMR用の解析のブログなどを書いてきた。[アバターチュートリアル](#)でも解説している。



どちらの解析でも、重要なのはElectron Donorの値だ。

HSPの水素結合項よりは明らかに相関が高い



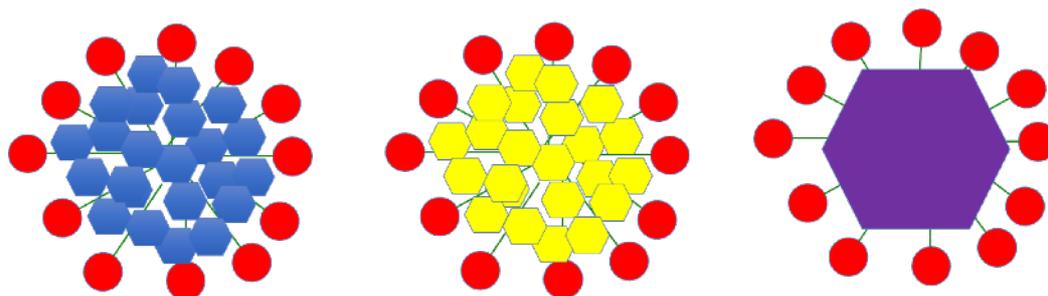
この、Electron DonorはY-MBの最新版では分子構造から推算できる。

問題は、Electron DonorやElectron AcceptorがHSP理論と相性が悪いということだ。

例えば界面活性剤を用いて油を水に乳化したとしよう。

水と油の乳化液のHSPは水のHSPと油のHSPの体積平均値になるだろうか？

混合溶媒（混合するなら）のHSPはそのように計算する。



ミセルの中に青い溶媒が溶けていても、黄色い溶媒が溶けていても水の側から見たら同じになる。界面活性剤の親水部分（赤玉）しか見えていない。

疎水溶媒の側から見ると緑色の界面活性剤の疎水場しか見えていない。

乳化液には2種類の領域(ドメイン)が存在していると考えなくてはならない。

それでは、無機物の分散の場合はどうであろう？

粒子の表面に、あるHSPの領域があつて、そのHSPと距離の近い溶媒ほどよく分散すると考えるのがHSPの理論になる。

ドナーとアクセプターの理論では、無機物(大きな紫)の表面に溶媒が吸着されるとする。それはElectron Donorが大きいほど良く吸着される。溶媒の側から見ると中身が液体のミセルと同じで、表面にいる溶媒しか見えない。

現実的には、HSPによる分散と、ドナーとアクセプターによる分散とがどうしても混じってしまうので解析が難しいのではないかと思う。

その辺りを話してこようと思う。

HSPiP基礎講習会

今年から基礎講習会を始めた。以前にも、講習会を企画したことがあるけど、人数がうまく集まらない。まー、だから企画屋が人集めも兼ねてやるんだらうな。

ただ、いろいろな会社が混じると、講義の内容がすごく一般的になってしまう。質問する方も他の参加者を意識しなくてはならなくなる。

そこで、1社だけの講習会にした。費用は5万円*10人分の50万円固定。講義の内容は、その会社の独自の内容(特許や論文から作成)で行う。

外部の講習会は1日5万円は普通だろう。HSPiPのユーザーが10人いるなら損はない。と思っていたら、70人以上集めた会社もあった。その場合はZOOMで日本中から参加があったのだが。

ある意味特注の講習会になるわけだが、ポリマー溶解関係、粒子分散関係、化粧品関係の資料は充実してきたので、比較的容易に講習会を受けられるようになってきた。

大学を減らして徐々に講習会の比率を上げていこうと思う。

企業でHSPiPを購入している場合、他の部署がどのくらいソフトを購入しているか把握できていないことも多い。

購入情報で私が把握しているのは名前程度だ。会社として購入者を把握するのに、こうした講習会を企画するのも一つの手だ。

昔の資料のまとめ

生成系のAIがどんどん進歩している。マイクロソフトがCo-pilotなるAIを発表した。これまでの自社のパワポをCo-pilotに学習させると、後はAIが、指示に従ってプレゼンを書いてくれる。自分の書いたイラストを学習させて自分ふうのイラストを描くAIに育てるのと似てい

る。自分の資料のストックを見ると一番古いもので93年のものがあつた。それを一箇所に集める。古いフォーマットで画像がおかしくなっているものを修正する。総数は1474あつた。8.71GBだ。

XXX向けの講習会資料を作つて！つてAIに頼める日を夢見て

同様にプログラムの方は17.13GBで一番古いものは1988年の分子模型のソースが残っていた。プログラムの変換も生成系のAIの得意な分野なので、古い財産が大事になる。

でも、JAVAのプログラムは、後にも書いたけど、今でも動くのでそれはそれでありがたい。

大学の授業

春学期の横浜国大の「Data Science for Materials」の授業数は来年には半分にしてもらい、2025年には（65歳）授業を持たないことに決めた。今年はChatGPTを使ったプログラムの作成方法も教えたが、もうそろそろ、若手に譲らないといけない。

高校5年生用の「薬学系ケモ・インフォマティクス」は今年で最後にする。

そのうち8回分の授業をe-Bookにでもしようかな。

Pirika研究会

これまでは学生と行ってきた。

その時に社会人が入ってくれると研究会が締まるので、コンサルをやっている会社の若手に研究会に参加してもらうことが多かった。

音声SNSの時もそうであったが、こうした研究会は、幹事が重要だ。

ZOOMでも何でも良いけど、誰かが参加するまで一人でくっちゃべっているという研究会は成立しない。

予定調整と内容を両方ワンオペするのはすごく大変だ。

熱心な学生は卒業してしまった。コロナ元年の学生で、ZOOMでやるしかないし、ZOOMの先は同じ大学である必要がない世代だ。

そのあとはすぐに「単位をもらう以上の余計な勉強はしたくない」学生になって行った。

難しいのが企業の研究者の扱いだ。コンサル契約をしている企業の研究者が入ってくるのは良い。しかし、コンサル費用を払えないので研究会の方に入会したいと言われることがある。

若手で会社にコンサルを頼めるほどの実力を持たない。そんな場合もあるだろう。でも単なるコストを嫌っているだけのこともある。

アカデミックから参加費用をもらわなくてもやっていかれるのは、ある意味企業の研究者がそこらへんの微妙な感覚を理解して助けてくれるからだ。

アカデミックの研究者の扱いも難しい。講師以上なら話をする側に回ってほしいとも思う。

何はともあれ、幹事さんを探すのが第一かな。

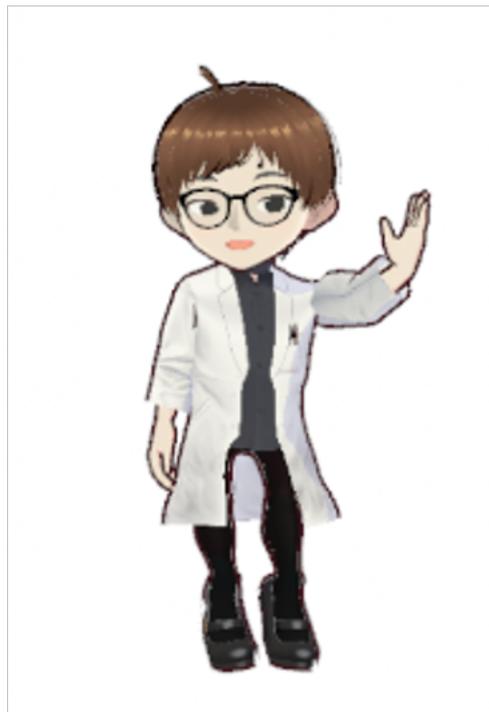
アバターチュートリアル

V-tuberとなってHSPiPの使い方の解説を行った。

英語でも作ったりしているが、海外から「内容は良いが、プロのナレーターを雇え」とか言われて凹んでもいる。

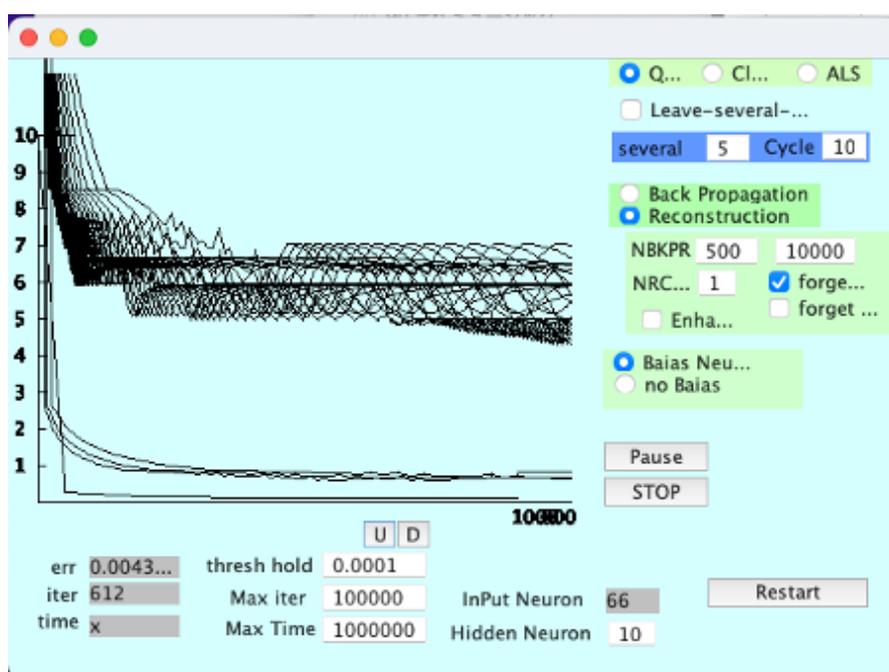
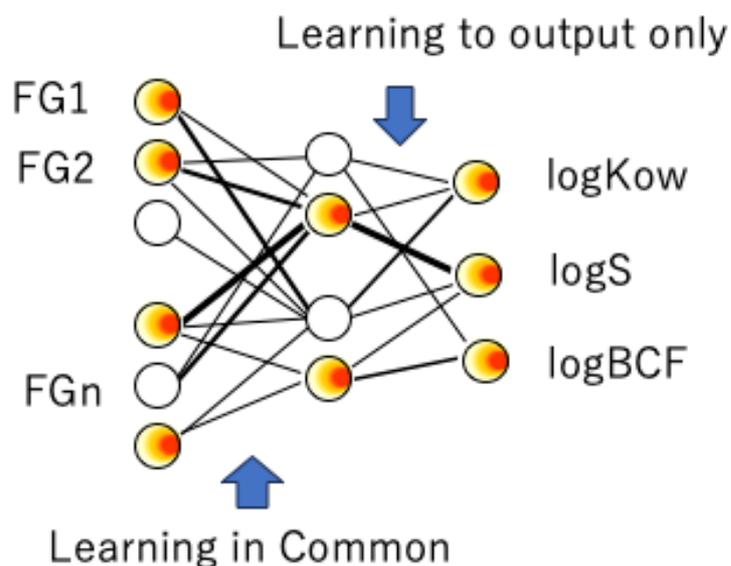
しばらくサボっていたけど、大学がひと段落したらまた再開しよう。

案外アバター・チュートリアルの作り方のチュートリアルの方がニーズがあるだろうか？



プログラミング：NthNN (1998年作成)

筑波に出向して代替フロン研究している時に作ったニューラルネットワーク(NN)のプログラムだ。当時はデータ数も少なく過学習に苦しんでいた。そこでベースになる青山先生の再構築学習法NNを少し改造した。ハロゲン化合物の沸点はデータ数が集まる。しかし臨界温度のデータは多くない。密度のデータは集まるが、臨界体積のデータは少ない。そうした傾向が似ている複数(Nth)のデータを用いてNNの学習を行う。その時にNNの入力層と中間層の学習は複数の物性値で共通に行う。中間層から出力層の学習は物性値ごとに行う。



今で言う転移学習のようなものかもしれない。2023年、訳あって昔のプログラムを引き摺り出してオクタノール/水分配比率(logKow)、水への溶解度(-logS)、生物濃縮性(logBCF)を学習させた。

JAVAのプログラムというのはありがたいものだ。一部表示文字が欠けてしまうが問題なく動作した。非常にデータが少ないBCFであっても前段の結合荷重が求まっているため、良好な結果となった。

最近のMIではニューラルネットワーク法は予測性能が上がらないので、あまり使われないうだ。

MIを研究しているというなら、プログラムを工夫して予測性能を上げる。もしくは、データの工夫をすることが必要になる。

そうした工夫で予測性能が上がるのが楽しくて、25年もこんな研究をやっている。

パッケージ・ソフトに例題通りにデータを放り込んだだけのような研究は楽しくない。

解析用のソフトは色々開発してきたが、logBCFはどうしてもうまくいかない。

結局原点に戻ってしまった。

プログラムの実装は難しいことは何もない。

Nthの数だけループを回す1行を入れるだけだ。Nの値に合わせてyWeight（中間-出力）は別にする。xWeight(入力-中間)は共通にして誤差逆伝播法で学習するだけだ。

簡単に拡張できるだろう。

最近読んだ本

最近、近藤廉太郎にハマっている。「三行で撃つ」「百冊で耕す」「アロハで〜」。

私の現状は物書きだ。資料を作る。プログラムを書く。Webページを書く。
理系からはどんどん離れていく。

でも、素人の文章などは面白いはずもない。

色々悩んで、近藤廉太郎の本を読み、文章術を練ろうとしている。

最近見るテレビ

元々、アニメが大好きで、ケーブルテレビを片っ端から録画している。お昼と夕飯作りの担当なので、アニメを見ながら料理をしている。

でも今、特にハマっているのが、「科捜研の女」。昔から沢口靖子のファンであったが、見始めたらハマってしまった。

最近作った料理

今年の銀杏はとても出来が良い。

粒が大きく美味しい。例年はもっと遅いように思うのだが、9月にいっぱい収穫できて、レンコンと牛肉と銀杏炒めを作った。



青葉台周辺で銀杏を拾っている怪しげなおっさんが居たら、それは私だ。

最近の出来事

転んで膝を割った。

もうかれこれ6週間、膝を伸ばすようにコルセットしている。

最低な2ヶ月だ。

その上、MacBookProのキーボードに麦茶を飲ませてしまった。最低。

新しいM2のMacBookProを購入した。高くなったものだ。

最近の旅行

観音崎の京急ホテルが、ラビスタ観音崎テラスというホテルにリニューアルされた。

プレオープンではあったがカミさんで行ってきた。

施設はほとんど元のまま。

従業員も元の方が多いうけど、まだまだあまり慣れていないようだ。