

pirika.comの研究記録

Pirika News



今月のラッキーアイテム。ゾンビの帽子とマイク

Y-MBのクラッキング、剽窃？、盗用？

[ブログにも書いた内容](#)だけど再掲しておこう。

私はHSPiPというソフトウェアをデンマークのHansen先生、UKのAbbott先生と開発している。そのソフトウェアの中のY-MBという物性推算機能は私が責任を持って作っている。

Abbott先生から、USのAI開発会社がSMILESの構造式からHSPを推算するシステムを作ったという連絡を受けた。Abbott先生は彼らとTeamsで話をしたのだけど、10Kデータベースの化合物で R^2 が0.97であったと言っていたらしい。

私が先生たちと一緒に開発を始めたのが2008年。15年ですぐにAIが私をコピーするようになったのかと思うと感慨深い。

そんな時代は当然くると、私たちは予測していた。

そこで、共同研究を始めるにあたって、HSPiPのDBには、オフィシャルな値と推算値のどちらが記載されているかわからないようにしてもらった。

オフィシャルな値をそれがわかる形で搭載した場合、もっと影響力の高いところが推算式を開発すると、誰もHSPiPを購入してくれなくなる。

我々には、オフィシャルな値を集めるという膨大な作業だけが押し付けられ、成果は他が取る事になる。

15年前に予測したことがやっと現実になったのだ。

AI開発会社は、HSPiPに搭載されているY-MBの吐き出した計算結果を再現するように学習したわけだ。

Y-MBのY-MBの計算結果に対する計算精度は、 R^2 が1.0だ。

彼らの開発したのはHSPの推算ではなく、Y-MBの結果の推算で R^2 が0.97だ。

沸点の推算式と異なり、HSPの値は分析では出てこない。（最近はずいぶん良くなってきているけど）

沸点の実験値がたくさん集まれば、自分なりの沸点推算式を作成できる。拡張JOBACK式と呼ぼうが、大学の名前を冠して呼ぼうが自由だろう。

でも、ハンセンの溶解度パラメータはオフィシャル値はHansen先生の書籍に記載されている1200化合物がせいぜいだ。そのデータのデジを知っているのも我々開発者だけだ。

色々な論文に記載されている値を収集しているがそんなに増えるわけではない。

私自身は、HSPiPのデータベースも管理しているので、オフィシャルな値を5000弱持っている。でもこれはHSPiPにも搭載しないし、公開もしていない。

ギリシャ、セサロニキのAristotle大学のPanayiotouらはHansenの溶解度パラメータを推算する推算式を公開している。

なぜ、彼らがその溶解度パラメータをハンセンの溶解度パラメータパラメータと呼んで良いのかというと、我々が「ハンセンの溶解度パラメータのオフィシャル値を提供」しているからだ。

HSPiPに搭載されているY-MBの計算値を再現するようにいくら頑張ったところで、それはY-MBの推算式を模倣しただけで、HSPの推算式を開発したことにはならない。

15年前にこうなることを予測して、打っておいた布石に、やっと引っかかる会社が現れた。著作権意識に欠ける相手用のトラップであるが、実は最初にかかったのは日本の大学だ。

関西の方の大学で、[関西大学版ハンセンの溶解度パラメータJKU-HSP法](#)とか言っている。

彼らは、HSPiPのY-MBの吐き出した計算値を再現できるようにソフトウェアをクラッキングしている。そのやり方を学位論文や特許に記載している。

今の時代、Y-MBに100万個のSmilesを与えて出てきた結果を学習させれば、冒頭に書いたように R^2 が0.97ぐらいで答えてくれるだろう。

でもそれは、大学の研究と言えるだろうか？

私が作ったY-MBと同じ答えを返すプログラムを作って、関西大学版JKU-HSP法を作ったと学位論文を書き、博士号を得る。

そんなことを2015年ごろから行なっている。

USの会社より8年も早いので偉いが、やっていることは、ソフトのクラッキングと研究の剽窃ではないだろうか。

アカデミックな剽窃とは、「他人の研究を自分のものに見せかけること」だ。

Y-MBの吐き出す答えと100%同じ答えを出すプログラムを作ったところで、自分の研究にはならない。

私はすでに新しいY-MBを開発して、近いうちにバージョンアップする。関西大学は、また、新しいバージョンの剽窃を行うのだろうか？

アカデミックの研究というのは、先人の築き上げた研究成果の上に構築していくものだ。基礎がしっかりしていればその恩恵は大きい。その分、先人に感謝し、先人から一歩でも先に行くことを目指し研究を続ける。利用したソフトも明記しない。先人の原理を記した論文の威容を間違える。ほとんど研究者の体を成していない。

かわいそうなのは、そうしたところから博士号をとって卒業していった子たちだろう。

何故、ハンセンの名前を冠するのだろうか？

関西大学版の3次元溶解度パラメータと呼ばば良いではないか？

データソースは色々なところからとってきたと書けば良いではないか。

彼らが、HSPを剽窃するのは、HSPに近い値を返すならば、HSPのSphere探索技術や混合溶媒設計など我々の開発してきた技術にただのりできるためだろう。

USのAI会社に「恥を知れ」というつもりはない。AIは恥という概念を持たない。

でも、関西の大学と共同研究している、日本の企業は、よく現状を知った方が良いでしょう。

HSPiP

HSPiPを最後に値上げしたのは2013年だ。10年前だ。

日本での値段は、円とドルの力関係で変わる。

2020年11月には消費税こみで163900円だった。

2023年10月には消費税こみで219450円だ。

55550円値上げしている。34%になる。

でも日本での売り上げは減ってはいない。

ということは、今の値段、1195 \$ を34%値上げして1600 \$ にしても世界販売は影響は受けないということだろう。

日本での販売価格は消費税こみで293920円になる。現在のインフレから言えば妥当なところか。

もしくは、記名式ライセンスの値上げは15%ぐらいにして、コーポレート、CLI・ライセンスを値上げする。その代わりに、そちらでしか計算できないMI用のアウトプットを増やすか。

1年だけ有効なライセンスも作れるが、こちらは煩雑になる。

いずれにしても、来年1月早々には値段体系が大きく変わる。

HSPiP基礎講習会

基礎講習会前の講演会を12月に行うことにした。

名古屋の方にある自動車関係の会社群がお相手だ。

12月は2週間、イギリスとドイツへ行くので準備は早めに行わなくてはならない。

幸い横浜国大2015年の先端物質化学特論集中講義で車関係の先端物質を取り上げた。講義資料が出てきたのでダイジェスト版（PDF 76ページ）を作ってHPにアップロードした。

どのあたりが興味あるか知らせてくれると講演資料を作るのに役に立つ。

YNU卒業生就職先

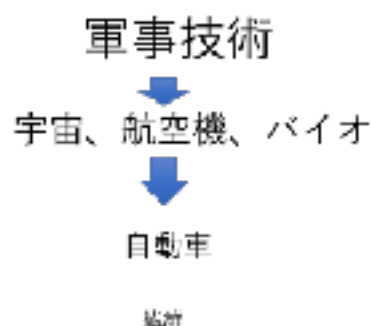
横浜国大HPより



今年(2015)の先端物質化学特論

技術の波及

アメリカ (垂直型)



ドローンは軍事技術
技術の新陳代謝
陳腐化した技術は
よその国に任せる。

日本 (水平型)



エネルギー エンジニアリング インフラ
水素、LiB、 水素、LiB、 高機能ガソリン

技術を陳腐化させない努力を継続
(継続は力なり)

その授業をとった学生が、リスキルとか言い出したら楽しいだろうな。

プールサイドのゾンビ

青と黒のマーブル、SPEEDの帽子をしていたら、そのゾンビは私です。

スポーツクラブは双子が生まれてどうしようもなかった2年間を除いて20年以上利用している。

そのプールの横に歩くプールがある。

腰が悪い人、リハビリの人が利用している。

「まるで、ゾンビの行列」とか悪いことを言っていたら、自業自得。

転んで膝を割ってしまって、今はリハビリ中。ゾンビの一員になっている。

そんなわけでリハビリを受けている。

理学療法士に、「もっと自然に歩いてください」と言われる。

これがとても難しい。

多分、小さい子供の頃は、一生懸命、「大人のように歩こう」と脳で考えていたのだろう。だから、脳の指令系統の混乱で転んだり、躓いたりしてしまう。

それでは反応が遅すぎるので、条件反射で、考えないで歩くようになる。

新ためて「もっと自然に歩いてください」と言われても、それを脳で考えた瞬間に「自然」ではなくなってしまう。脊髄反射しろと脳が命令しても無駄だ。

ほとんど禅問答のようなものだ。

そこがAIとの違いで面白いと思う。

大学の授業

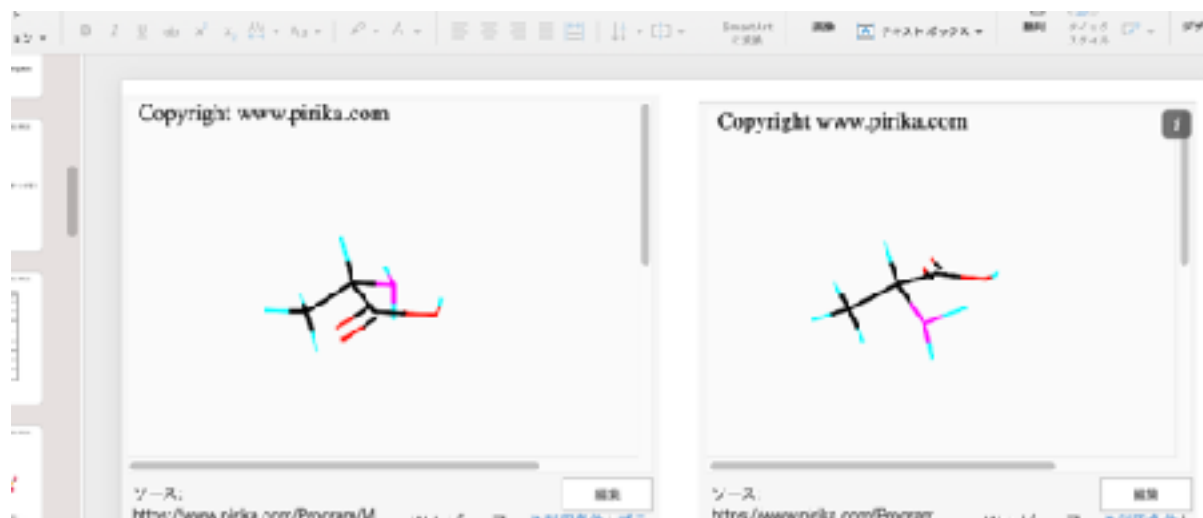
今年の授業で一番インパクトが高かったのが、パワポにWeb画面を載せるだ。

前回のNewsでも触れたが、ブログで分子をぐるぐる回すというのは、一つの表現としてとても有効だと信じている。

それと同じ表現をパワポの中でも使いたいと、ずっと以前から思っていた。

パワポのスライド機能、アニメーション機能をJavaScriptで実装して、ブラウザ上でプレゼンテーションしてしまう。そんな事をしている人はいる。でもそれはそれでめんどくさい。メンテナンスも大変だ。

Micarosoft 365だと挿入/ アドイン / 個人用アドイン / ビューアーを選択すると、Webページをパワポに貼り付けることができる。例えばアミノ酸のL-体とD-体の3次元構造を表示するWebコンテンツを貼り付ける。(貼り付けられるのは、https://のセキュリティーの高いページだけだ。)



例えば分子模型をパワポの中でぐりぐり回転させることができる。

動かしてみれば、アミノ酸のL-体とD-体が重ならない事は学生にもはっきりわかる。

インタラクティブに動かすのと、動画を撮って載せるのとは話は全く違う。

前回ブログのところでも書いたが、インタラクティブなコンテンツを使うことによる表現力をどう使うか？ 腕の見せ所だ。

このビューアーはマイクロソフトの純正なので安心して使える。

パワポだけではなく、エクセルにも載せてほしい。

[ユーチューブ](#)にも投稿してみた。

PDFにはまだ無理のようなが、e-Bookなら簡単に表示できる。

Pirika研究会、サイエンス・カフェ？ サイエンス・居酒屋？

なんで日本はこのところ、こんなに落ちぶれたのかね？なんて話しながら昔の同僚と酒を飲んだ。

話すことは、サイエンスのことが多いのでサイエンスカフェならぬ、サイエンス・居酒屋か。

じゃー、そんな場に若手を呼びたいかというのと、「昔は良かったおじさん」になるのは嫌だ。では、現在落ちぶれているという事実があって、過去を振り返らずに、どうしたら現状を打破できるか？

結局のところ、日本はアメリカの後追いをしているので、日本にトランプが生まれるのを待つしかないのか？

私自身はトランプは嫌いだが、最近必要悪のような気がしてきた。

やることは「アメリカをもう一度偉大な国にすること」以上。

うーーーん。

じゃー私は？

最近、急に言われ出した。pirika Newsに対しても「山本さんのPirika節、満載」というふうに。

研究のトップに言っても通じないから、山本さん、「pirika節」で一発ガツンと言ってくださいよ、みたいな使い方をする。

そういえば、この前もフランスのCDO(Chief Digital Officer)にガツンという役が回ってきた。

そのうち、pirika研究会は日本の会社のCTOの姥捨山になるのではないかとちょっと心配になる。私は梁山泊を目指したいのだけど。

若手さん。マウンティングしないからよっといで。

アバターチュートリアル

久しぶりにアバターチュートリアルをアップした。[Smilesの構造式からハンセンの溶解度パラメータを求める](#)。それをExcel上で行う。そして、[昔のプログラム、ラジカル重合のシミュレータ、POSEIDON CE](#)だ。

今回のポイントは、Audio-Technicaのマイクを買ったのでその試運転だ。

そして以前「ナレーションが下手」と言われたので、ムービー作成で音声をアフレコに挑戦した。

<input type="checkbox"/>	動画	日付 ↓	視聴回数	コメント	高評価率 (低評...
<input type="checkbox"/>		2023/10/05 公開日	18	0	100.0% 高評価3件
<input type="checkbox"/>		2023/10/04 公開日	24	2	100.0% 高評価2件
<input type="checkbox"/>		2022/12/03 公開日	92	4	100.0% 高評価2件
<input type="checkbox"/>		2022/11/30 公開日	56	3	50.0% 高評価1件

マニアックな内容の割にはアクセスもあり、高評価をしてくれる方も多い。

コメントがつくのだけど、コメントが読めない。

時々（海外のやなやつ）のコメントはYouTubeからメールアドレスに送られてくる。そういうのは1回は表示されて返事を書くのだけど、その後、コメントはいなくなる。

コメントくれた人。ごめんなさい。返事を書かないのではなく、コメントの見方がわかっていないだけです。

Excelの上でVBAプログラムを動かす。

ビジュアル・ベーシック(VB)を使う方法に関する書籍が溢れている。

しかし、VBはウイルスの温床になるので、VBマクロは無効にしている人が多いだろう。

新しく、TypeScript(JavaScriptの親戚)のプログラムがExcel上で動くようになった。

JavaScript系のプログラムはブラウザ上で、安心・安全なプログラム言語として高く評価されている。次号のNewsのプログラミングのページで作成方法を取り上げよう。

さらに悪ノリしてどんどん投稿している。

多峰性データの解析方法 後半

<https://youtu.be/UOYU8nxFo8>

多峰性データの解析方法

<https://youtu.be/apbituVI5gk>

この2つはピークがあるような現象の推算方法に関するものだ。

固体電解質のイオン導電性を解析したものだが、大元は、足踏み発電のような圧電素子の設計に苦しんだ時の話だ。

パワポにインタラクティブなオブジェクトを挿入する

<https://youtu.be/w01AjEebRTI>

プログラミング

“ラジカル重合 シミュレータ”と検索するとpirikaのページがトップに来る。モンテカルロのシミュレーションはコンピュータの能力がとても低かった時の遺物だ。

1989年にはPOSEIDONというプログラムを作っている。

昔作ったプログラムが必要になり、ハードディスクを探したら、JAVAのプログラムが出てきて、それはいまだに動作した。

それはそれでありがたい事なので、[YouTubeにアップロード](#)した。

ところがプログラムのアーキテクチャが悪く、本来使いたいモノマーを入れようとする
とコンパイルし直さなければならない。

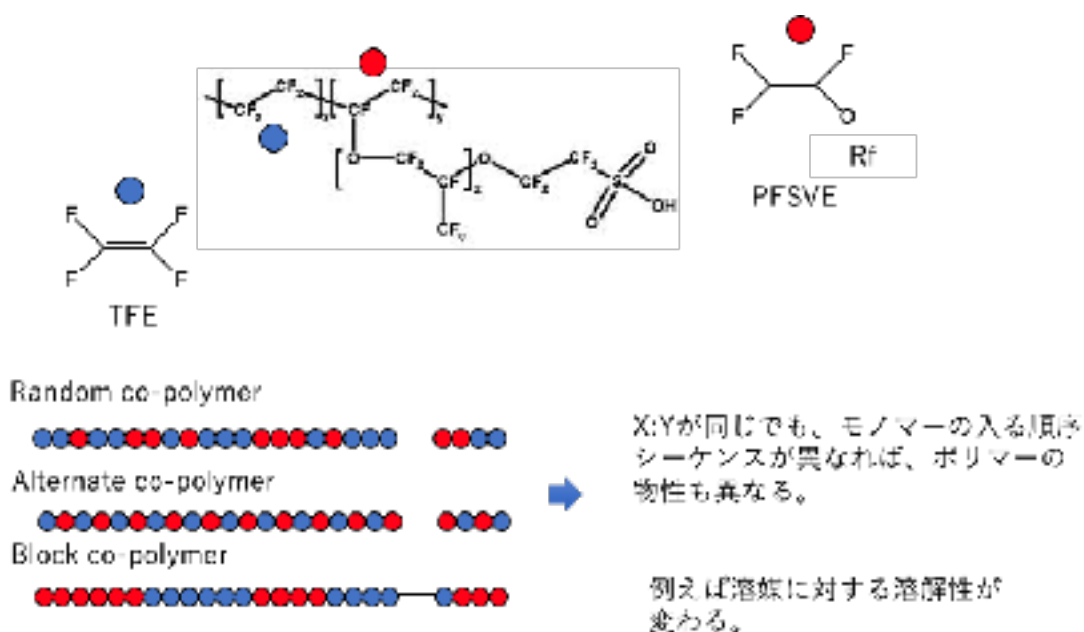
画面のプロットとか、もうあまりにレガシーなので、作り直すことにした。

思い切って、Excelの上で動くようにした。

オフィス・スクリプト(TypeScript)で作れば、後々の統計解析にも便利かと思う。

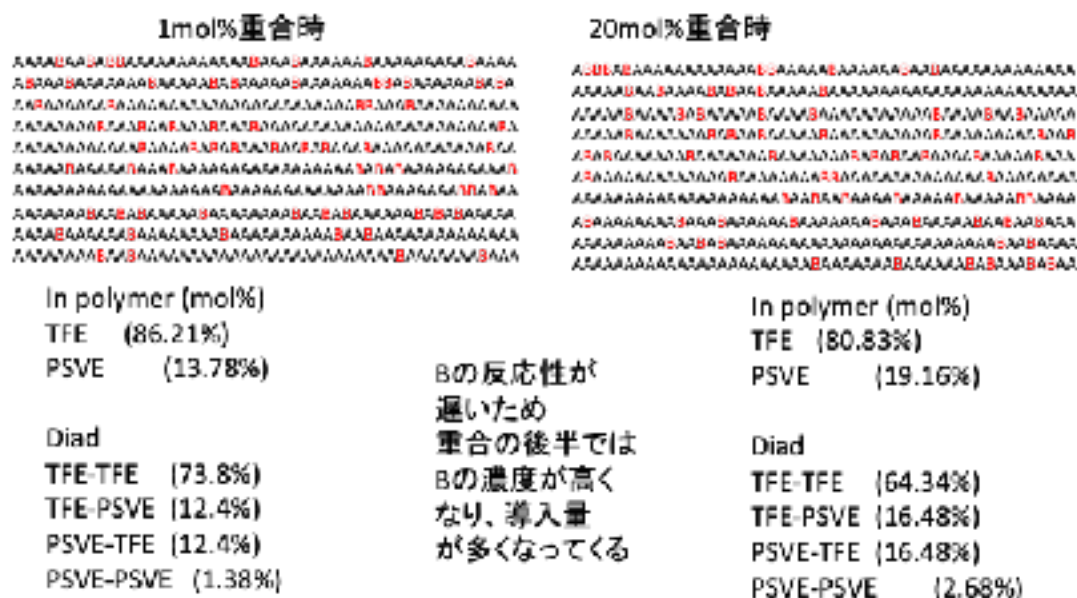
TypeScriptは基本JavaScriptとほとんど変わらない。JavaScriptはJavaと変わらない。簡単にコンバートできた。そのうちに「JavaをOfficeScriptに変換して」ってChatGPTに頼むとやってくれるのだろうな。

今回やりたかったのは、燃料電池用の電解膜、Nafionの重合シミュレーションだ。
モノマーの反応性が異なるので、重合するにつれてシーケンスがずれていく。



PSVEが集まる領域が増えていくと、メタノールがすっぽ抜ける領域が増えていくという話の流れで、POSEIDONが必要になった。（この計算は昔からやっているものだが）

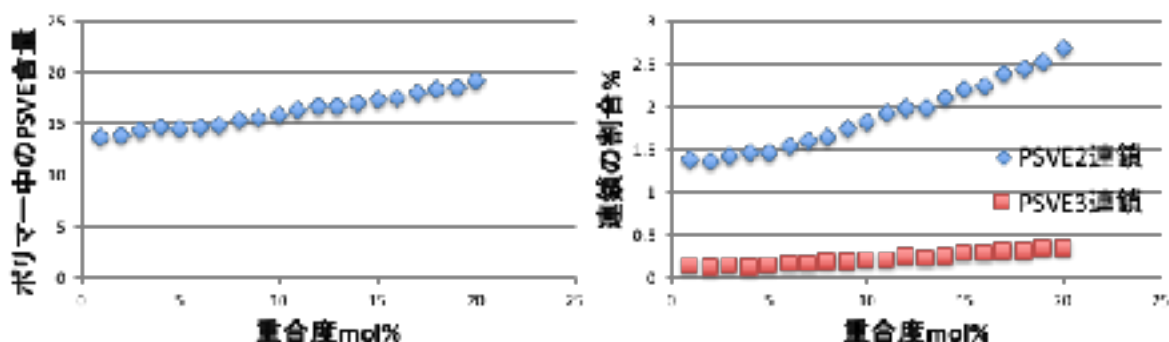
TFE(A):PSVE(B)=2g:12g で重合度20%までシミュレートしてみる



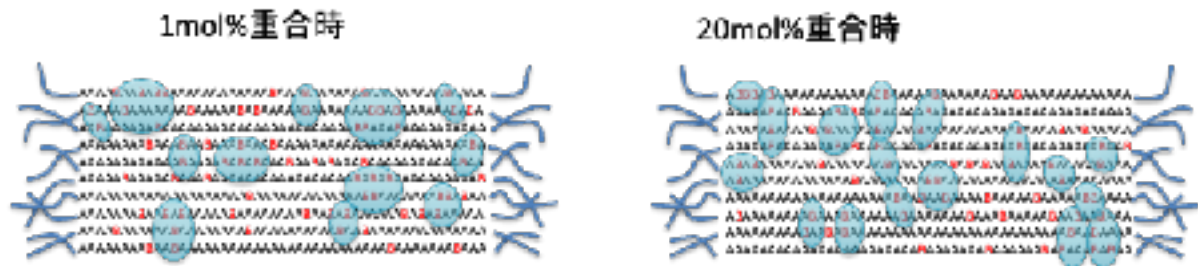
分析値はそのオーバーオールを見ている！

Diad計算とかグラフはExcel上でできると便利になる。

重合経過



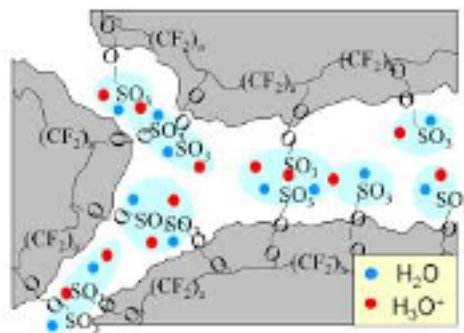
重合初期と重合後期ではPSVEの入り方は大きく異なる。



チャンネルの太さなどの、実際の膜のイメージが考えやすくなるだろう。

偉い先生が、理想的な7:1のシーケンスのポリマーを使ったら、最高効率はXX%になる。とか言っているのを読んだことがある。そうしたポリマーはコンピュータの上では作れる。しかし、実際にはどうしたら良いのか？

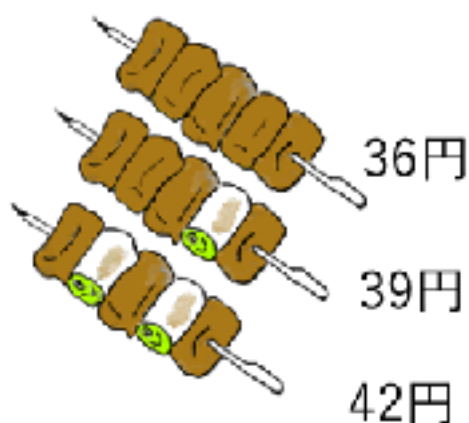
反応の遅いPSVEがどんどん濃くなってしまっているので、TFEを減った分だけパワーフィードしてあげれば良い。



実験系の高分子屋が使うソフトだ。Excelぐらいの方が敷居が低い。

最近読んだ本

薬学ケモインフォマティクス学なんてものを教えている。高校5年生ぐらいの学生が相手なので、教え方が難しい。いろいろ考えた末、食べ物をベースに分子を教えることにした。



分子というのは原子を串刺しにした焼き鳥みたいなものなんだ。

ケモインフォマティクスなんて簡単に行って仕舞えば、焼き鳥の各パーツの値段を連立方程式で求めて仕舞えば、どんな組み合わせの焼き鳥の値段も予測できるよって話だ。

実はこの値段は肉が炭素、ネギが酸素の時の分子の沸点なんだよ。っていう具合だ。

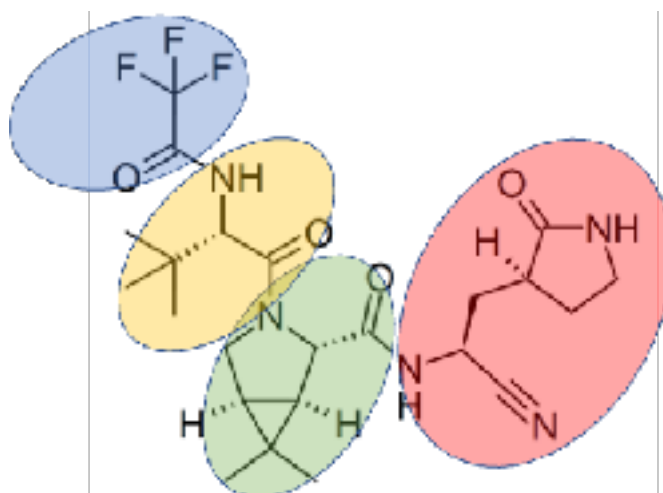
そして3大栄養素のタンパク質、炭水化物、脂質のパワポを3つ作って一息入れた。

実際にそのところは生物系ではどう教えているんだろう？

そして、「のほほん生化学」「大学1,2年生のためのすぐわかる生化学」「生化学の基本」「これだけ、生化学」という本を4冊買って来た。生化学の書籍をまじめに読むのは初めてだ。

自分で資料を作っていて悩んだ。タンパク質は胃酸や酵素で分解されてアミノ酸として吸収される。どの教科書にも書いてある。

では、ファイザーのペプチド系のコロナ治験薬は分解されて吸収されているのだろうか？



自分で作った資料で自分で悩んで本を買ってきたが、答えはわからない。学生さんごめん。

本自体は面白かった。

最近見たテレビ

SPY*FAMILYも良かったが、NHKの夜ドラ「私の一番最悪なともだち」が今月は一番良かった。特に元生物系の研究者、現クリーニング店店長、東聡美（市川実日子）が良かった。

簡単に言って仕舞えば、就活の人間模様。

就活の時に、エントリーシートを書かせる。

それがWebになったら、とりあえず数は出せる。読む方は大変なのでAIに読ませて1次スクリーニングする。

でも書かせていることが余りにくだらない。

ガクチカ：それを聞いて、あーこの学生を採用しようって本当に思うのだろうか？

そりゃー、答えを聞いているのではなく、答え方を見てるんだ。とか、いろいろ言い訳はあるだろう。

でも人事の唯一の仕事は、会社を発展させる有意義な学生を獲得すること。育成すること。

サイチカ：採用をするのに当たって力を入れている事を聞いてみたいものだ。

私の義理の父は、日石で人事をやっていた。一緒に酒を飲めば一発でわかる。そりゃー昭和だけど、実績として、採用した方が社長をやっている。

今のサイカツが有効なら、日本の製造業の凋落ぶりはなぜ？

私は、10年以上非常勤講師をやってきた。

学生の点数をつける時に、この学生を採用して一緒に働きたいか？の判断がどうしても、

入ってしまう。私は採用には全く関与してなかったが。
企業の研究者に講師を頼んでいるので、それが入るのは許されると思う。

就活に限らず、（番組でも就職してからの話が続くが）人の評価を、AIとか、多面評価とかに任せ、人事が責任を取らない。結局は人を見る目を持たない、育てない評価システムが日本を没落させたのかと思う。

形式上、リスキルのメニューを取り入れれば良いという問題ではない。

最近作った料理

銀杏と牛肉と蓮根の炒め物アゲイン。

銀杏を拾ってきて、タネを取り出し、殻を割って、渋皮を剥いて茹でる。

蓮根の皮を剥いて、お酢に晒す。牛肉を冷凍庫から取り出す。解凍している間に仕事をして戻る。すると料理本の該当ページが開いて置いてある。

いいよ。

わかったよ。

この通りに作ればいいんだろ？

でも、さりげなく、牛肉のブロックが一つ減らされていた。。。。

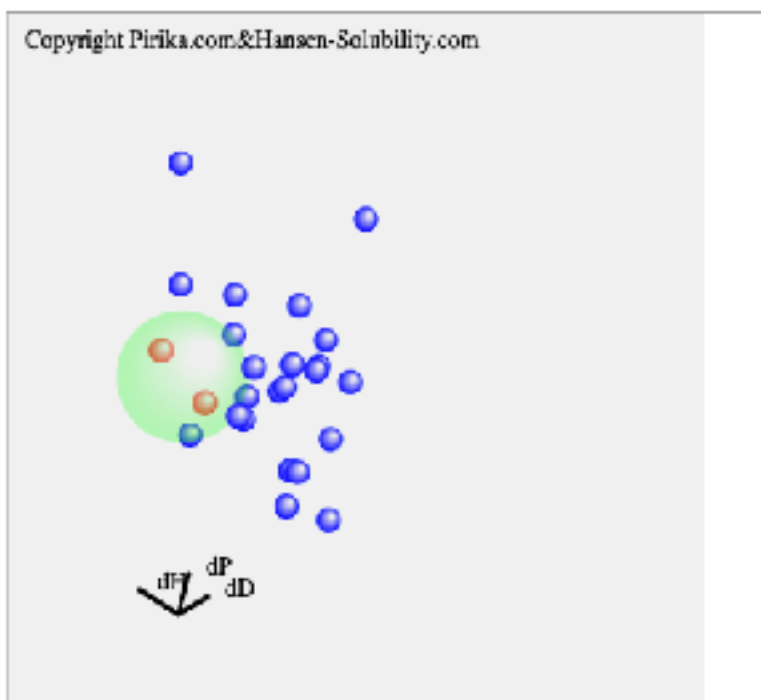


うーん。もう少し映えるように、経費でライトを買おうかな。



「チョコちゃん～」を見ていたら、イチョウを臭いと感じるのは、ほとんどすべての動物らしい。

[銀杏を洗う時に使う手袋は何を使う？](#)



臭い成分のHSPから遠いHSPの材料で作った手袋を使えば良い。

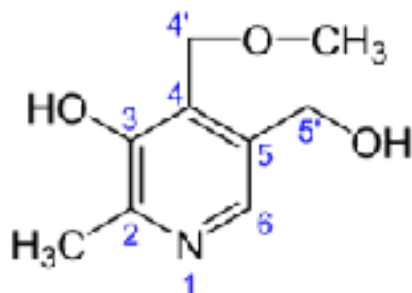
CAS	Name	SMILES
107-92-6	butyric acid	<chem>OC(CCC)=O</chem>
111-14-8	heptanoic acid	<chem>O=C(O)CCCCCC</chem>

動物の糞から銀杏が確認されたのは、あらいぐまとか数種類しかいないと。まー確かに鳥も虫も食べているのは見たことはない。動物が実を食べない植物は広がらないので絶滅する。

銀杏が絶滅しなかったのは、薬効が発見されて、人間が広めたから。ふーーん。

銀杏、銀杏仁、白果、白果仁、白果肉とも呼ばれ、肺を温め咳を止めタンをきり、毒を消す作用があり強壯強精の効果もあり頻尿、夜尿症咳などに効きます。薬味は甘、苦、で薬性は平です。中医学で正確には収澁薬に分類され、体内から漏れ出るものを止める働きがあります。

だと。



ギンコトキシンは4'-O-メチルピリドキシンとも呼ばれ、イチョウによって生合成される神経毒だそうで、食べ過ぎには注意。

最近読んだ新聞記事

会いに行ける科学者フェス。

メンバー全員博士号持ちのアイドルグループPhD48を作ろう。

そんなのが始まっているとあった。

pirikaのサイエンスカフェも考えさせられる取り組みだ。

近藤康太郎さんの本に、最近テレビに出演している人たちは芸能人では無いとあった。

芸を売っている方は、不倫やら薬やらの不祥事で人間性が疑われても、芸は別と従来は考えられてきた。現在のテレビ出演者は芸がないから、不祥事があると一発退場になるのだと。

うーん。

(特に) 科学者の芸が、野球、将棋並みにお茶の間に届くことを夢見て。。。

でもなー。鳥人間だって最初はそんな風に始まったが、今は完全に商業主義に取り込まれたしな。

(場としての) カラオケ

カラオケは好きではなかった。会社員になって(1985年) 数回は行っただろうか。まだ分厚い歌詞の本を取り合ってレーザーディスクで歌うような時代だ。

ラビスタ観音崎テラスに遊びに行った折に、カミさんと初めてカラオケに行った。

カミさんは音楽関係者だけど、彼女もカラオケはしない。

どう曲を選んで、入力するか、どうやったら音が小さくなるか、そんな事を試行錯誤していたらすぐ1時間経ってしまった。

話は違うが、合同会社pirika.comは私とカミさんの共同経営の会社だ。会社を作るときには、事業の範囲を設定する。その時に、音楽と化学の違いはあるが、教育、講習会、著作などを並べ立ててある。

合同会社のいいところで、「稼ぎが多いから多く給料払わなくてはいけない」などの規定はないし、収益の上がない分野でも事業にして良い。事業の範囲に音楽が入っているので、コンサート、CD購入などは経費で落とせる。自分もApple Musicに入ってみた。

そしたら、iPhoneやiPadのApple Musicにはsingというカラオケモードが入っていた。

対応している曲は歌詞がカラオケのように出てきて、ボーカルの音量を自由に下げられる。

こういうのを利用してカラオケを練習すればいいのか。会社の経費でMyマイクも買うか？

そこで、はたと気づく。

カラオケは歌を練習する場。家で練習してカラオケで上手に歌う？

目的はなんだっけ？