

pirika.comの研究記録

# Pirika News

## HSP開発

私はMacユーザーだ。HSPiPはMacでは動かない。そこでParallelsを使ってWindowsを走らせるか、Microsoft Remote Desktopを使ってWindowsの実機をMacの上で動かす。

ZOOM講習会の時には、Remote Desktopの方がMacの負荷が低いので良い。

新しいY-MBの推算式を作成する場合には、まずMacで開発する。

HSPiPはwindowsのソフトで、C#で作っておけば、そのままインポートできる。

.Net MAUIの技術を使えば、MacでC#で作って、Mac/iPad/iPhoneで動くソフトも開発できる。かといって、iPhoneでHSPiPが動いて嬉しいユーザーはいないだろう。いくら私でも欲しいとも思わない。

ギリギリなのが、Excelだ。

windowsユーザーであってもデータをExcelで管理している方は多いだろう。

ところが最新のHSPiPはxml対応が進み、Excelとは相性が悪い。

でもMac派の私はxmlは嫌いなので、Excel派だ。

xmlはコンピュータ様にはわかりやすいかもしれないが、私はだめだ。ファイルがデカくなるし見通しが悪い。

どうも、一緒に開発をしているAbbott教授とは相性が悪い。

TypeScriptがExcel上で使えるようになったこともあって、HSP-SphereをExcel上で動くようにしてみた。Excelのセルの一つ一つはメモリーのようにも扱えるし、出力先として扱ってグラフィック表示につなげることもできる。

私はこれまで、JavaScriptを使ってブラウザー上で扱ってきたが、グラフィックはめんどくさい。キャンバスにキチンと書けばいいのだけど。

計算結果をコピペでExcelにもどして、なら最初からExcelでやった方が気が利いている。  
 色々な便利ツールを勉強も兼ねて開発してv-tubeで発表している。

Excel版ハンセン溶解度パラメータ推算式 Y-MB

<https://youtu.be/wjnNGPqB5LI>

DXによるHSP用データの生産性向上

<https://youtu.be/rYRH3zz11ZU>

量子ドットのようなナノ粒子のハンセン溶解度パラメータを得る方法

<https://youtu.be/Wm2kMW-pHCo>

特にデータ作成に使うととても便利だ。

また、HSPiPにはまだ載せてもらっていない新しいHSP距離の式を色々試せるのが良い。まだ取り扱いが確定していない、Electron donor, Electron Acceptorの式も気軽に試すことができる。

$$1: \sqrt{4.0*(dD1-dD2)^2+(dP1-dP2)^2+(dH1-dH2)^2}$$

$$2: \sqrt{4.0*(dD1-dD2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)^2+(dHbase1-dHbase2)^2}$$

$$3: \sqrt{((dDvdw1-dDvdw2)^2+(dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dH1-dH2)^2)}$$

$$4: \sqrt{((dDvdw1-dDvdw2)^2+(dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)^2+(dHbase1-dHbase2)^2)}$$

$$5: \sqrt{((dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dH1-dH2)^2)}$$

$$6: \sqrt{((dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)^2+(dHbase1-dHbase2)^2)}$$

$$7: \text{sign} \sqrt{4.0*(dD1-dD2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)*(dHbase1-dHbase2)}$$

$$8: \text{sign} \sqrt{((dDvdw1-dDvdw2)^2+(dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)*(dHbase1-dHbase2))}$$

$$9: \text{sign} \sqrt{((dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(dHacid1-dHacid2)*(dHbase1-dHbase2))}$$

$$10: \text{sign} \sqrt{4.0*(dD1-dD2)^2+(dP1-dP2)^2+(Y-ED1-Y-ED2)*(YEA1-YEA2)}$$

$$11: \text{sign} \sqrt{((dDvdw1-dDvdw2)^2+(dDfg1-dDfg2)^2+(dP1-dP2)^2+(Y-ED1-Y-ED2)*(YEA1-YEA2))}$$

現在6まで実装が終わった。この後は、ルートの中がマイナスになってしまうようなドナー/アクセプターの取り扱い式を実装するだけになった。

こうしてみると、私がHSPiP用に作った機能はほとんど皆Excel版で動く事になる。

HSPiP on Excelも完成間近だ。

そういえば、今まで使っていたIntel MacにはPararellでwindowsが動くようにしてあった。そのMacに麦茶を飲ませてしまった。動作はするが、液晶が一部お釈迦になったので新しいMac book proを購入した。（そしたらM3が出てとても頭にきている。）このmacに

pararellをインストールした。随分前からM1Macは使っているのだが、M1用のwindowsが正式対応でないので躊躇っていた。今回新たにPararellを購入したところ、本当にあっけなくwindows11を導入できた。これはお買い得だ。

## ハンセン溶解度パラメータ (HSP)利用

燃料ポンプの不具合によるリコールが相次いでいるらしい。

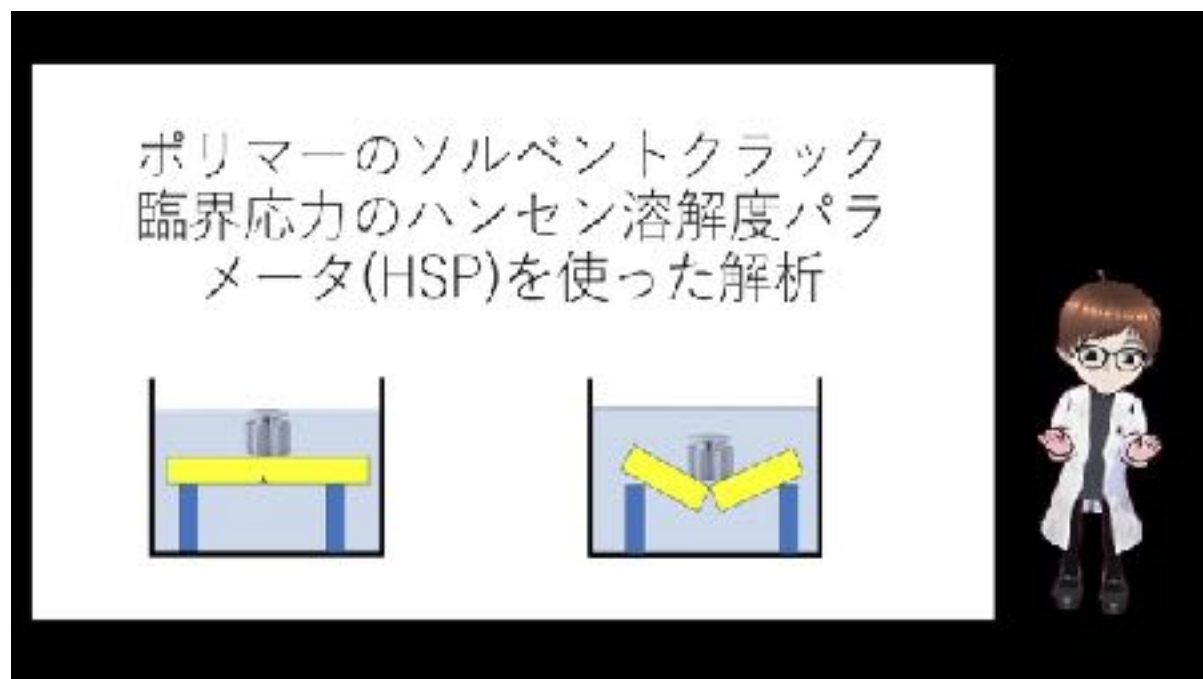
HSPiPの応用例の一つに、環境ストレス破壊(ESC)というのがある。

あるプラスチックに応力がかかる。燃料ポンプの中で、インペラという部品が高速で回る。すると羽根に圧力がかかる。燃料という液体があつて圧力がかかる場合に劣化が進むというのがESCだ。

同じ圧力がかかった場合、燃料のHSPとインペラのHSPが近いと、似たものは似たものを溶かすという原理が働く。クラックが深いところまで進んで羽根が折れてしまう。すると燃料を送れないので、エンストしてしまう。

e-Bookの13章をよく読んでみよう。(日本語版e-Book販売中！)

HSPiPを使って解析する方法をビデオ・チュートリアルで公開した。

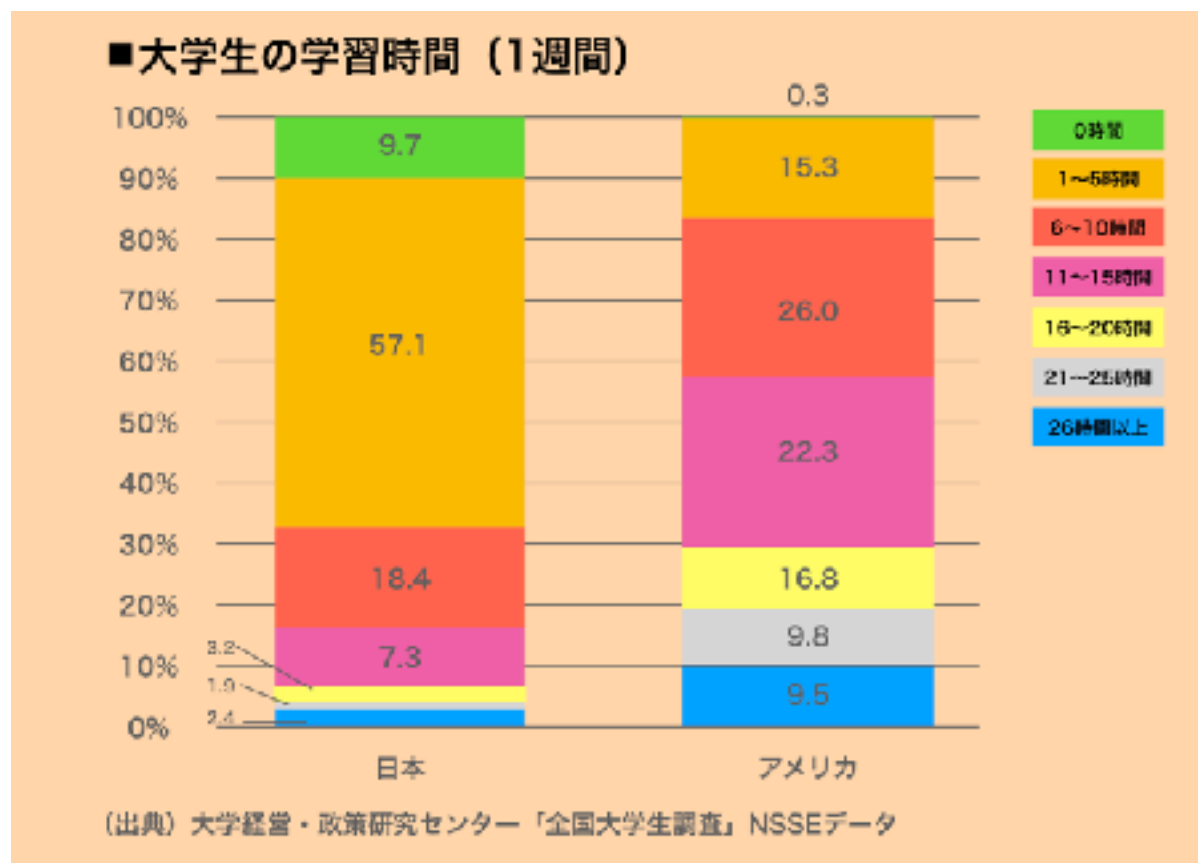


## リカレント教育・リスキル教育

うまくいく道筋が見えない。

アメリカの学生と、日本の学生の勉強時間を調べてみると良い。

授業以外でどのくらい勉強しているかというところのくらい差がある。



アメリカの大学生は、単位を取ろうとしたら毎週、専門書を1冊読んで理解してから授業に参加するのも普通だ。

社会人が、データサイエンスをリスキルするなら、15コマ（15週間）、毎日3-4時間勉強する覚悟が必要だ。

授業以外1日30分も勉強しないで、バイトに、サークルに明け暮れていた体験を前提に「学び直し」を考えているなら、やめた方が良い。修了証は手に入るかもしれないが人生の役に立つとも思えない。アメリカでこれだけ勉強している奴らを追い越すためにリスキルする。簡単にできることではない。データサイエンスなんて、そのうちAIがやってくれるように、アメリカの研究者がしてくれる。

グローバル人材育成には英語が不可欠と言われた時代もあった。超トップクラスは今でもそうだろうが、普通の人にはAI翻訳で十分だ。

生産性を上げるのにITスキルが重要だ。オフィス・スイーツの使いこなしが重要だ。

日本が没落し始めてから、「何が足りないから没落していくのか」は色々分析されている。

福岡先生の著書に、サプリの話があった。

「歳をとると、若い時と比べ、XXXXの成分がどんどん減っています。

これをサプリで補って、若い時の健康を取り戻しましょう。」

それが成立するなら「歳をとると、頭の毛がどんどん減ってしまいます。

食事の時に、髪の毛をバサバサ食べて毛髪成分の栄養を補いましょう。」

おかしいことは直ぐわかる。

それと同じだろう。

DX, AI, MI, IT能力が諸外国と比べて低く、生産性が低いから落ちぶれた。

DX, AI, MI, ITをバサバサ食べれば生産性が上がるだろう、なのか？

何故、DX, AI, MI, IT能力が諸外国と比べて落ちたのか？ 勉強しないから。

日本の教え方、教わり方が、世界標準の「勉強」というレベルに達していないから。

バサバサ食べても消化できないから。

何故勉強しないか？ 企業が勉強をした学生を欲しがらないから。大学のブランドだけで十分だから。能力の低い学生でもできるようなことしかやっていないから。

まー自分の経験で申し訳ないが、2007年に博士号をとった。毎日会社で働きながら、1年半、明け方3-4時まで博士論文に向き合った。もちろん土日は一日中費やした。

ものすごい、ブラックだ。

そもそも、学業なんて就業ではないので、労働ではない。何時間やろうが全く問題ない。

日本の大学が、労基で監督されるようになったのが誤りの根源だろう。

今は、合同会社の経営者なので、残業規制はない。好きなだけ学べる。

では、今何を学び直しているか？

TypeScriptやGPUプログラミングはいいとして、哲学や心理学が面白くなってきた。

AIは学びが面白いとは絶対に感じない。リカレント・リスキルするなら、自分で面白いと感じる事を選ぶことだ。会社や世間が人材が足りないからといって選ぶものではない。

経営工学のできる株のトレーダーなんて10年以上も前に死滅した。

## 最近の失敗

定年後が退屈になる原因の1つは「失敗」する機会がないことだ。外山滋比古と今朝の新聞にあった。

うん。定年してすぐ、毎日の色が消え、白黒になった気がした。

それは、2020年、コロナがスタートした年だったので、外にも出られない鬱屈とした状況でそう感じたのかと思っていた。

でも、ほぼコロナが終息しても同じように感じているので何故かな？と思っていた。

じゃー、「失敗」しないかという、転んで膝を割ったり、相変わらず失敗も多い。

失敗して悔しい思いをする人生は、逆に面白みも増やす、とも書いてあった。

失敗も多く、悔しい思いをし、毎日面白くてたまらない。でも景色が白黒なのは何故だろう？

もしかして、退屈になる原因の2つ目はコミュニケーションか。

でも現役の時には、一人でコンピュートルームに籠って仕事していた。会話はコンピュータとだけ。同僚や部下と話す時間がなくなったから退屈というのでもない。コミュニケーションの手段は、HP、SNS、ブログと多い。多分、情報がありすぎて全部に興味を持っていたら時間がいくらあっても足りない。退屈している暇はない。

私の今の人生がのっぺりした単色に思えるのは、ズバリ、「**締切が無い**」事だと思う。

毎月、pirika newsを書くことは締め切りを作ったことでもある。毎月給料日に発行できていなかったら給料日を遅らそう。

**今月の大失敗1**：Drug Development Supported by Informaticsという書籍の1節を執筆しなければならなかった。膝を割って外出もできない2ヶ月を使って書き進めた。ざっくり書き上げて56ページの大作になった。機械学習のさまざまな手法を網羅的に紹介する書籍は多くある。しかし、ある単元を説明する時には、その単元を説明しやすい例題で行う。そこで一貫性がない。自分のやりたい設計に対して、どう利用できるかわからない。そこで、麻酔薬の分子設計を例に、計算機科学のさまざまな手法をどう利用するのかの解説を書いた。自分でもいい出来だと思う。

ところが、編集会議用のワークスペースを見ると、私の担当は、製剤だった。機械学習の基礎では無かった。。。。

慌てて、製剤のところを書き直している。。。。。

**今月の大失敗2**：主成分分析(PCA)のプログラムは、2019年から公開してきた。自作のプログラムの大半は公開用とプライベート用の2種類を作る。コンサルしている会社にはPro版

を提供する。Web公開版で大事な情報が出力されていなかった。

まー、5年間、誰も指摘してこないところを見ると、誰も気がついていないのだろう。こっそり修正しておこう。ここが論文と異なり評価が低いところだが、便利なところだ。

Excel用のTypeScript版を作っていて気がついた。

## 大学の授業

第一薬科大学の、薬学ケモインフォマティクス学の8回が終了した。

授業はZOOMで行った。

横浜に住んでいる私に、福岡で2限の授業では、来るなど言っているのに等しい。

新しい学部なのでまだ2年生しかいない。学生数にも定員に全く達していない。飛行機代を出したくないのかな。

経営が苦しいのはわかるが、これ以外にもいろいろあって、第一薬科での授業は今年で終了することにした。

学生に教えたかった事は次のことだ。

大学は、単位を取っていれば、卒業させてくれる。卒業しからといってデータサイエンティストとして食べていかれるかは責任持たない。授業料と卒業証書の交換組織ではない。

先生は、教えたことを、テストで答えられれば、合格点を与える。合格点を与えたからって、社会に通用するかは保証しない。先生自身が、今後社会で通用するかわからない。

データサイエンスなんて、AIと一番相性が良い。すぐに人間を超えたAIが現れ、データサイエンティストなんて必要なくなる。証券会社の株のトレーダーもいなくなった。

その中でどう生きていくかだ。

記憶力と計算能力の高い=偏差値の高い学生なんてAIと変わらない。いくらでもコピペで増やせる。

でも、感性って磨けるものなのか？ 案外、偏差値の低い学生の方が感性は高いかもしれないと授業をしてみて思った。

次の先生がどう教えるかはわからないが、学生さんには頑張ってもらいたい。

横浜国大も2025年には完全引退を目指している。



# Pirika研究会・サイエンスカフェ・サイエンス居酒屋

2011年の授業を受けた元学生からメールが来た。

私が横浜国大の非常勤講師を始めたのが2011年だ。東日本大震災の年の秋だ。だから第一期生だ。

化学系のメーカーからコンサルに転職したそう。

そこで、化学系の話題をもっと気軽に話せる場の必要性を強く感じているという。

彼女がTech-potのオフィスを訪問してくれて色々話をした。たまたまTech-Potにいたバイオ系の研究者も輪に加わってくれて、さながら第1回サイエンスカフェのような会になった。うーん。そのような自然発生的に科学の話を延々2時間やって、またやろうねーって別れる。ある意味理想型だ。そんなものに興味を持つ人にどう届けるかが課題かな。私はSNSもほとんどやっていないので、若い人のネットワークにかけるしかないか。

一緒に幹事してくれる人大募集中！！

24日に大学の先輩たちと飲んだ。サイエンス居酒屋いいねー。やろうやろうと言っている。ま、現役を離れた我々は居酒屋で楽しむのもいいかな。

## アバターチュートリアル

危険ドラッグ類のハンセンの溶解度パラメータ

<https://youtu.be/BMMz6puzvzs>

ガソリンに添加剤を加えるとポリマーは壊れやすくなる？

<https://youtu.be/gBRMYYf-Qvg>

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>

など今月はいっぱい作った。作るのにもだいぶ慣れてきた。



## 最近見たテレビ

アニメ銀河鉄道999を初めてまともに見た。

元は1977年に始まった漫画だ。

SLのような、でも中身は最新鋭の宇宙船で、さまざまな星を巡る。星によってその住人は様々な生き方をしている。

見ていて思ったのがスタートレックとの違いだ。年代を調べてみるとスタートレックの方が早い。私はスタートレックはDVDを全部大人買いしている。大ファンだ。

一番最初の宇宙大作戦は、仕掛けがあまりにも拙い。アニメの方がよほど表現力は高い。

アニメでも、スタートレックでも、星新一のショートショートでもいい。

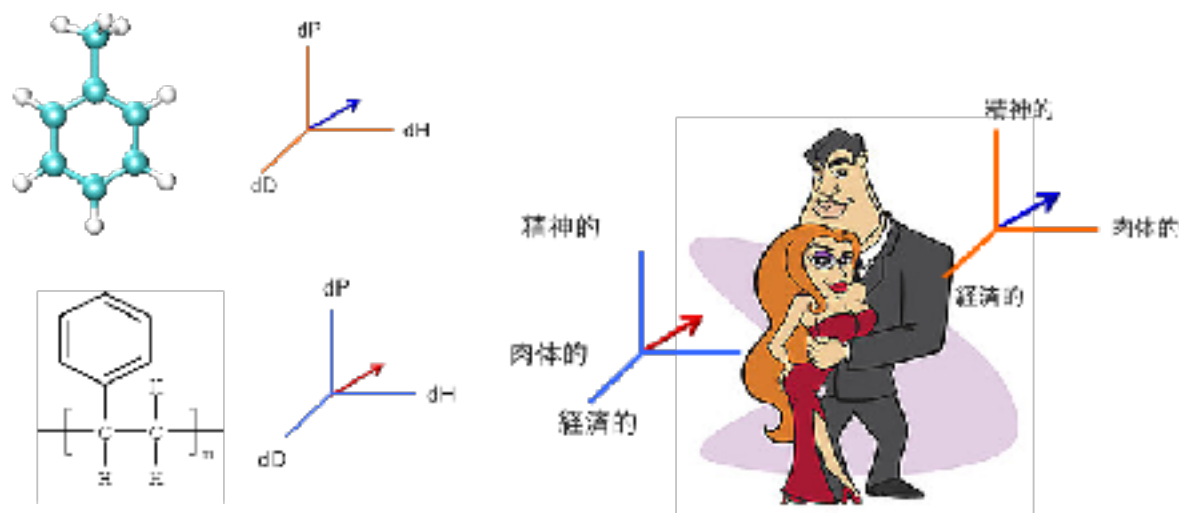
そうしたファンであるなら、多様性については色々考えただろう。

ロシアやイスラエルの戦争好きの輩は、日本のアニメ、ガンダムとかよく見れば良いと思う。

宇宙から攻められるまで気が付けないのか。。。

## 少子化対策

ハンセンの溶解度パラメータ(HSP)のコンセプトは、似たベクトルは似たベクトルを溶かすだ。



相手の心を溶かすのも同じだ。

1次元の溶解度パラメータではミスマッチが起きる。



現在の少子化の原因が、色々言われている。私は多様性が高まりすぎて、ベクトルが重なりが小さいことが原因ではないかと思う。

今の時代なら、私は結婚できない種類の男だったと思う。

何かで読んだが、人類以外の動物は、強い雄が子孫を残す。強いものが勝ったのではなく、残ったものが強いのかもしれないが。

雌は強いもの順に強い雄を選べる。

ところが、人類の雌は、強い雄を求めない、変わった雌がある割合存在したらしい。

強くはないが、道具作りにはまってしまうような雄がカッコよく見えたりして、子孫を残したいと思うような変わった雌がいた。それが他の哺乳類と人間の違いとなった。

違うベクトルを持っているから面白い。違うベクトルは補い合えば良いと思えば変わるかもしれない。

今、ハンセンの溶解度パラメータに、ドナーとアクセプターを導入しようとして苦しんでいる。これは似たベクトルが溶解しやすいという概念から外れる。電気のプラスとマイナス、磁石のNとSのように異なったものが引き合い、同じものが反発する。それが溶解にどう関わるか? 研究している。

5-60歳のむさいジジイが、自分の老後のために子供を産んでくれ。って泣きついていたら、若者は超伝導磁石の反発のように飛んで逃げてくださるかな。

## CLIライセンスの販売

私はソフトウェアのライセンスは厳しく管理するべきだと思っている。特に会社名で購入しているコーポレートライセンスやCLIライセンスをいい加減に管理して社外に流出させたりすると大問題になる。

Abbott先生は逆にうるさい事言っても守らない奴は守らない。無駄なことはしないというスタンスだ。CLIライセンスの購入に対して利用状況の確認すらしない。

それなら、日本だけ、厳しく販売してしている私の立場はないじゃないかと、pirikaではCLIライセンスの取り扱いをやめた。

今週だけでCLIライセンスの引き合いが3件続いた。

そしたらAbbott先生から泣が入った。

12月の頭からイギリスに2週間行ってくる。その時にどういう販売形態にするか議論してくる。

でも、新バージョンのリリースとともに値上げも予定されている。

もう10年も値上げしていない。

上げ幅をどうするか話している。

日本では、円安が進んで、30%ぐらい値段が高くなっている。でも売り上げは落ちていない。ということは世界販売でも30%の値上げは許容されるだろう。

日本での価格は、円安も加味すると去年の1.6倍？

まー、CLI機能にMI用の識別子を搭載するとか、データ作成のツールの提供とかで付加価値を上げていくしかないかな。

だんだん、pirika newsにふさわしい研究っぽい話題が増えてきた。

たまにメールで「Pirika News読んでいます」というリアクションをもらうこともある。

嬉しいものだ。

来月号は、12/1-12-14までイギリスのAbbott先生のところにホームステイし次期バージョンの最終設定と、ドイツでの分散関係のworkshopへの参加の話がメインになるかな。

こんな話も聞きたいというリクエストもお待ちしています。