

pirika.comの研究記録

Pirika News



京都の高山寺へ行ってきた。鳥獣戯画で有名なお寺だ。なぞり書き練習帳を買ってきて練習中だ。

「AI時代の物性推算法の構築技術」を投稿した。



プログラムとしては2019年に作ったものなので今では古い。

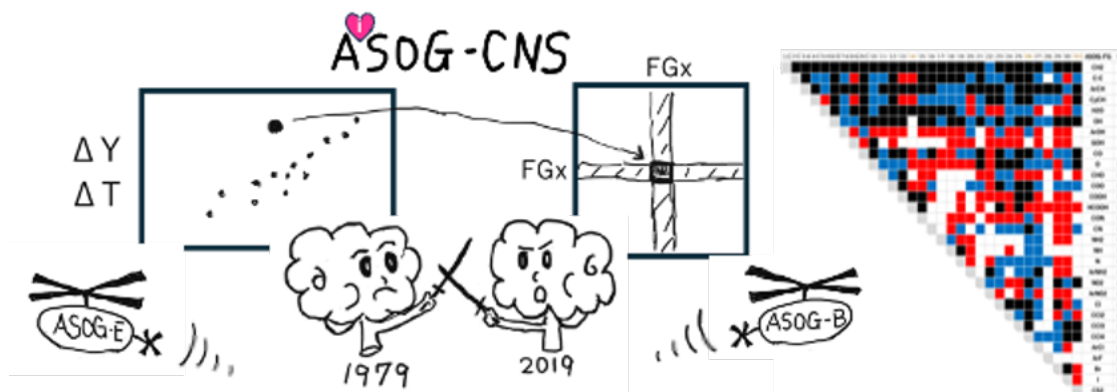
気液平衡を推算するASOG法という方法がある。計算するためには蒸気圧式と構成する原子団の局所活量係数が必要になる。ところが、この蒸気圧を計算するためのAntoine定数や、活量係数を計算するASOGパラメータは決定するのが難しく、1年に原子団10ペア程度しか増えていないというのが現状である。同じような気液平衡を計算するUNIFAC法は、コンソーシアム方式になった為、パラメータは一般に公開されない。

ASOG法に関しては、日大、栃木教授がいまだに精力的に研究を続けられている。

(ちなみに、私は博士号を栃木先生のところで頂いた。)

新たなパラメータが先生から発表されている。しかし、ASOG法を用いて気液平衡を計算するソフトウェアは無い。

2019年はASOG法の50周年の年であったので、AIを使ってASOGパラメータを決めるAiSOGプロジェクトを私一人で始めた。



特に目新しくはないが、自己対戦法を使ってASOGパラメータを決定した。気液平衡の実測データ、活量係数のデータ、共沸のデータを集めた。1979年に書籍に記載されているASOGパラメータを使って集めたデータの気液平衡を計算する。気相、液相の比率の誤差、温度の誤差の総和が得られる。例えばASOGパラメータが求まっていないと誤差は大きい。そこで、ASOGパラメータが自己対戦法で総誤差が最小になるようにパラメータを進化させていく。

AiSOGに関しては2019年からpirika.comで公開している。でも、5年以上経っても何のリアクションも無い。今回「AI時代の物性推算法」を書いて欲しいというので、投稿した。でも、多分、こんな投稿にも何のリアクションも無いだろうと思う。

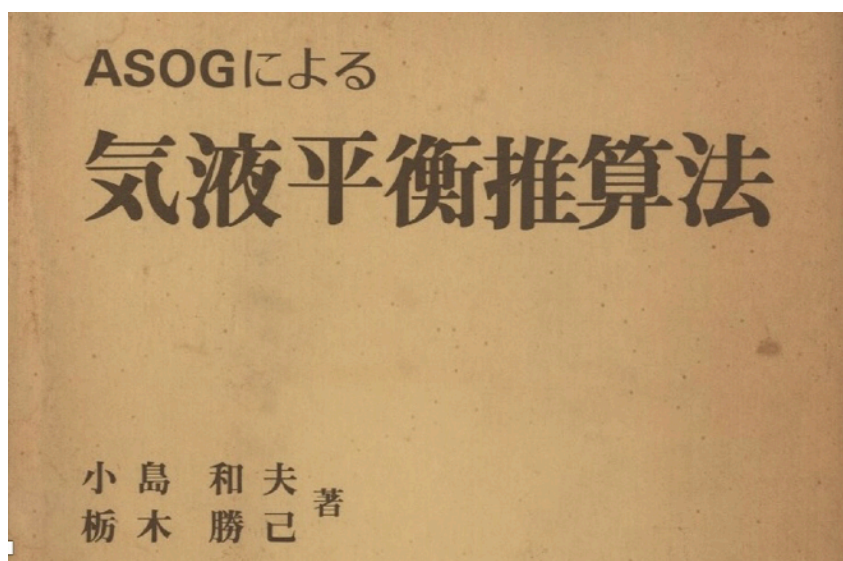
そのうち、AIが欠損パラメータを埋めるデータを勝手にネットを検索して見つけていく時代が来るだろうと2019年に予測した。このところの生成AIの能力を見ると、そう遠くないだろうと思う。

それでは、ASOG法を使って実際に計算できるようにするにはどうしたらいいのだろうか？大学や学会のサーバーで計算できるようにするのが一番いいのだろうが、多分メンテナンスできないだろう。

時代遅れの懐古趣味と言われるだろうが、[「復刻版：ASOGによる気液平衡推算法」](#)をpirikaのページに置いた。書籍に記載の化合物ペアを実際に計算することができる。

このページは英語版も作ってあるので、将来は日本以外でASOG法は生き残っていくだろう。

そうそう、Joback先生とこの前打ち合わせを行ったときに、先生の方でもASOG法を実装することになった。



最近の仕事

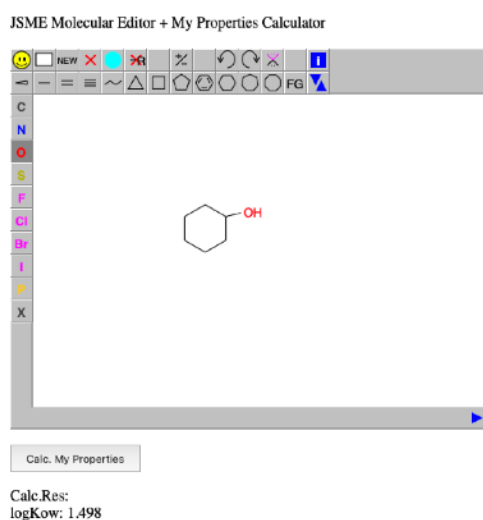
大学を完全に隠遁したので、時間はある。まずはHPのメンテナンスだ。基礎的なことはざっくり直した。次は13年間分の大学で行った講義を全部HPにあげてしまおうと思う。

[化学工学のページ](#)にはASOGのページを大量に付け加えた。

[高分子関係は全面的に書き直した](#)。このところ、韓国や中国の企業からの問い合わせが急増している。個別に答えるのも面倒なので、「まずはHPをよく読んで」と言えるようにまとめ直し始めた。まー、今後高分子関係は一番力を入れるかもしれない。

[物性化学のページ](#)も、物性推算のWebアプリをJSMEを使ったものに全面的に書き直している。もともとは、自作のお絵かきソフトを使っていたのだが、もう更新するのが面倒だし、JSMEに1本化しようというわけだ。

例えば[logPのページ](#)ではこうなる。

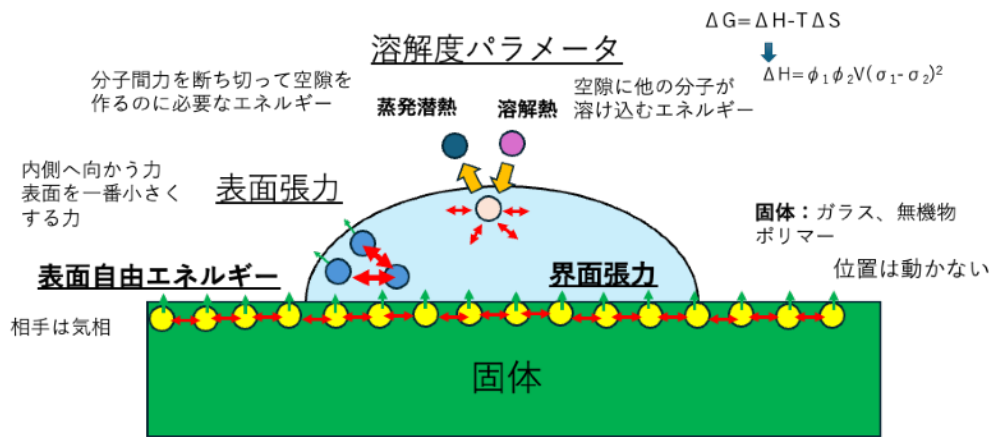


JSMEで分子を描いてもいいし、SMILESの構造式をペーストしても良い。中身は大学で使っていたパラメータなので3世代前だ。（最新の物を使いたいならHSPiPを購入して欲しい。）それでも、大学での講義で必要だった物性は吐き出せるだろう。

[情報化学+教育のページ](#)は取り敢えずWordPressに載せ終わった。でも中身が古いので徐々に書き直していこう。

頭の劣化が止まらない

表面エネルギーなどをまとめている。液体、ポリマー、ガラスの表面張力と溶解度パラメータは皆親戚だ。その話の流れで、ガラスの表面張力の推算式を作った。

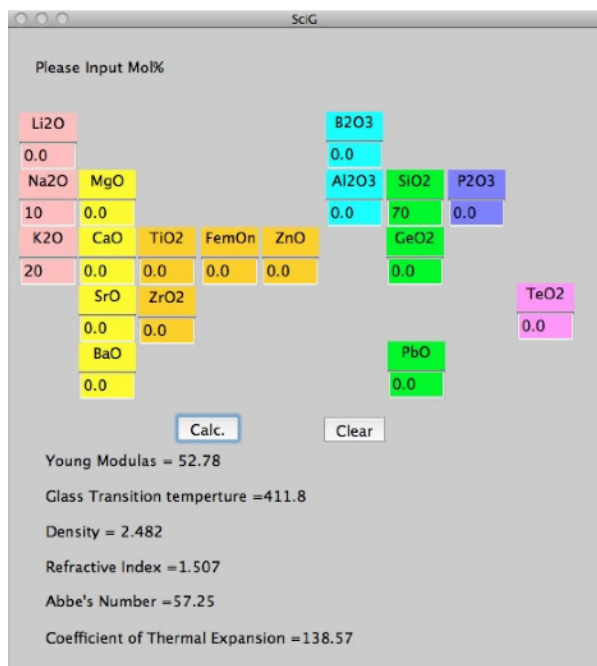


ガラスの酸化物の組成から表面張力の推算式をつくる。それ自体はガラスの他の物性推算式を作ってきたので(データを持っていれば)簡単なことだ。(自分の脳みそはもう信じないが、これまでに作ったものは無かった)

組成から物性を推算する。逆設計で物性から組成を作り出す。そんなプログラムは、pirikaを始めた1999年からJAVAのプログラムで作っていた。

このプログラムは、未だに動く。でもセキュリティーの関係でHPに載せてブラウザで動かすのはできない。(JAVAがインストールされていれば、コマンドプロンプトから A>appletviewer galss.htmlで動く)

最近はJavaScriptに変更しているので、昔のJAVAのプログラムは書き直している。



プログラムの開発は一箇所にまとめてある。が、40年分の財産。14.5G（202,021項目）検索しても見つからない。そこで、JAVAプログラムをJavaScriptに置き換えて、さらに表面張力を計算するルーチンを付け加えることにした。

ほぼ完成したときに、既に作ってあった完成品が現れた。

[退職3年縛り終了。ガラスやフッ素も。](#) (2023.4.20)

1年ちょっと前に作ってブログにまで書いているのに完全に忘れている。この脳みそ、ほんとやばい。

そのうちに講演会で「何度聞いてもいい話ですね。」と言われるようになるだろうな。(前話したことを忘れて、また話してしまう。) そうなったら、コンサルも引退しどきだ。

そのような時が来たら、遠慮なく「何度聞いてもいい話ですね」と言ってくれる担当者を確保しておく事が大事だ。

でも、ボケるということは、それを聞いても、「あつ」と思わなくなることかもしれない。

パスワードを書いた紙をどこに隠したか忘れるようなものだろう。難しい問題だ。

そうして完全引退したら何をしよう？ それは心配していない。私のハードディスクには書類は128Gある。ゆっくり解析しようと溜め込んだものがあふれている。きっとガンダムのアムロのお父さんみたいになるのだろうな。低酸素症で時代遅れのガンダムのパーツを作り続けた。

でも、それはそれで幸せだ。忘れちゃうから毎日が新しい発見だ。そうして考えると、スター・トレック、寅さん、コロンボ。忘れちゃうから、しばらくすると、新鮮に楽しめるのと同じだ。

そういうものが表に出ないで失われれば、後の研究者は世界初にもなるし。でも、忘備録でHPに載せちゃうとAI検索は遡ってくるかもな。

ま、とにかく、信じないで欲しい。(本人も信じていない)