

pirika.comの研究記録

Pirika News

身内で初めてのノーベル賞受賞者



かみさんのお父さんは長崎で被爆した。今年のノーベル賞は日本被団協が受賞した。その際「被爆を語り継いでいる方、語り継いで亡くなられた方」が受賞者であると発表された。

おじいちゃんは、今年の1月に92歳で亡くなったが、れっきとした受賞者だと言える。

今月の研究

今月は、主に表面自由エネルギーの講演会の準備を行なった。

元から液体の表面張力はこれまでも色々研究してHPで公開してきた。

しかし、固体の表面自由エネルギーや固液の界面張力や、液液の界面張力はあまりやってこなかった。今回はチャンスなのでこれまでの研究の総まとめを行なった。

パワポで100枚を超える量になった。

ハンセン溶解度パラメータ(HSP)と表面設計への応用

25°C(r.t.)が表面設計をわからなくする。

溶解度パラメータ(SP値)が接着に大きく関与していることは1967年に発表されたIYENGAらの論文に記載されている。よく濡れるものは剥がれにくいという言い方もある。

液体の溶解度パラメータも表面張力も温度に依存する物性値である。しかし室温以外の温度で議論されることはとても少ない。固体に関しては更に室温以外で評価されることは少ない。

ハンセン溶解度パラメータ(HSP)と表面設計への応用

本日の議題

欧米式の反転授業形式

今回使うソフトウェア

何故水面に近づくにつれて泡が大きくなるか？

分子間力を断ち切る運動エネルギー

皆、親戚

溶解度パラメータとは？

1次元の溶解度パラメータ

ハンセンの溶解度パラメータ(HSP)

HSPiPでの δD の計算法

HSPiP中での δP の計算法

HSPiP中での δH の計算法

溶媒のHSP値が決まっていれば

溶質(ポリマー)のHansenの溶解度パラメーター

HSPの基準温度25°C(r.t.)が解らなくする

HSPベクトルは何故比べていいのか？

対応状態原理

液体の表面張力

データの収集

分子構造と表面張力

温度依存性

圧力依存性

温度・圧力の効果

沸点が約100°Cの化合物の液体表面張力

横軸の変換

さらに臨界圧力(P_c)を用いて補正

Macleod-Sugden法 表面張力推算

Parachor、表面張力への寄与

Brock-Bird法 表面張力推算

Brock-Bird法推算結果

山本作成—解析ソフトCTMR

Amide化合物の予測性

温度、圧力の効果をキャンセル

データのクレンジング

SP値と表面張力の関係

Koehnhen式を検証

山本作成のHSP-MIRAI法

任意の温度での表面張力を成分ごとに計算

豊田中研の好きな50化合物に限ると

山本のデータ駆動型研究

表面張力

液体表面張力の誤解

屈折率とは？

ParachorとRDから計算した表面張力

山本作成－MIRAI法解析ソフト

ポリマーのHSPと表面張力

ポリマーのHSPの求め方

接着とSP値

表面張力の測定

溶融ポリマーの表面張力温度依存性

ポリマー物性推算ソフトウェアY-PB

臨界表面張力

表面自由エネルギーの基礎式

Y-PBの推算精度

HSP-MIRAI法による γ_c の分割

臨界表面張力の成分分解

分割した γ_c は界面張力に使う

接触角を用いた粘着シートの評価

HSPは3(4)次元の距離で考える

Y-PBの推算

希ガスとパーフルオロ化合物をプロット

カポック繊維接触角

酸化物ガラスのHSPと表面自由エネルギー

データ収集

ガラスのHSPの決定法

無機物のHSPの決定法

溶融酸化物ガラスの表面張力

ガラス表面張力の回帰式

ガラスの表面張力推算

一見するとどちらも良い推算式

組成設計

55年前の溶融ガラスの表面張力

表面張力とHSPのテーブル作成

解析ソフト、MIRAI-E

パワー関数の意味

逆設計：任意の物性を持つガラス組成

酸化物ガラスのHSPと物性

酸化物ガラスのHSP

無機物であってもSP値はある

Rare Gases & Fluorinated Compounds

+Hydrocarbons

金属フッ化物であっても同じ

NASA：合金設計

何故ジメチルシリコーンは水を弾くか？

電子状態

界面張力

液体－水の界面張力

既存の界面張力の推算式

既存式の評価

独自式の作成

次世代HSPを使う

ポリマーブレンドの界面張力

ポリマーブレンドの界面張力

次世代HSPを使った評価

固体と液体の界面張力

次世代HSPiPを使った評価

まとめ

対応状態原理のベースをどこにとるか？

化合物の蒸気圧

Antoine 蒸気圧式

Antoine C パラメータ

Antoine B, C パラメータ

山本の換算温度

温度に依存する物性値：表面張力

Corresponding State Theory(CST)

豊田中研の好きな50溶媒の表面張力

まー、自分で言うのも何だが、大作だ。

半分ぐらいは「おまけ」で理解を深めるための資料だ。

また、用語などはpirikaで説明しているところにリンクを貼ってある。

2週間前には配布するので、当日までによく読んでおく。

いわゆる、欧米での反転授業の形式だ。

どうなることか、楽しみだ。

人生で初めての競馬場

息子の一人は三鷹に住んでいる。そして競馬場でアルバイトをしたりしている。
私たち夫婦は競馬の楽しみはわからないが、息子が案内してくれると言うので行ってきた。



カミさんは3戦にかけて3戦とも当てた。500円の儲け。
僕は何もわからないから、3戦とも馬の名前だけから選んで全滅。

芝生での昼寝は気持ちよかった。

息子のバイト先の居酒屋

夕飯は居酒屋で。

ジブリ美術館

翌日はジブリ美術館を堪能。



HSP距離の新33式の高速化

Webアプリをexe化してユーザーに提供している。ところがこのexe化すると、どうも計算が遅い。ブラウザで計算すると5分以内で計算が終了するのに、30分以上かかったりする。(もちろんサイズにもよるが)

そこで、Webアプリの高速化を検討した。一番簡単なJavaScriptのWorkerをつくることにした。JavaScriptは時間のかかる計算を始めてしまうとブラウザの操作やなどができなくなる。その時には計算に時間のかかる部分だけをWorkerとして独立のプログラムにしてみよう。Javaなどで言うところのThreadみたいなものか。

Core数に合わせて並列にJobを放り込む。私のMacは10コアなので5つ並列で動かすことにする。

見事に、CPU使用量500%になった。これはexe化しても有効で、結局20倍ぐらい早くなった。

独立のアプリ化できると、アプリに有効期限をつけて販売したりできるので嬉しい。

Workerの作り方はとてもトリッキーなものを使った。

JavaScriptの勉強を始めたのは2011年頃だ。その時に手習でMDのシミュレータを作ってみた。MDは時間がかかるので、温度の設定を変えたり、回転とかができなくなる。そこでWorkerを使うしかなかった。ところが当時は情報が少なくWorkerの制御が難しかった。

やりたいことは、原子の3次元座標が決まったら、電荷平衡法、QeQを使って原子の電荷を計算する。これがサイズが大きいと結構時間がかかる。原子は温度によってある運動エネルギーを持って移動する。衝突の判定、電荷によるブレーキなども時間のかかる計算だ。

Workerを複数動かすのに、JavaScriptのアニメーションを利用した。

アニメーションは、Update () と ReDraw () を指定時間を置いて発生させることができる。Redrawのルーチンの中でWorkerの動作をチェックして、終了していたら結果を取り出し次のJobを走らせる。(MDの中ではちゃんとDrawを行う)

まー、正しい動かし方ではないだろうが、とりあえず最速で並列化ができた。

クライアントの所で実際に動かしたところ、きちんと動作させることが確認できた。

今回、webアプリのexeでの高速化を検討始めた所で、ChatGPTに方針を聞いた。

4つぐらいあった提案の一番最初がWorkerを使うものだった。

