

## KBMSによる化学反応知識構成法

4G-5

山崎毅文、桑原敏

NTT 情報通信処理研究所

## 1. はじめに

化学専門家が物質の合成経路を推定する場合、反応に関する文献、あるいはデータベースを検索し、適切な合成経路をみつけだす方法だけでなく、専門家自身の経験的な知識に基づいて経路を推定する方法も用いている。

ここでは、後者について、計算機による経路推定支援を目標にした知識ベースシステムを構築するにあたり、工学的にこれらの知識を取り扱うことのできる計算機内部表現方法について、エキスパートシステム構築支援ツール-KBMSの表現形式を用いて検討した結果を報告する。

## 2. 知識の分類とKBMSでの表現法

## 2.1 知識の分類

化学物質を計算機上で取り扱うためには、まず化学物質の組成情報を計算機内に表現する必要がある。次に、推論を働かせるための化学反応の知識を表現する必要がある。KBMSを使用して推論するためには、KBMSのフレーム/ルールの2種の知識表現形式の有効的な利用を考慮し、前者は事実知識としてKBMSのフレーム表現を用い、後者は専門家の経験的知識であるからルール表現を用いる。

## 2.2 KBMSを用いた知識表現法

## (1) 化合物組成知識

化学の分野において物質の組成を表現する一般的な方法としては化学構造式が多く使用される。

設計しようとする化学者をユーザとすれば、ユーザは標的化合物を構造式で入力し、結果は構造式で出力されるべきである。標的化合物の構造式は、計算機内部で結合表(コネクションテーブル)の形に変換される。この結合表は、反応経路設計を行なうのに必要な特徴(化合物組成知識)の認識に用いられる。認識された特徴が、KBMSのフレーム表現に変換されることになる。KBMSのフレームとしては、図1に示す通り、部分構造クラスの

スーパークラスとして、①官能基、②官能基グループ、③結合関係、④位置関係、各クラスを定義する。①~④の各クラスのロットは、標的化合物の特徴が記述されており、これらのロットは部分構造クラスに遺伝する。このように、組成知識をスーパークラス-サブクラスという階層構造にしたのは、認識すべき特徴の追加を容易にするのと知識構造を見やすくするためである。入力された各標的化合物に対して、部分構造クラスの下に入力構造インスタンスが生成され、認識された特徴が、このインスタンスのロットの変数値として登録される。

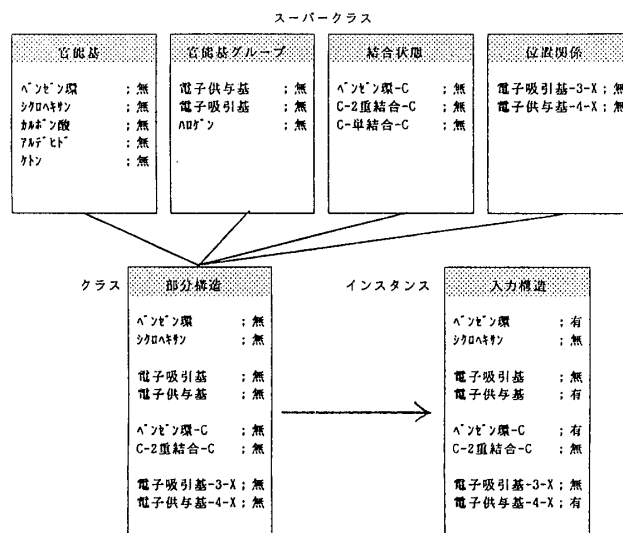


図1 フレーム構成

## (2) 反応知識の表現

専門家の経験的な化学反応に関する知識はKBMSのルール形式で表現される。ルールの条件部は物質の特徴を表現しているフレームのロットの変数値を探査するための条件を指定し、アクション部は反応(ここでは逆合成を前提にし、結合の切断、付加、置換等)の実行関数が記述される。

The structure of knowledge base using KBMS for chemical synthesis.

Satoshi KUWAHARA, Takefumi YAMAZAKI

NTT Communications and Information Processing Laboratories

ルールは対象としている化学反応に依存して、システムにあらかじめ構築されている必要があるが、専門家が自由に変更、追加できる必要がある。

ルールの例を図2に示す。

```
(call (change '第一アミノ基' 'ニトロ基'))
)
(defrule (trans r10)
  (frame (部分構造 入力構造 (ベンゼン環-単結合-NHOH あり)))
  --)
  (call (change 'NHOH' 'ニトロ基'))
)
(defrule (trans r11)
  (frame (部分構造 入力構造 (ベンゼン環-単結合-電子供与基 あり)))
  (frame (部分構造 入力構造 (ベンゼン環-単結合-X基 あり)))
  (frame (部分構造 入力構造 (電子供与基-3-X基 あり)))
  --)
  (call (change 'X基' '水素'))
)
(defrule (trans r12)
  (frame (部分構造 入力構造 (ベンゼン環-単結合-電子吸引基 あり)))
  (frame (部分構造 入力構造 (ベンゼン環-単結合-X基 あり)))
  (frame (部分構造 入力構造 (電子吸引基-4-X基 あり)))
  --)
  (call (change 'X基' '水素'))
)
```

図2 反応ルール例

### 3. 反応経路選定知識ベースシステムでの適用実験

KBMSを用いた反応経路選定システムの全体構成を図3に示す。

化学物質の反応設計支援をユーザが行えるためには知識ベースシステムの核に化学物質の構造式が取り扱える構造図エディタをユーザ間インタフェースに設ける。

標的化合物は構造式で入力され、上記の知識を用いて推論が行われる。

結果は反応前駆体の構造式、及び反応条件（試薬、溶媒、温度等）が出力される。

反応知識は、KBMSのルールエディタ、あるいは専門家向きエディタを使用して投入する方法、さらには反応データベースを利用して知識を収集する方法が用いられる。

これら知識ベースシステムの周辺機能群（エディタ、特徴認識部等）に

ついては、既存のものを連結する方法の他、KBMSのツールキット等を利用して作成することもできる。

### 4. まとめ

反応経路設計は化学物質の対象によって抽出すべき特徴単位、及び反応知識が大きく異なるため、汎用的な設計支援システムを開発することは極めて難しく、システムにはあらかじめ教科書的な知識を構築しておく必要があるが、個々の専門分野に適合できるように、専門家自らが知識を追加できる構成が望ましい。KBMSの知識管理機構はモジュール化、世代管理等が容易であり、この要求条件にマッチしている。

より実用的なシステムにする際には、反応知識の充実化が必須であり、反応に関する知識のデータベース等からの自動抽出等を専門家の知識投入の補助に利用することを検討する必要がある。このためには計算機が化学反応を認識できるための反応の表現法を明確にする必要があり、今後はこれを中心に検討を進める予定である。

最後に、本研究にあたり、多大なご協力をいただいた関係機関の皆様様に深謝致します。また、検討に際して、ご指導いただいたN T T情報通信研究所吉田清主幹研究員、ならびに馬場正和主任研究員に感謝致します。

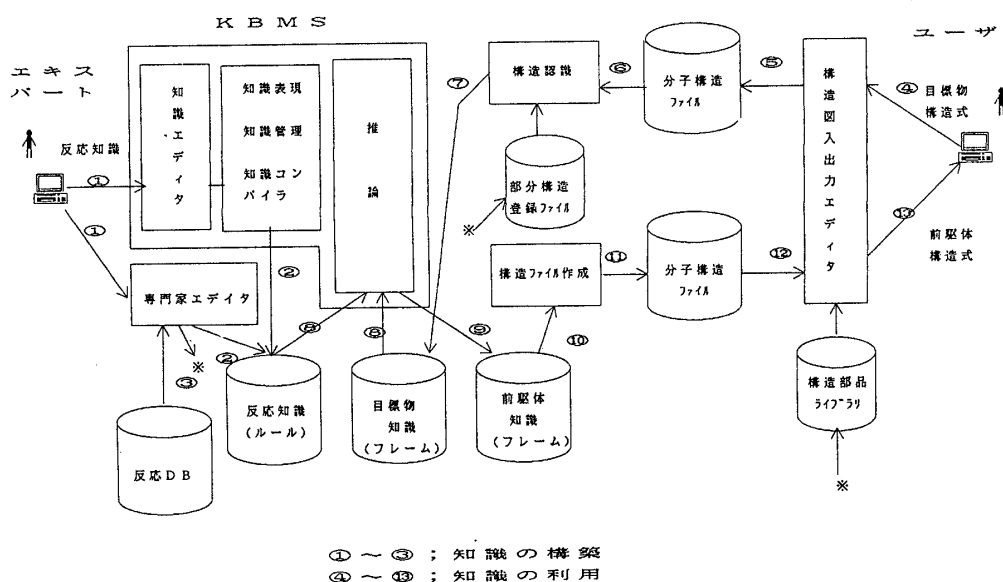


図3 反応経路選定知識ベースシステムの概要

なお、本研究は、科学技術庁の昭和62年度科学技術振興調整費による「化学物質設計等支援のための知識ベース、及び推論システムの開発」（研究推進委員長 東海大学 米田 幸夫教授）の一環として行われたものです。