

高分子材料設計支援システム「EXP OD」

6K-7

— 基本概念とシステム構成 —

山内 正 谷口 正人 飯沼 聡 鷲 弘樹 吉光 宏

(株) 三菱総合研究所

1. はじめに

化学・材料分野における研究・開発支援システムの実用化は、対象とする知識やデータの多様性、多量性、個々の記述レベルの独自性に起因し、実用化のレベルに達している事例は少ない。しかしながら、新素材開発競争の激化する昨今、この分野においても設計作業の効率化、情報の迅速・円滑な管理・運用の実現は急務である。我々は、こうした背景の下、高分子材料設計支援システム EXP OD (Expert System for Polymer Design) の実用化に向けた研究開発を行った。本稿では、EXP OD の基本概念とシステム構成について述べる。

2. 高分子材料設計支援機能のシステム化

開発に際しては、高分子材料の企画・設計・開発の効率化、高分子情報の有効利用といった観点から、知識工学的手法を用い、設計作業の分析、化学情報の特徴分析・知識の構造化を通じた開発を行った。エンジニアリングプラスチックに代表される高分子材料は身近なところで広く利用されている材料であり、分子量や結合状態が低分子化合物に比べ、きわめて複雑であり、種類及び構造の多種・多様性から、物性値データの収集が十分に完備している現状とはいえない。従って、材料設計の局面において、実験室的に物性値(密度、融点、ガラス転移温度等)が測定されていないような新規高分子材料の諸物性について計算機によりその値を推定あるいは評価することは、研究開発の促進ならびに合理化に極めて重要な意味を持つ。

図1にEXP ODの機能概要を示す。主機能は、化学物の構造から、相関式・原子団寄与に関するテーブル等の半経験則を用いて、物性を推算する機能である。(半経験則という名称は、推算式を構成する要素は、理論的背景のものに設定されているが、係数・補正項等は、個々の物質、条件毎の測定結果をもとに専門家の経験により定められた関係・手続きから成り立つことによる。)

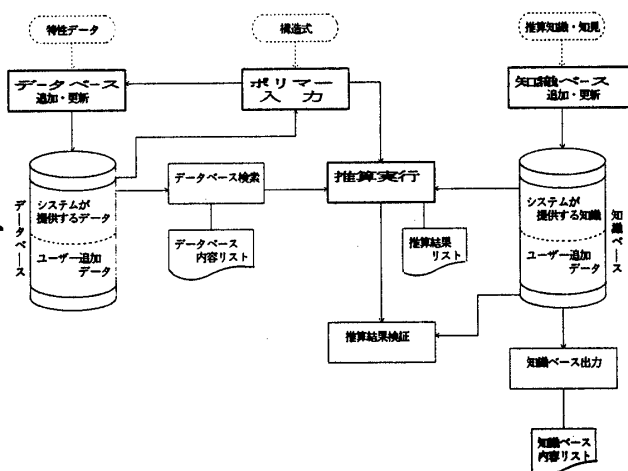


図1 機能概要

具体的には、高分子研究者が、部分構造の組立、既存のポリマー構造の編集などからポリマーを設定入力し、知識ベースで設定・登録可能な半経験的予測手法を用いて物性値の推算を行う。この時、物性値の推算に届まらず実測値データベース、定性的知見からなる経験則知識ベースを用いて推算結果の検証を行う。

3. 知識・データ構造

化学研究開発に用いられる情報・知識を効率よく利用し、システム化するためには、高分子材料設計情報の特徴分析を踏まえたアプローチが必要となる。化学・材料開発といった分野に用いられる情報・知識の内容表現形態を考慮すると、以下の3点に大別できる。

- ① 事実
物性値、定数、実験値など、主に数値情報の形式をとり、データベースとして表現される。
- ② 構造
化合物の結合関係、配座に関する情報であり、グラフなどの離散数学モデルを用いて表現される。
- ③ 規則

理論、予測手法、経験則等の情報で、関係式、ルール、規則などいわゆる知識ベースとして表現される。実際に物性推算機能をシステム化する観点から、利用される情報・知識を分類すると以下ようになる。

- ① 実測データ (事実)
- ② 高分子化合物の構造に関する情報 (構造)
- ③ 半経験的予測法 (規則)
- ④ 経験則 (定性的知見) (規則)
- ⑤ 推算方法の使い分けに関する知識 (規則)

事実に関する情報は実測ポリマーデータベースに、構造に関する情報は、内部のポリマー部分構造辞書と、部分構造の集合としての構造単位フォルダーに、集約される。ポリマーデータベースの主な構成要素としては、物質名、構造式、分子構造、各特性データに関する情報があり、構造に関する情報として主に化学構造式がある。構造式の内部表現にあたっては、高分子化学の立場から自然と考えられるいくつかの原子で構成された原子団(部分構造)を基本要素として定義し、各原子団をグラフの点に対応させる方法を採用している。

残りの知識ベースに格納する知識は、利用形態、操作性の観点から、推算法ベース、推算式ベース、パラメータテーブル、ストラテジーベースとして管理される。

更に、検証用の定性的知見やポリマーの属する系を分類・定義するための知識がシステムに組み込まれる。

4. システム構成・機能

システム機能は、以下の4つに集約される。

(1) 推算機能

推算機能には、知識ベース中の推算法を用いて指定ポリマーの指定特性を推算する機能(推算実行)と結果の評価・検証のため、指定ポリマー構造と類似の構造を持つポリマーを検索する機能がある。

(2) ポリマーモデリング機能(構造入力)

構造式モデリングを以下の2つの方法で入力できる。

・ 組立入力

構造式をその構成要素(部分構造)から組み立てて作成する。作成に使用する構成要素として、システムで提示する部分構造(基本要素メニュー)およびユーザーが基本要素メニューから作成して登録した構造単位フォルダーが利用できる。

・ 既存ポリマー構造の編集入力

登録済みのポリマーの構造に部分構造の追加、削除等の編集を行って、新たな構造式を作成する。

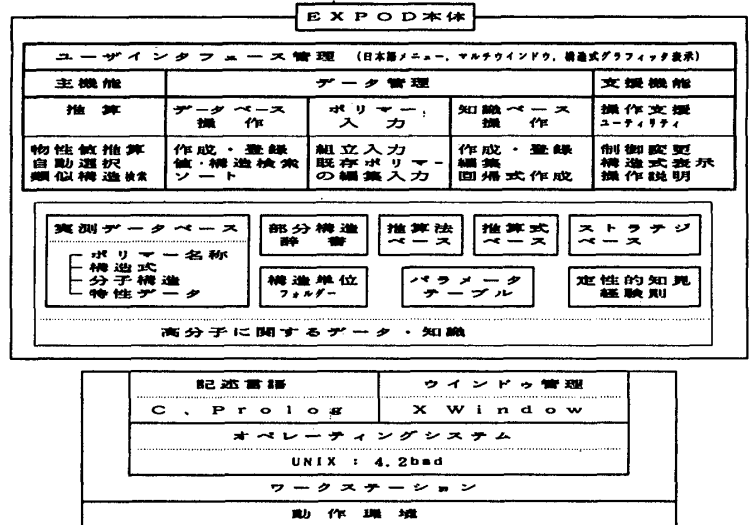


図2 EXPODのシステム構成

更に、ポリマーは、構造上の特徴から現在21種類のポリマー系に分類されているが、ポリマーデータベースに登録する際に、構造式から、このポリマー系分類を自動的に行う機能がある。

(3) データベース操作機能

ポリマーデータベースはポリマーの構造情報、特性情報を蓄積・管理する。ポリマーデータベースに対する機能として、(2)で述べた構造情報の入力に加えて、

- ・ データの追加、削除、編集機能
- ・ ポリマーを選択する検索(数値・構造)機能

の2種類がある。

(4) 知識ベース操作機能

EXPODでは推算に関する知識(推算法の使い分け方、推算法自身)や定性的知見等の各種知識は追加、変更が行えるよう、知識ベースに格納されている。知識ベース操作機能には、ユーザーが新たに推算法を作成できる機能や、編集機能、削除機能等がある。

図2に、EXPODのシステム構成を示す。全体構成として、5つの機能モジュール群と8つのデータ・知識群とから成り立つ。

5. おわりに

専門家の知識が不可欠なエキスパート・システムの実用化は、一朝一夕では完遂せず、事前の十分な検討・試行と高分子の専門家の広汎な協力が不可欠である。実際、本システムにおいてご協力を仰いでいる、昭和電工株式会社、住友化学工業株式会社、東レ株式会社、三菱化成株式会社関係各位の皆様へ深く感謝いたします。