

高分子材料設計支援システム「EXP OD」

6K-8

— 知識管理機能と実現形式 —

飯沼 聡 山内 正 長阪匡介 矢田 哲士 吉光 宏

㈱ 三菱総合研究所

1. はじめに

高分子材料設計支援システム (EXP OD) [1] においては、研究者が物性を推算するといった、問題対象に関する知識を蓄積利用しやすい環境の実現を目指しており、知識の管理およびその実行が重要な位置を占める。とりわけ、高分子材料設計においては、用いられる知識が数式中心であり、一般的な知識ベースシステムと異なり、その管理および実行には独自のアプローチが必要となる。本稿ではEXP ODにおける知識ベースの記述方法および実現方式について報告する。

2. 知識ベースの構成

EXP ODにおける物性の推算は、原子団寄与法と呼ばれる高分子の部分構造に着目した推算方法を採用している。原子団寄与法とは、高分子の特性値をその部分構造に対する特性値の積算としてとらえ、部分構造ごとに特性値 (パラメータ) を用意しておく方法である。

EXP ODでは、推算の具体的な手順およびこれらのパラメータを知識として表現し、知識を実行することで目的とする推算値を得ている。図1にその概要を示す。

高分子材料設計における物性の推算に関する知識は、ファンデルワールス体積の計算のように普遍的なものとして共通に利用できる知識と、経験的に求められた補正項の様に、対象とする材料の種類や推算する特性によって異なりかつ頻繁に変更が行われる知識とがある。この

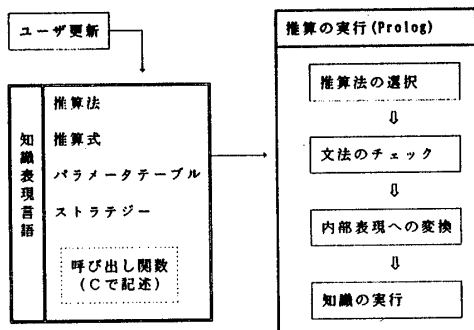


図1 EXP ODの知識管理機能の概要

ような観点からEXP ODでは以下の4つの知識ベースを構築することとした。

① 推算式ベース

推算を行うための式が格納される知識ベースであり、各推算法固有に用いられるものと、分子の体積などのように一般的に用いられるものがある。この推算式と後述のパラメータとの組み合わせで、1つの推算法が形成される。項目としては、推算式の名称、および具体的な推算式の記述 (数式) である。

② 推算法ベース

推算法を集めた知識ベースである。項目としては、推算法の名称、対象物性および具体的な推算法の記述 (数式) である。

③ パラメータテーブル

パラメータテーブルは、推算法・推算式の中で参照される構造上の特徴 (原子団) とそれに対応する数量・データの集まりである。原子団ごとに付与されるべき値を整理した表形式となる。

④ ストラテジーベース

推算法又は推算式、パラメータテーブル等、一つ一つの知識ベースの適用を制御する知識ベースである。

ユーザは知識 (推算方法) の実行に先立ち、どの推算方法を実行するかを選択する。直接選択する以外に、システムが自動的に選択する機能があり、そのために利用されるのがストラテジーである。このストラテジーは単純な IF THEN 形式で記述される。

```
target: rho
unit: "g/cm3"
m: mol_weight
v: rho1_v
main:
  v1 = v;
  if ( v1 == 0.0 ) (
    abort(-1);
  )
  rho = m/v1;
end;
```

図2 知識表現言語による記述例

An Expert System for Polymer Design - knowledge management and implementation -

Satoshi IINUMA Tadashi YAMANOUCI Kyosuke NAGASAKA Tetsushi YADA

Hiroshi YOSHIMITU MITSUBISHI RESEARCH INSTITUTE

以上4つの知識ベースに加えて、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ている。

3. 知識表現言語

EXPOD利用者が追加・変更可能な知識の集まりとしての知識ベースは、EXPOD固有の知識表現言語を用いて記述される。図2にその記述例を示す。

この知識表現言語を用いることで利用者は知識の変更、追加を行うことができる。

基本的には2. で述べた構成要素のみで全ての知識を記述する。しかし、推算方法によっては原子団寄与法のレベルにより、隣接原子間の相互作用といったマイクロなレベルに着目したり、複数の原子団にまたがったマクロ的な構造の特徴から推算をとらえる場合など原子団寄与法を直接適用できない場合がある。こうした例外的な場合においては、例外規則をC言語のプログラム(固有の関数)の形式で記述し、知識表現言語で扱える関数として登録する方法を採用している(図1参照)。

4. 実現方式

EXPODの推算実行ではまず以下の様な文法チェックが行われる。

- ・ 構文解析(シンタックスのチェック)
- ・ 意味解析(値の決定性等のチェック)
- ・ 呼出し関係のループチェック

内部表現変換では、知識表現言語から内部表現(Prolog)に変換される。

知識の実行では、Prologの述語として表現された知識を逐次実行し、目的とする推算値を得る。

EXPODのシステム記述言語としてC言語とPrologを採用している。両者の特質をいかし、全体制御、ユーザインタフェース、化学構造の内部表現に対する処理など、高速性(即時応答性)が要求されるものに対してはCで記述し、知識の実行など、宣言的記述に対する処理はPrologで記述した。

5. 今後の課題

高分子研究者の知見を計算機に蓄積・管理し、開発担当者の発想を支援する広範な情報を即座に提供する等の視点から、今後の課題と考えられる項目を示す。

- ・ 各種の物性についての要求値を満足する候補ポリマー探索機能の実現
- ・ 新しいモデル・理論に対する拡張容易性の確保
- ・ 知識ベースとしての十分な操作機能の実現

(参考文献)

- [1] 高分子材料設計支援システム「EXPOD」
基本概念とシステム構成
和田他 情報処理学会全国大会 1990年9月
- [2] 高分子材料設計支援システム「EXPOD」
山内他 PROLOG産業応用シンポジウム論文集 1989

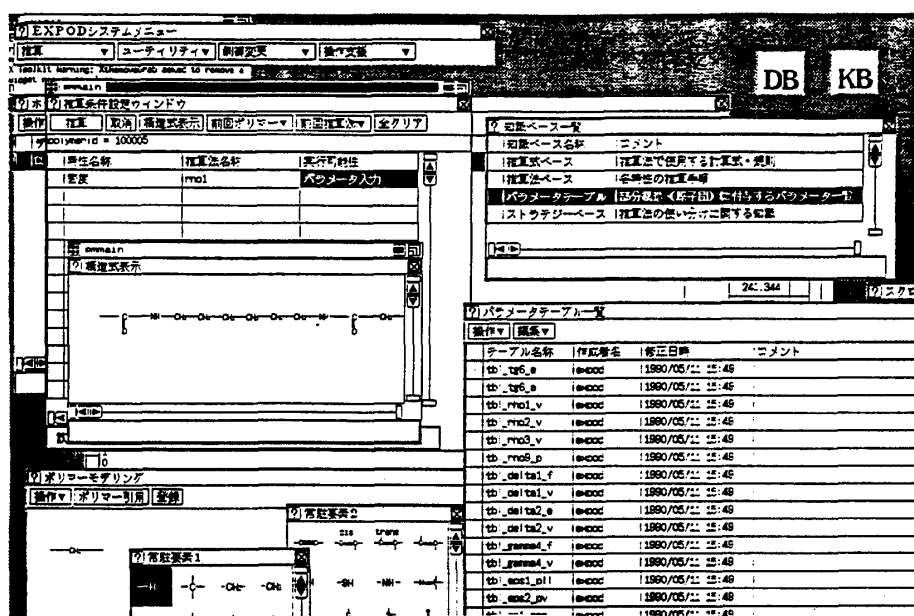


図3 EXPODの実行画面