

オブジェクト指向エキスパートシステムによる
ポリマーブレンドの解析

2H-1

波多野保夫*1 高橋正明*1 大野淳一*1 松本俊二*2

*1横浜ゴム *2富士通

1. はじめに

一般に、ゴム製品は、物性値のバランスを保つために数種類のポリマーをブレンドして配合されている。このため与えられたゴムのポリマー組成比を推定すること(ポリマーブレンドの解析)は重要な基礎技術のひとつとなっている。当業務は、分析技術者が各種分析技術を応用することで実施されてきた。しかし、この業務知識は、各技術者の経験を通して蓄積されてきたものであるため、その標準化と共有が必要とされている。

2. 問題の特性とその解法

2.1 問題の特性

ポリマーブレンド解析業務は、いわゆる組合せ問題として捉えることができる¹⁾。すなわち、測定されたマイクロ構造値を満たすポリマーの組合せを生成し、ある評価基準に基づいて適切と思われるものを採用することで組成比を推定する。

2.2 問題の解法

組合せ問題に関しては、過去多くの研究がなされ、応用事例も報告されている²⁾。本研究では、生成検査型の推論制御を中心とする知識ベースシステムとニューラルネットワーク(以下NN)によるポリマー構造変化の補正を組み合わせた構成によりシステム化した。

3. システムの概要

構築ツールとして、KwESHELL^{3) 4)}およびNEUROSIM/L(いずれもSunワークステーション上で動作する富士通提供のツール)を用いた。

3.1 タスク構造とデータ構造

KwESHELLは、ナレッジウェアおよび知識ベースの部品ライブラリを装備している。各部品はオブジェクト指向言語(CLOS: CommonLisp Object System)のクラスとして提供されており、利用者は適切なクラスを選択してそのインスタンスに必要最少限の情報を定義することでアプリケーションを構築する。ナレッジウェアは、役割に応じて表-1のように分類されている。

表-1 ナレッジウェアの構成

制御 K S ^{*3}	本システムを中心とする生成検査法などの推論制御用知識を表現する 組成案の内容を決定したり、組成案と測定対象を類似比較したりする知識を表現する K Sからアクセスされるデータに特定の属性や機能を付加する
操作 K S	
データ	

*3 K S (Knowledge Source)

KwESHELLの部品を適用することを念頭において、タスク構造とデータ構造という観点から業務を分析した結果、6つのタスクと4つのデータ構造が切り出された。これらは、表-2のような対応関係でKwESHELLの部品に置き換えられた。ただし、現版ではNEUROSIM/Lとのインタフェースがないため、これを実現する部品(クラスおよびメソッド)を追加した。

NNは、加硫によるポリマーマイクロ構造変化を補正する部分に用いた。ポリマーDBには、現在未加硫状態で測定された数10種のデータが蓄積されている。解析は主に加硫状態のサンプルに対し行われる。一方、ポリマーのマイクロ構造は、加硫反応に伴い変化することが知られている⁵⁾。この変化は加硫温度、加硫時間、ゴム中の諸配合剤の種類や量に依存する。したがって、この部分の処理をルールで表現することは困難である。実際、3層の階層型NNを用い、加硫による変化が既知のデータを教師データとして、バックプロパゲーションによる学習をした。

図-1にタスク構造とデータ構造の概要を示す。

表-2 タスクと適用部品の対応

抽出したタスク	適用部品
<ul style="list-style-type: none"> ポリマー候補生成 ポリマー組み合わせ案生成 ポリマー組み合わせ案検査 案と測定対象の比較 最終案の解釈 ポリマー構造変化補正 	<ul style="list-style-type: none"> 生成 K S 生成 K S 検査 K S 比較 K S 解釈 K S なし

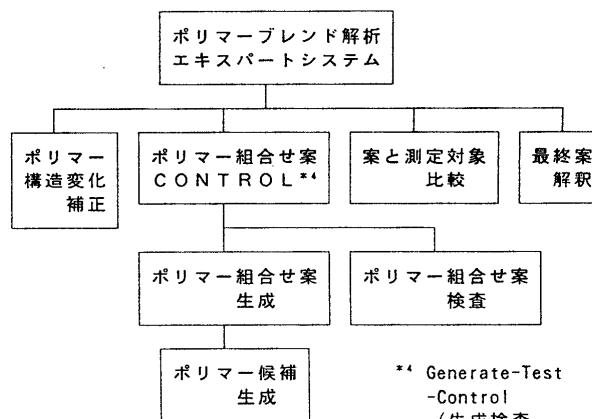


図-1a タスク構造

*4 Generate-Test-Control (生成検査制御 K S)

Analysis of Blended Polymer using an Object Oriented Expert System

Yasuo Hatano Masaaki Takahashi Jun-ichi Ohno Shunji Matsumoto
*1 THE YOKOHAMA RUBBER *2 FUJITSU LTD.
CO. LTD.

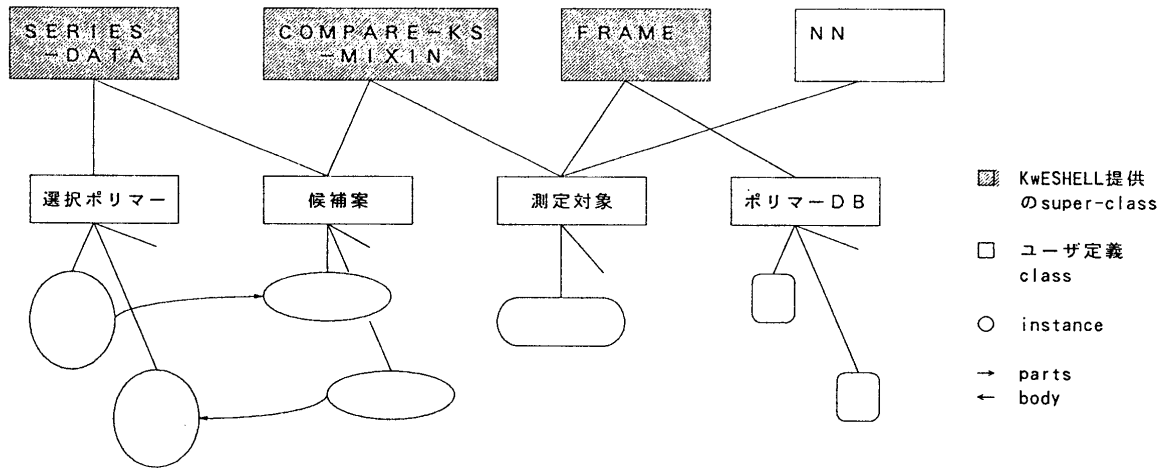


図-1b データ構造

表-3 実行例

3.2 動作概要

以下に、システムの動作手順を示す。

- ① [ポリマーブレンド解析エキスパートシステム] を起動することにより、システムが実行される。
- ② [ポリマー構造変化補正] KS が起動され、[測定対象] クラスのインスタンスに対し NN による補正を行う。結果をインスタンスのスロット値として設定する。
- ③ [ポリマー組み合わせ案コントロール] KS が起動され、[候補案] クラスのインスタンスを生成し、生成検査制御を開始する。
- ④ [ポリマー組み合わせ案生成] KS が起動され、その繰り返しリストとして、ポリマーの候補が必要になる。ここで、[ポリマー候補生成] KS が起動される。実際、[ポリマーDB] クラスのインスタンスからポリマーを選択し、ポリマーのあるマイクロ構造値に注目し解析対象のマイクロ構造値と比較する。(I) 式を満足したとき、ブレンド可能なポリマーの候補として [選択ポリマー] クラスのインスタンスを生成する。ここで、 a_i はポリマー i のあるマイクロ構造値、 A は解析対象のあるマイクロ構造値とする。

$$a_i < A < a_j \text{ or } a_j < A < a_i \quad \dots (I)$$

- ⑤ ④で生成したインスタンスから、[候補案] クラスのインスタンスを生成し、他の構造値を計算し、インスタンスのスロット値として設定する。
- ⑥ [案と測定対象の比較] KS を起動し、[候補案] クラスのインスタンスと [測定対象] クラスのインスタンスを比較する。そして各候補案をメンバーシップ関数を用い評価点を与え、評価点順に結果を出力する。

3.3 実行例

SBRのブレンド系に適用した実行例を表-3に示す。ポリマー構造の測定は、赤外分光光度計を用いて行った。吸収ピークの同定は、Morero⁶⁾らの方法による。

試供ポリマーの マイクロ構造 測定値:	トランス	シス	ビニル	スチレン
	50%	36%	14%	16%

解析結果:

解候補案1

A ポリマー	90.2%
B ポリマー	9.8%
相対評価点	100

解候補案2

C ポリマー	51.3%
D ポリマー	48.7%
相対評価点	72

4. 結論

本研究では、従来分析技術者の経験に委ねられてきたポリマーブレンド解析技術を、エキスパートシステム化した。構築に際し、KwESHELLが提供するオブジェクト指向に基づくソフトウェア再利用の枠組みを利用した。これにより、システム設計を見通し良く行うことができた。不足していた NN の機能も、差分プログラミングによって比較的容易に追加することができた。

知識ベースシステムと NN の連携により、柔軟なシステム構築が可能となった。

今後、このような形態のアプリケーションが増えていくことが予想される。また、我々の部門では類似業務をいくつか抱えており、本システムを抽象化してユーザ固有のナレッジウェアとして蓄積/再利用して行きたい。

<参考文献>

- 1) 知識獲得手法、富士通ラージシステム研究会、平成元年度研究活動報告書(第3分冊)、1991.6
- 2) 佐藤智昭、杉本吉朗: 配送計画エキスパートシステム、第6回人工知能学会全国大会、pp.481-484(1992)
- 3) 藤堂清、松本俊二、佐藤智昭: 開発方法論に基づく知識システムの部品化/再利用環境、人工知能学会誌、Vol.15, No.2(1990)
- 4) 日経AI別冊 1990春号 特集 pp.32-42
- 5) W. A. Bishop; J. Polymer Sci., 55, 827(1961)
- 6) D. Morero, A. Santambrogio, L. Porri, F. Ciampelli: Chem. Ind. (Milano), 41, 758(1958)