

リレー解説

エキスパートシステムの諸事例—X



化学分析システムへの応用

—電子線マイクロアナライザによる元素同定システム—†

長谷川 聡††

1. はじめに

世界初のエキスパートシステムは、Stanford 大学 HPP (Heuristic Programming Project) によって 1965 年から研究が開始された DENDRAL であった。DENDRAL は、質量分析装置によって測定された質量スペクトルから化学者の知識を使って有機化合物の分子構造を同定するシステムである。DENDRAL 以降も化学分析の分野では、質量スペクトル (MS)・核磁気共鳴スペクトル (NMR)・赤外線吸収スペクトル (IR)・紫外線吸収スペクトル (UV) などの分析機器によるスペクトルデータの解釈が知識工学の研究対象となってきた。

ここでは、化学分析データの解釈を行うエキスパートシステムの事例として、電子線マイクロアナライザ (EPMA)*によるデータから未知試料中に含まれる元素を同定するシステム「EPMA 定性分析エキスパートシステム」^{1),2)}を紹介する。

紹介するシステムは、扱う知識としては、必ずしも化学的に深い知識を表現したものではないが、分析技術者が実際に分析データを読みとる際のノウハウを用いた知識ベースシステムを、従来型のデータ処理システムに組み込んで、従来 83~100% であった定性精度を 92~100%、平均 98.8% まで高め、1988 年に、約 6 カ月という短い開発期間で実用化に至ったものである。

本解説では、まず EPMA による定性分析の概

要を説明した後、エキスパートシステム開発にあたって採用した知識、推論方式、実際にデータ判定を行った例、従来型のシステムとの比較、を中心に紹介する。

2. EPMA による定性分析

電子線マイクロアナライザ (Electron Probe Micro Analyzer: EPMA) は、電子線を試料表面に照射して、微小領域の元素分析を非破壊で行う装置である。定性分析は、電子線で励起された試料から放出される特性 X 線を検出することによって試料中に含まれる元素の種類を同定するもので、EPMA による分析の基本となるものである。

EPMA には、定性分析のほかには表面観察・定量分析・状態分析などの機能があり、天然鉱物・金属・セメント・ガラス・塗料・プラスチック・ゴム・生体材料・半導体材料・集積回路・電気部品などさまざまな試料を対象に、研究用のみならず、材料の検査や品質管理・資源調査・環境保全・エネルギー開発など幅広い分野で応用されている。

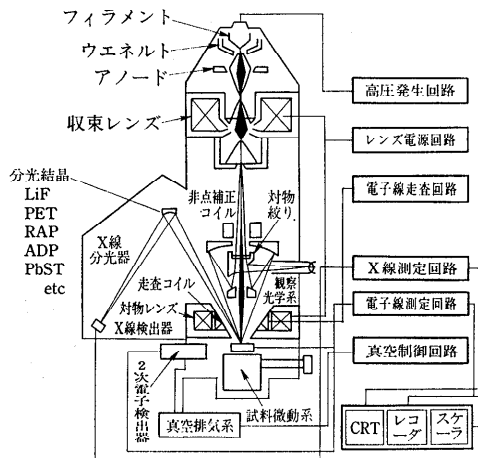


図-1 EPMA の構成例出典³⁾

† Various Cases of Expert Systems—X An Application to Chemical Analysis System—An Automated Interpretation for EPMA (electron probe micro analyzer) Qualitative Data~ by Satoshi HASEGAWA (Tokyo Research Laboratory, SHIMADZU CORPORATION).

†† (株)島津製作所東京研究所

* EPMA は 1949 年フランスの Castaing によって実現された。本稿で紹介するシステムは、1986 年島津製作所製 EPMA—8705 形を対象としたものである。なお、EPMA による分析は純物理現象を用いたもので、厳密には化学分析というより物理分析である。

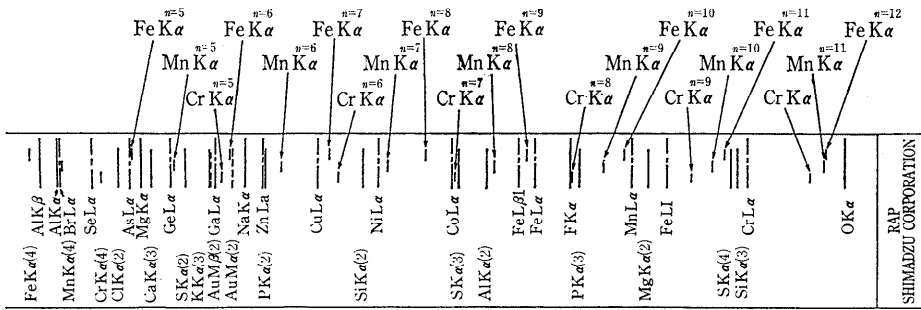


図-3 データ判定用定規

図-1に波長分散型 EPMA の構成例を示す。

波長分散型 EPMA による定性分析（元素同定）は、X線分光器の波長スキャンによって得られる波長プロファイル（図-2）をもとに行われる。X線分光器の分光結晶には、LiF, PET, RAP, ADP, PbST などが使われ、それぞれ分光波長範囲や分解能が異なる。定性分析には、必要に応じて複数のX線分光器が同時に使用される。

また、波長プロファイルのピークの波長（横軸）は試料中の原子で電子が遷移する際の軌道間のエネルギー単位の差に、ピークの強度（縦軸）は電子の遷移確率に相当するもので、たとえ試料が純物質であっても複数のピークを示し、これらのピーク波長の整数倍の波長位置にも高次線が出現する。

一般的な試料は化合物や混合物であり、波長プロファイルは含有元素のピークが重なり合って複雑なピークを示す。未知試料の元素同定を行うには、これらのピークの元素名と、特性X線の線名を特定する作業が必要である。

分析の専門家による実際のデータ判定は、概略次のように行われる。

図-2は LiF, PET, RAP の3種類の分光結晶で同時に測定されたデータを示している。専門家は複数の分光結晶で分光したデータを総合的に把握し、各結晶で分光し得る元素の中からピークの波長・半幅幅・形状・ピーク間の強度比などをもとに各ピークに、該当する元素名と線名を付けてゆく、通常は、短波長側の結晶のデータから順に、まず最も強度が大であるピークに目を付け、図-3のようなスケールを使って元素名・線名の照合を行う。その際、たとえば、LiF のデータ中に鉄 (Fe) の Kα 線らしいピークがあれば、一定の強度比で短波長側に Kβ 線のピークがあり、

PET や RAP に高次線が結晶ごとに等間隔で出現していることを確かめる。検出されるべきピークの、波長と強度比* および出現し得る高次線のリストは、元素ごとに表-1のような“波長表”にまとめられている。波長表は、LiF, PET, RAP, ADP, PbST の5結晶分を合わせると A4判の用紙で約120ページにおよぶ（表-1は約1ページ分）。専門家は、図-3のスケールより詳しいピーク情報が必要な場合や、高次線のピークに名前を付けるときに、波長表を参照する。ただし、ピークの強度が弱いときには高次線の一部は検出されないこともある。また、各結晶データの長波長側では Kα 線が Kα₁ と Kα₂ に分かれる場合があり、Fe のように K線が LiF に現れる元素では RAP に L線が現れることもある。

また、Fe のように K線系列が大きく検出される場合に比べ、L線系列が強く現れる元素ではピークも多様になり判定法も複雑になる。M線系列が強く出るような元素の場合はさらに複雑になる。

このように専門家によるデータの判定法は元素の種類によって異なるが、これらの元素がさまざまな割合で含まれる化合物試料にあっては、さらに、①複数のピークが重なる場合（図-4）、②大きなピークに妨害されて出現しているはずのピークが検出されない場合（図-5）、が頻繁に発生する。①の場合は波長だけで照合すると一つのピークに複数の線が該当するので、これらのうち本当に存在する複数または単数の元素線を選別しなければならない。選別法は元素ごとに異なるが、基本的には、ピークの半幅幅**や形状から判断した

* 強度比とは、ピークどうしの強度の比で、波長表ではメイン線の強度を1000としてメイン線に対する強度比を整数値で表している。

** 半幅幅（半幅幅）とは、ピーク強度の1/2の高さにおけるスペクトル幅をいう。

表-1 波長表

元素名	分光結晶名	24Cr																																						
		線名	波長(Å)	強度比									RAP																											
24Cr	LiF	Kα	2.2909	1000	sKa3,4	2.2782	7	Kβ1	2.0948	182	Kβ5	2.0706	5	Kα2(3)	6.8808	67	Kα1(3)	6.8691	90	Kβ1(3)	6.2544	7	Kα(2)	4.5818	1000	Kβ1(2)	4.1696	167	Lγ	24.30	19	Kα(10)	22.909	560	Lα	21.64	1000	Lβ1	21.27	20
		Kβ(10)	20.848	29	Kα(9)	20.618	540	Kβ(9)	18.763	97	Kα(8)	18.327	272	Kβ(8)	16.678	15	Kα(7)	16.036	126	Kβ(7)	14.594	1	Kα(6)	13.745	350	Kβ(6)	12.509	87	Kα(5)	11.455	23.164	Kβ(5)	10.424	22.921	Kα(4)	9.164	22.29	Kβ(4)	21.030	21.614
		Lα	19.45	19.11	Kα(9)	18.927	3	Kβ(9)	17.191	2	Kα(8)	17.191	2	RAP : PET : LiF Lα : Kα(2) : Kα = 0.030 : 0.061 : 1																										
25Mn	LiF	Kα	2.1030	1000	Kβ1	1.9101	178	Kβ2	1.8970	3	Kβ(4)	7.6404	2	Kα(3)	6.3090	108	Kβ(3)	5.7303	55	Kβ(7)	13.371	1	Kα(6)	12.618	138	Kβ(6)	11.461	1	Kα(5)	10.515	227	Kβ(5)	9.551	1	Kα(4)	8.412	167			
		Lα	19.45	19.11	Kα(9)	18.927	3	Kβ(9)	17.191	2	Kα(8)	17.191	2	RAP : PET : LiF Lα : Kα(2) : Kα = 0.030 : 0.061 : 1																										
		Lβ1	19.45	19.11	Kα(9)	18.927	3	Kβ(9)	17.191	2	Kα(8)	17.191	2	RAP : PET : LiF Lα : Kα(2) : Kα = 0.030 : 0.061 : 1																										
26Fe	LiF	Kβ(2)	3.5130	8	Kα	1.9373	1000	Kβ1	1.7565	178	Kβ3	1.7440	3	Kα2(4)	7.7600	32	Kα1(4)	7.7440	54	Kα(3)	5.8114	3	Kβ1(3)	5.2695	15.65	Kα(2)	3.8746	15.809	Kβ1(2)	3.5130	15.498	Kα	3.5130	14.052	Kβ(8)	14.052	11	Kα(7)	13.561	17
		Kα(11)	21.310	20	Kβ1(12)	21.078	3	L1	20.186	165	Lγ	20.186	3	Lα	1019	6	Kβ(5)	9.6865	83	Kα(4)	8.7825	14	Kα(4)	7.7492	66	RAP : PET : LiF Lα : Kα(2) : Kα = 0.059 : 0.052 : 1														
		Lα	19.45	19.11	Kα(9)	18.927	3	Kβ(9)	17.191	2	Kα(8)	17.191	2	RAP : PET : LiF Lα : Kα(2) : Kα = 0.059 : 0.052 : 1																										

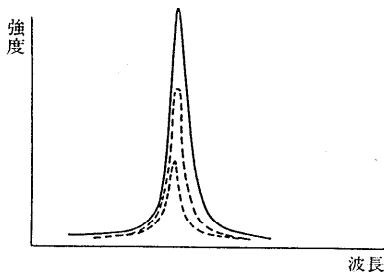


図-4 ピークの重なり

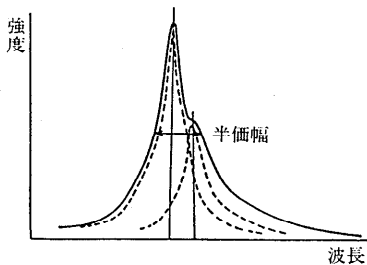


図-5 ピークの妨害

り、他に出現するはずのピークや他の分光結晶でのピークを参照して判断する。ただし、判断に用いるべきピークも他の元素のピークと重なっていたり、他の元素のピークに妨害されている場合も多く、どの元素から順に判定できるかは、検出されたピークデータの状態に依存する。また、②の場合もピークが出ているのかいないのか判定でき

ないので、まずピークの形状や半幅から妨害されている可能性があるかどうかを見極めよう。その元素についての判定は他のピークを見て判断する。

また、化合物によっては元素間の相互作用により特定の元素のピークが理論波長からずれることがある(ケミカルシフト)など、他にも判定精度の向上を妨げる要因は多い。それでも、専門家は、状況に応じて臨機応変な判断法を考えて正しい判定を下すことができる。

こうした EPMA の定性分析に対し、従来から自動データ判定システムが開発されているが、単なるピークのマッチングでは高精度の判定は不可能であり、試料に含まれる元素の種類が多い複雑なデータや、それまでとは組成が異なる新素材の分析データにも対処しようとする、従来の手続き型プログラミングでは例外処理が多くなりすぎて開発や保守が困難となる。

3. EPMA 定性分析エキスパートシステム

3.1 システムの概要

本エキスパートシステムの開発は、次のような目的と設計思想のもとに行われた。

- データ処理など、従来型のアルゴリズムで解決するほうが効率的な部分は、無理に知識ベース

を使わずプログラムで作成する。

- 知識ベースシステムが有効な部分を見極め、専門家の手法をできるだけ忠実に再現する。
- 知識ベースシステムと従来手法による処理とを融合して自動判定の精度を高める。
- 知識の追加・修正が容易になるようにする。
- 実用のシステムを目指す。

以上のような姿勢のもとに、従来の EPMA 自動定性システムのハードウェア構成 (図-6) のうえで、自動定性判定のソフトウェア部分のエキスパートシステム化を図った。ソフトウェアの部分は、図-7 に示すように、定性データを納めたピークデータファイルや、前掲表-1 の波長表をデータベース化したもの (以下、単に波長表と記す)、および、定性判定結果の表示やプリントアウトなどのインタフェースプログラムに、推論機構と、プロダクションルールを納めた知識ベース、各種データ処理プログラムなどを結合し、全体として、データの読み込みから推論の実行、結果の出力までの一連の機能をもったシステムを実現した。

なお、知識ベースシステム部分の開発には、システムへの組み込みとデータ処理プログラムとの結合の必要性から、知識ベースシステム構築用の C 言語ライブラリ源蔵 I^{4),5)}を用いた。

図-7 に示すように、EPMA によって採取されたピークデータは、ピークデータファイルを介してエキスパートシステムに渡される。

推論は、源蔵 I の推論機構が知識ベースを読み込んで実行し、必要に応じて推論中にピークデータファイルや波長表が参照される。

3.2 獲得した知識

専門家が定性判定に用いる基本知識をインタビューなどによって獲得した段階で、判定に際して

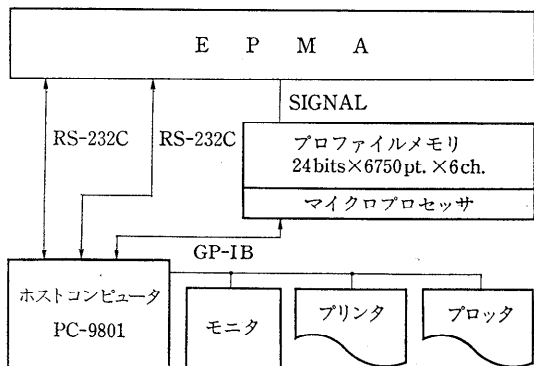


図-6 EPMA 定性システムのハードウェア構成

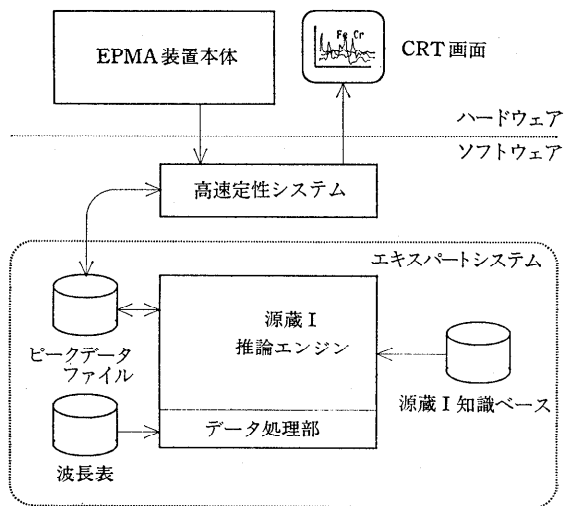


図-7 エキスパートシステムの構成

は元素ごとに判定基準が異なる部分があること、実際の判定手順はデータの状況によって変わること、などから、①元素ごとに異なる判断知識を「判断に関する知識」、②検出ピークの状況ごとに異なる判定法を「手順に関する知識」、と呼んで区別して整理することにした。

①の例としてチタン (Ti) に関する知識の一部を表-2 にあげる。表-2に示すように、判断に関する知識は、分光結晶ごとにも異なる。また、どの結晶によるデータを優先して判断するのも各元素によって異なるものであり、判断基準として重要である。①のように元素ごとに異なる判定知識については、はじめから全ての場合を網羅するのは困難であり、エキスパートシステム化してから追加・修正していくべき知識である。それに比べて、②の判定手順に関する知識は、ある程度アル

表-2 判断に関する知識の例

分光結晶	元素	元素の存在を判定するための知識
LiF	Ti	<ul style="list-style-type: none"> ● LiF で分光されたデータでは、Ti の $K\alpha$ に該当する波長のピークがあれば Ti が存在すると思われる。 ● 上記のピークが他のピークで妨害されている可能性がある場合は $K\beta$ を判断基準にする。 ● ただし、PET での測定が行われている場合は、PET での判断を優先し、PET での存在が否定されるならば、LiF でそれらしいピークがあっても Ti は存在しないと判断する。
≈	≈	⋮
	V	

表-3 手順に関する知識の例

状況	判断手順
判定開始	<ul style="list-style-type: none"> ●基本的に短波長側の結晶データから順に結晶ごとに判定する。 ●1結晶のデータは、ピークの強度が強いものを優先して判定する。 ●その他のピークは短波長側から順に見ていく。
ピークが重なっている場合	<ul style="list-style-type: none"> ●ピークが重なっている場合は、まず考えられる線名をあげ、存在が確実な元素から順に特定していく。 ●確定した線のピーク強度を、判断基準となったピークとの比から計算し、データピークから差し引いた残りがまだピークであるとみなされる場合は、他の元素線が重なっていると判断する。 ●重なっている線の名前を全て特定したら、残りの小さな線は存在しないと判断する。

ゴリズミックに整理可能な範囲であり、エキスパートシステムの構成を考えるうえであらかじめ考慮が必要な知識である。表-3 に手順に関する知識の例をあげる。

3.3 知識表現と推論方式

整理した知識を、プロダクションルールで表現した。

知識は、元素の種類ごとにルール化し、知識ベースは、分光結晶ごとに、それぞれ「判断に関する知識」を納めた知識ベースと、「手順に関する知識」を納めた知識ベースにモジュール分けされている。推論方式としては、「判断に関する知識」は、宣言的な知識であるので、後ろ向き推論を採用し、手続き的な処理を含む「手順に関する知識」には前向き推論を用いた。実行時には、まずピークに該当する線名の候補をあげて次に本当に元素が存在するかどうか判断するなど、判断の各段階ごとに推論が行われる。

図-8 にエキスパートシステムの知識ベースおよびデータ処理部のモジュール構成とデータの流れを示す。

ピークデータや波長表のデータの

読み込み、推論結果の書き込み、推論過程における全元素に共通なデータ処理、などは、C言語を使って作成されたプログラムで行われる。これらのプログラムは、知識ベースのルール中にC言語の関数として記述されているか、または、源蔵I推論エンジンのインタフェース部に組み込まれており、推論実行中に必要に応じて呼び出される。

なお、手続き型のプログラミングで作成したデータ処理プログラムの部分にも、単純なデータ処理だけでなく、専門家の手法が反映されているが、専門家の知識や処理手順のうち、システム完成後の知識の保守・管理の際に追加・修正が必要となる部分は知識ベースに登録し、システム実行時の処理効率を考慮して元素の種類やピークデータの状態によらない共通の処理はプログラムで実行するように考えた。

また、推論のはじめに、LiF, PET, RAP, ADP, PbST の5つの結晶のうちどの結晶の測定がなされたかを判断して、自動的に、測定され

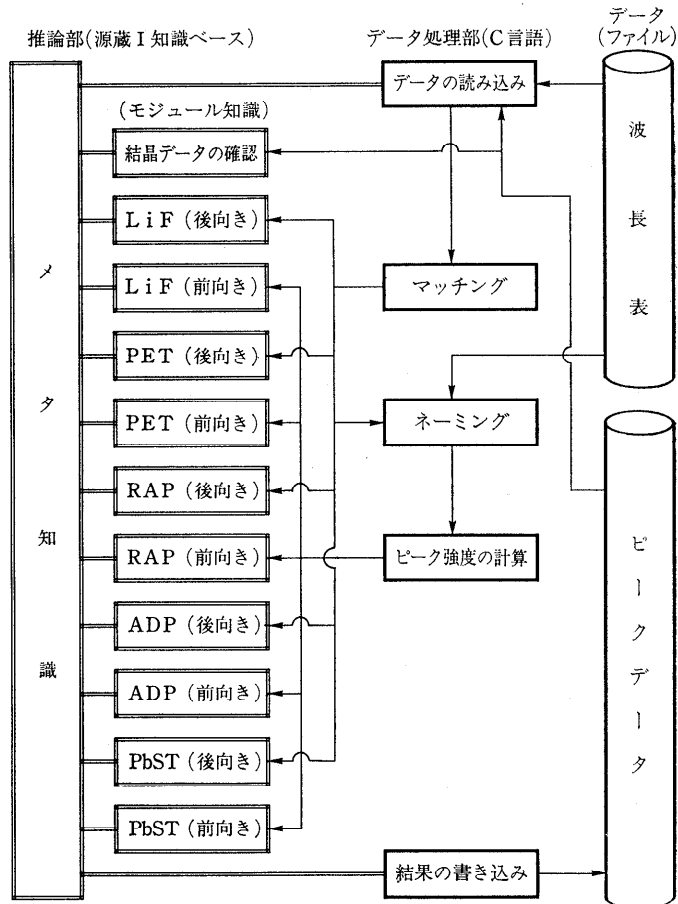


図-8 モジュール構成とデータの流れ

た全ての結晶のデータを使って推論を行うようになっており、仮に一つの結晶の測定しか行われていなくても、精度は落ちるが推論は行われる。

こうした一連の推論の流れはメタ知識によって制御され、基本的には図-8の上から下の順に推論が行われる。

知識は合計11の知識ベースに、合計734ルール(開発完了時)で記述されている。

次に実際のルールの例を後向き推論部と前向き推論部からピックアップして説明する。

(1) 後ろ向き推論

図-9に、後ろ向き推論用知識ベースで記述されているルールの例をあげる。ルールは、元素ごとに、各元素につき1ルール以上記述されている。

図-9の例は結晶LiFにおける分光元素チタンの判定ルールである。ルール中の変数Ti.pet_mainはチタンのPETでのメイン線を、Ti.lif_subはLiFでのサブ線を表す。ここで、メイン線とは、ある元素について、一つの分光結晶で分光され得る全てのピークのうちでその元素を特定するのに最も適したピークのこと、これは通常、最も強度が大きいピークまたは最もはっきりと検出されるピークである。サブ線とはそれに準ずるピークをいう。たとえばチタン(Ti)のLiFにおけるメイン線は $K\alpha$ でありサブ線は $K\beta_1$ である(表-2参照)。

また、これらの変数の値は源蔵Iのプログラムインタフェース機能によって推論中に必要に応じて自動的に設定されるもので、次のような意味をもつ。

- 測定外…測定されていないか測定波長範囲外
- 妨害…ピークが妨害されている可能性あり
- ある…ピークデータが検出されている
- ない…ピークデータが検出されていない

図-9の例は、表-2の知識をルール化したもので、「LiFでのチタンについて、PETでのメイン線の状態を調べてから、LiFでメイン線があるか

```

Ti.lif :
IF
    Ti.pet_main !=ない
AND { Ti.lif_main=ある
    OR { Ti.lif_sub=ある
        AND { Ti.lif_main=妨害
            OR Ti.lif_main=測定外 } } }
THEN
    Ti.lif_存在=候補 (CF=0.6);
  
```

図-9 後向き推論用ルールの例

またはメインが妨害されているときにはサブ線があることによって元素の存在を候補としてあげる」という判断を表している。

他の元素のルールも図-9のようなルールを基本としているが、判断基準は元素ごとに異なり、元素によっては複数の結晶のピークを参照したりピークの半価幅を条件に追加している。

エキスパートシステムは後向き推論によって元素の存在可能性を判定する。

(2) 前向き推論

前向きに推論される知識のルールの一つを図-10にあげる。ルールは、後ろ向き推論と同様に元素ごとに記述されている。図-10の例は結晶LiFのデータのチタンのルールであり、「チタンが候補にあがっている場合にさらにメイン線があればメイン、サブ線があればサブのピークの強度を考慮してその存在を確定する」という手順に関する知識を表している。

main_intensity()とsub_intensity()はC言語の関数で、それぞれメイン線とサブ線の強度を波長表の強度比から計算し、一定の基準によってOKまたはNOという値を返す。関数の値がOKとなるのは、一つのピークに対して、候補が単独である場合、他の候補の強度が全て確定しその強度の合計をピークデータから差し引いた残りがデータの統計誤差を考慮してもなおピークとみなされる場合、の二つの場合であり、NOとなるのは、はじめからピークが存在しない場合、まだ他の候補の強度が確定できない場合、他の候補の強度が全て確定しその合計をピークデータから引いた残りがピークとみなされない場合、の3通りである。

図-10のルールは、表-3の知識を反映したもので、各結晶の各元素について同様のルールが記述されている。これらのルールによって源蔵Iの前向き推論を行えば、ある元素のメイン線・サブ線に他元素のピークが候補として重なっている場合

```

Ti.lif :
IF
    Ti.lif_存在=候補
AND { { Ti.lif_main=ある
        AND main_intensity(Ti,LiF)=OK }
    OR { Ti.lif_sub=ある
        AND sub_intensity(Ti,LiF)=OK } }
THEN
    Ti.lif_存在=確定;
  
```

図-10 前向き推論用ルールの例

には、候補元素のうちの確定できるものから順に推論を進め、その結果を待って推論を続けるという手順で元素の存在が確定される。

4. 実行例と評価

推論終了時には、高次線を含む全てのピークに元素名と線名が付けられ、試料中に存在する元素名が判明している。存在すると判定された元素は、1から3のクラスに分類される。これは次のような意味をもち、クラス1, 2, 3の順に確定度が高い。

- CLASS 1...存在を確定したピークがバックグラウンド強度と比較して十分に強い場合
- CLASS 2...存在を確定したピークがバックグラウンド強度の統計誤差範囲内である場合
- CLASS 3...候補になったが確定できなかったもの

推論が終了すると最終的な結果はピークデータファイルに書き込まれ、エキスパートシステムが終了する。

エキスパートシステムによる推論結果を従来の判定アルゴリズムによるものと比較した。

図-11はウランなどを含む天然鉱物を試料として定性分析を行ったもので、従来型のプログラムで判定した結果(a)と、同じピークデータをエキスパートシステムで判定した結果(b)である。従来システムの結果(a)には○で示したような誤判定が発生していたが、エキスパートシステムでは誤判定が解消されている。さらに、ピーク数が多く判定の難しい5種類の試料について比較すると、専門家が判定できる合計172本のピークデータについて、従来システムでは8本のピークが誤判定4本のピークが未判定となり正答率が94.4%であったのに対し、エキスパートシステムは多くの試料で100%の正解を示し、正答ピーク数は170本で正答率は98.8%であった。

○が誤判定

```

*** HIGH SPEED QUALITATIVE ANALYSIS ***      DATE : 91/06/26
                                                TIME : 17:11

comment = MONAZITE

* FILE NAME = MONAZ
* ACC.V(Kv) = 15
* BEAM SIZE(micron) = 100
* S.C.(micro) = .5

* ELEMENT IDENTIFY

CLASS 1 : O , P , Ca , Fe , Y , Dy , Ho , Er , Yb , Pb
          Th , U

CLASS 2 : C , Si , V , Zn , Ge , Zr , I , Gd , Bi

CLASS 3 : Nd , Sm , Tb

* PEAK IDENTIFY

CH.1 LIF ( 3.77230 - 1.09110 )
SAMPLING TIME (msec) = 37.037

TOTAL PEAK NO. = 23

NO.   PKW   PWD   PKI   BGI   PKI-BGI   PEAK NAME   CLASS
1     3.71259 0.00640   85    20.6   64.4   Ho La2(2)   1
2     3.35745 0.00477  381    12    369   Ca Kal,2    1
3     3.08852 0.00319   72    18     54   Ca Kbl      1
          43    15     18   V Kal,2    1
          17    12     12   Y Lal,2    1

CH.2 PET ( 8.18097 - 2.37353 )
SAMPLING TIME (msec) = 37.037

TOTAL PEAK NO. = 18

NO.   PKW   PWD   PKI   BGI   PKI-BGI   PEAK NAME   CLASS
1     7.12216 0.00868   204    8     196   Si Kal,2    2
2     6.71440 0.00608   31     8     23   Ca Kal,2(2) 1
          42    109   1233   Y Lal,2    1
12    3.99744 0.01129   97    161.3  161.3   Y Lal,2    1
13    3.90751 0.01216   59    161.3  161.3   Y Lal,2    1
14    3.71322 0.01303   469   126.3  342.6   U Mb       1
15    3.67836 0.01389   169   119.3  49.6    Th Mg      1
16    3.35838 0.01216  2002  156.0  1845.9  Ca Kal,2   1
17    3.08700 0.01303   467   181.8  285.2   Ca Kbl     1
18    2.50329 0.01563   451  351.1  99.8    V Kal,2    2
          17    12     12   Ge Kal,2(2) 2

CH.3 RAP ( 24.45000 - 7.74200 )
SAMPLING TIME (msec) = 53.3333

TOTAL PEAK NO. = 18

NO.   PKW   PWD   PKI   BGI   PKI-BGI   PEAK NAME   CLASS
1    23.60130 0.13200   245   21.3  223.6   Kal,2      2
2    19.24910 0.24400   58    10.3  47.6   Y Lal,2(3) 1
          19    47.33  108.00  22.1   Y Lbl(3)   1
9    10.26110 0.06400   126   83.7   43.3   Gd Mb      1
          17    12     12   Bi Mal,2(2) 2
10   10.07290 0.04400   183  105.5  77.4   Ca Kal,2(3) 2
11   9.59232 0.08000   288  122.1  165.8   Dy Ma     1
12   9.36000 0.08000   281  147.5  133.4   Dy Mb     1
13   8.95537 0.05600   176  150.7  25.2   Ho Mb     1
14   8.82314 0.06800   422  156.2  265.7   Er Ma     3
          17    12     12   Er Lbl(3)  1
15   8.58270 0.06400   387   166    221   Er Mb     1
16   8.47850 0.04400   218  190.2  27.7   Yb M      3
17   8.14179 0.05600   680  217.0  462.9  Yb Ma     1
18   7.89743 0.06014   407   170    237   Yb Mb     1

CH.3 PBST ( 93.92630 - 28.72010 )
SAMPLING TIME (msec) = 53.3333

TOTAL PEAK NO. = 7

NO.   PKW   PWD   PKI   BGI   PKI-BGI   PEAK NAME   CLASS
1    70.98900 0.47663   192   19.6  172.3   O Ka(3)    1
2    55.39240 0.44588   93    40.1   52.8   P Kal,2(9) 1
3    47.26620 0.72263   345  103.3  241.6   O Ka(2)    1
4    44.96070 1.16851   359  150.3  208.6   C Ka       2
5    43.03150 0.41513   288  146.2  141.7   P Kal,2(7) 1
6    36.91180 0.59963   301  149.8  151.1   P Kal,2(6) 1
          17    12     12   Zn Lal,2(3) 2
7    30.88270 0.58426   911  393.1  517.8   P Kal,2(5) 1
    
```

(a) 従来型システム


```

*** GENZO ( 源蔵 ) EXPERT SYSTEM ***
*** for EPMA High Speed Qualitative Analysis ***
***
*** DATE : 1991 Jun 26
*** TIME : 17:08
***
* FILE NAME      = MONAZ
* ACC.V (KV)    = 15.0
* S.C (micro)   = 0.5

* ELEMENT IDENTIFY
CLASS 1 : O , Si , P , Ca , V , Fe , Y , Zr , Nd , Gd
          Dy , Ho , Er , Yb , Pb , Th , U
CLASS 2 : Sm , Tb
CLASS 3 : C

* PEAK IDENTIFY
*** LiF ( 3.77230 - 1.09110 )
TOTAL PEAK NO. = 23
NO.  PKW      PWD      PKI      BGI      PKI-BGI    PEAK NAME    CLASS
1     3.71259  0.00640    85     20.6     64.4        Ca Kal,2     1
2     3.35745  0.00477   381    12.0    389.0        Ca Kbl       1
3     3.08852  0.00319    72     18.0     54.0         V Kal,2     1
          3.08852  0.00319    72     15.0     18.0         V Kal,2     1
          3.08852  0.00319    72     17.0     17.0         Nd Lal       1

*** PET ( 8.18097 - 2.37353 )
TOTAL PEAK NO. = 18
NO.  PKW      PWD      PKI      BGI      PKI-BGI    PEAK NAME    CLASS
1     7.12216  0.00868   204     8.0    196.0        Si Kal,2     1
2     6.71440  0.00608    31     8.0    23.0         Ca Kal,2(2)  1
          6.71440  0.00608    31     8.0    23.0         Y Lal,2     1
          6.71440  0.00608    31     109.0   1233.0       Y Lal,2     1
11    4.13867  0.01216   1198    136.0   807.0        Th Mb       1
12    3.93974  0.01129   943    161.3   435.7        U Mal,2     1
13    3.90751  0.01216   597    126.4   435.7        U Mal,2     1
14    3.71322  0.01303   469    126.4   342.6        U Mb       1
15    3.67836  0.01389   169    119.3   49.7         Th Mg       1
16    3.35838  0.01216   2002   156.1   1845.9       Ca Kal,2     1
17    3.08700  0.01303   467    181.8   285.2        Ca Kbl       1
18    2.50329  0.01563   451    351.1    99.9         V Kal,2     1

*** RAP ( 24.45000 - 7.74200 )
TOTAL PEAK NO. = 18
NO.  PKW      PWD      PKI      BGI      PKI-BGI    PEAK NAME    CLASS
1     23.60131  0.13200   245    21.3    223.7        O Kal,2     1
2     19.34306  0.04400    58    10.3    47.7         Y Lal,2(3)  1
          19.34306  0.04400    58     7.9    22.1         Y Lbl(3)    1
          19.34306  0.04400    58     7.9    22.1         P Kal,2     1
8     12.89807  0.04400   340    62.1    177.9        Dy Lal,2(2)  1
6     12.42208  0.04800   234    62.1    171.9        Dy Mb       1
7     12.31407  0.04000   521    63.1    457.9        P Kal,2(2)  1
8     10.47727  0.10800   133    86.8    46.2         Gd Na       1
          10.47727  0.10800   133    86.8    46.2         Yb Mb       1
9     10.26108  0.06400   126    83.7    42.3         Gd Mb       1
10    10.07289  0.04400   183   105.6    77.4         Ca Kal,2(3)  1
11    9.59232  0.08000   288   122.1   165.9        Dy Na       1
12    9.36000  0.08000   281   147.6   133.4        Dy Mb       1
13    8.95537  0.05600   176   150.7    25.3         Ho Mb       1
14    8.82314  0.06800   422   156.3   265.7        Er Na       1
15    8.58270  0.06400   387   166.0   221.0        Er Mb       1
16    8.47850  0.04400   218   190.3    27.7         Yb M        1
17    8.14179  0.05600   680   217.1   462.9        Yb Na       1
18    7.89743  0.06014   407   170.0   237.0        Yb Mb       1

*** PbST ( 93.92625 - 28.72006 )
TOTAL PEAK NO. = 7
NO.  PKW      PWD      PKI      BGI      PKI-BGI    PEAK NAME    CLASS
1     70.98900  0.47663   192    19.7    172.3        O Ka(3)     1
2     55.39240  0.44588    93    40.1    52.9         P Kal,2(9)  3
          55.39240  0.44588    93    40.1    52.9         Ho Na(6)    3
3     47.26615  0.72263   345   103.4   241.6        O Ka(2)     1
4     44.96069  1.16861   359   150.4   208.6        C Kal,2(18) 3
          44.96069  1.16861   359   150.4   208.6        Y Lal,2(7)  3
          44.96069  1.16861   359   150.4   208.6        Ho Mb(5)    3
          44.96069  1.16861   359   150.4   208.6        P Kal,2(7)  3
5     43.03149  0.41513   288   146.2   141.8        Er Mb(5)    3
          43.03149  0.41513   288   146.2   141.8        Er Mb(5)    3
6     36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        P Kal,2(6)  3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        Ca Kal,2(11) 3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        Ho Na(4)    3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        Pb Mal,2(7) 3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        P Kal,2(5)  3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        Y Lbl(5)    3
          36.91177  0.59963   301   149.9   151.1        Gd Mb(3)    3
7     30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        O Ka(3)     1
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        P Kal,2(9)  3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Ho Na(6)    3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        O Ka(2)     1
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        C Kal,2(18) 3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Y Lal,2(7)  3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Ho Mb(5)    3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        P Kal,2(7)  3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Er Mb(5)    3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Ca Kal,2(11) 3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Ho Na(4)    3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Pb Mal,2(7) 3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        P Kal,2(5)  3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Y Lbl(5)    3
          30.88267  0.58426   911   393.2   517.8        Gd Mb(3)    3
    
```

(b) エキスパートシステム

図-11 定性結果

エキスパートシステムでは、従来システムのアルゴリズムと比較すると、結果的に次の点で判定法が改善されていると言える。

- 全体の判定手順が専門家の方法に近い。
- クロスチェック（一つの結晶内だけでなく、他の結晶のデータと比較する）を行っている。
- 個々の分光結晶、個々の元素に固有の判断が入っている。
- ピークの状態によって臨機応変な判定手順が採られる。

これらにより、従来手法では難しい高精度の自動判定が実現できた。

ただし、本エキスパートシステムを実用化し運用してきた実感として、判定精度は向上したものの、システムの保守性の面では、エキスパートシステムが複雑な分だけ当初の予想ほど知識のメンテナンスが容易とは言えないと感じている。今後の課題としたい。

5. おわりに

化学分析の分野では、知識工学の対象として、前述の DENDRAL に始まった物質の構造解析の問題が研究され、さまざまなエキスパートシステムが開発されてきた。

近年、分析システムはますます高性能化・多機能化・多様化し、分析の精度向上や分析機器の操作の自動化のみならず従来は専門家にたよっていた分析作業そのものの自動化が必要になってきている。こうした分析機器を用いた化学分析の分野では、構造解析のほかにもエキスパートシステムが有効な局面が多いと思われる。たとえば、分析の前処理手順や分析機器の操作手順の知的ガイダンス、分析パラメータの最適化と自動設定、分析データの知的処理、そして分析データの認識や解釈、などである。

これらは、必ずしも知識工学の研究対象になるほど深い知識の処理を必要とす

るものではないが、従来型のプログラム開発と知識システムの発想を組み合わせることで有効なシステム開発ができる場合が少なくない。このあたりの有効性を、本稿で紹介した EPMA の定性データ解釈エキスパートシステムの事例で示したつもりである。

筆者らは、今後も、今回紹介したエキスパートシステムと同様のデータ解釈機能を他の分析システムにも応用してゆきたいと考えている。

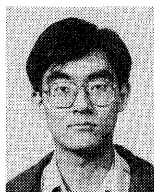
ただし、場合によっては、単にエキスパートシステムに分析の専門家と同等な働きをさせて分析作業を闇雲に自動化してしまうことが必ずしも望まれず、むしろ分析者のレベルや分析目的に応じた適切なサポート機能を提供することが有効なこともあると思われる。今後は、さらに、さまざまな局面に臨機応変に対応できる、真に知的な化学分析システムの開発が課題になると考える。

謝辞 本稿で紹介したエキスパートシステムは弊社第二分析事業部の丹羽直昌、古味秀人の両氏らとの共同開発によるものである。多大なご指導をいただいた両氏ならびに関係各氏に謝意を表します。

参考文献

- 1) 長谷川 聡, 古味秀人, 丹羽直昌: EPMA 定性分析エキスパートシステム, 島津評論, Vol. 48, No. 2, pp. 145-158, 島津製作所 (1991).
- 2) 丹羽直昌, 古味秀人, 荻本浩三, 長谷川 聡: EPMA における AI 化自動定性分析システム, 第 37 回応用物理学会予稿集, p. 466 (1990).
- 3) 副島啓義: 電子線マイクロアナリシス, p. 5, 日刊工業新聞社 (1987).
- 4) 高田直幸, 渡辺雄二, 長谷川聡, 山本 聡: エキスパートシステム構築支援ツール「源蔵」シリーズ, 島津評論, Vol. 48, No. 2, pp. 119-126, 島津製作所 (1991).
- 5) 長谷川 聡: ES 構築支援ツール「源蔵 I」, 「源蔵 II」知識整理支援ツール「源蔵 QAE」, Inter AI, Vol. 5, No. 6, 通巻 No. 26, pp. 56-63, 国際 AI 財団 (1991).

(平成 4 年 6 月 8 日受付)



長谷川 聡 (正会員)

1964 年生。1988 年名古屋大学理学部物理学科卒業。同年、(株)島津製作所入社。以来、エキスパートシステム構築ツール、知識整理支援ツール、およびエキスパートシステムの開発に従事。

現在、同社東京研究所勤務。(財)国際 AI 財団事業企画委員会委員。生物物理学会会員。

