

論文

事例ベース推論による熱分析支援システム

Computer-Assisted Thermal Analysis
System Based on Case-Based Reasoning

田中浩一, 西本右子, 中山 堯

神奈川大学理学部

熱分析の測定条件設定を支援するシステムのプロトタイプを事例ベースに基づくエキスパートシステムとして開発した。熱分析のプロセスは、(1) 測定条件の設定、(2) 測定、および(3) 測定結果の解析、という3つのステップに大別されるが、本システムはその最初のステップを支援するものである。本システムにおいては、試料情報と測定目的という2つの観点から熱分析事例の表現方法を与え、その2つの観点から事例間の類似性を定義した。また、事例表現の記述に用いられる用語の意味を柔軟に扱うためにシソーラスや概念辞書などを用意した。また、事例修正はルールによって行うが、各ルールは記述の抽象度に応じて分類されている。その結果、類似度の小さい事例しか見つからない場合でも、ある程度のアドバイスを提供することができる。測定条件の根拠を与える情報は整理された形では明らかにされておらず、試料や測定目的に応じて経験情報や専門知識によって推定しているのが実情であるので、エキスパートシステムの枠組としては単純なルールや記憶による推論方式よりも事例に基づいた推論方式とするのが適切であると考えられる。

1 はじめに

熱分析は、その種類や状態や形態の如何にかかわらず、物質の熱特性を測定することができる有用な分析手法として、様々の分野で利用が拡大し普及が進んでいる。[1, 2] 熱分析のプロセスは、(1) 測定条件の設定、(2) 測定、および(3) 測定結果の解析、という3つのステップに大別される。これらのステップの中で、2.の測定は計算機で制御され、3.の解析も計算機による支援が行われているが、最初の測定条件の設定は経験的な知識や情報に基づきながら人手によって行われている。これは、測定条件の根拠を与える情報が整理された形で明らかにされていないためにシステム化が容易でないからであると考えられる。この状況は熱分析の非専門家にとって、測定を行う上での障害となっている。ここで述べるシステム (*Computer-assisted Thermal Analysis System Based on CBR*; TASC) は、この測定条件の設定プロセスを事例ベース推論 (*Case-Based Reasoning*; CBR) に基づくエキスパートシステムとして実現しようとするものである [3]。すなわち、実際に行わ

れた熱分析に関する測定条件と関連情報を測定事例として集積して事例ベースを構築し、新しい熱分析の問題が与えられた時に、それと類似した測定事例をその事例ベースから探し出し、必要に応じてその類似事例の測定条件に修正を施すことによって、問題に対する測定条件として提示するというシステムである [4, 5]。このような既知の事例を参考にして新しい問題に対応するというやり方は専門家も実際に行っていると考えられる。新しい問題に適合するようにその事例を修正するためには、そのための知識やデータや計算が必要とされるので、事例ベース推論に基づくシステムは種々の知識ベース、データベースあるいは計算手順を含むことになるが、TASCにおいてもそれは同様である。TASCでは、熱分析の手法としては示差熱分析 (*differential thermal analysis*; DTA) と示差走査熱量計 (*differential scanning calimetry*; DSC) を対象とし、熱分析の試料としては主として高分子化合物を想定してシステムを構築した。TASCはプロトタイプシステムであるが、次のような特徴を持っている。

- 測定条件を設定する根拠として試料情報と測定目的という2つの観点を明確にした、熱分析事例の表現方法を与えた。
- 類似事例探索を実現するために、熱分析事例間の類似性を上記の2つの観点から定義した。
- 事例表現は種々の用語によって記述されるが、それらの用語の意味を柔軟に扱うためにシソーラスや概念辞書などを用意している。
- 事例修正のためにルールベースを用意しているが、各ルールの条件部を記述の抽象度に応じて階層的に分類することによって、修正の程度に柔軟性を与えている。これにより、類似度の小さい事例しか見つからない場合でも、ある程度のアドバイスを提供することができる。
- システムは対話的であり、データベースシステムとしても機能するので、部分的に得られた情報に基づいて、測定条件自体はその利用者が総合的に判断して推定するという使い方ができる。実用システムとしてはその方が有望かも知れない。

CBRの一般的な枠組みは、次のような構成要素からなる[5]。

1. 事例ベース
問題解決事例の集まりである。
2. 問題解析器
問題の特徴付けを行い、予想される問題点を列挙する。
3. 事例探索器
問題の特徴に基づいて事例ベースから類似事例を探索する。
4. 事例修正器
探索された事例、つまり類似事例と問題との間で照合しない部分を考慮し、類似事例を問題に適合するように修正する。
5. 事例格納器
CBRによる問題解決を事例とみなして、特徴付けを行い事例ベースに格納する。学習の形態の一つであると考えられる。

CBRによる問題解決システムの構築は、上記のような枠組を実現することであり、TASC

においても同様のシステム構成となっている。TASCにおける全体の処理の流れは次の通りである。

1. 試料情報および測定目的の入力

ユーザはメニューに従って試料情報などを順次入力するが、特に分類名と熱特性目的はCBRを実行する上での必須情報であるので、必ず入力しなければならない。

(a) 試料名

日本語または英語による試料名の入力を行う。

(b) 分類名

分類名は必須項目であるが、試料名が入力された場合に、それがシステムにとって既知である(すなわち、分類木のリーフとして存在する)ならば、その分類名が自動的に設定されるので、ユーザからの入力は不要である。ただし、設定された分類名が不適当とユーザが判断した場合は変更することができる。

(c) 構成

構成関係、構成物質1、構成物質2を一組として入力する。

(d) 生成過程

出発物、生成物、処理操作内容、処理温度、処理時間を一組として入力する。

(e) 前処理

出発物、生成物、処理操作内容、処理温度、処理時間を一組として入力する。

(f) 形状

塊、フィルム、糸といった用語を入力する。メニューにより、これらの中から一つを選択する。

(g) 応用目的

応用目的の観点からの測定目的を日本語文または英文で入力する。

(h) 熱特性目的

熱特性用語によって測定目的を入力する。上で入力した応用目的をキーとして事例ベースを探索し、見つかった場合は、その事例の熱特性目的を登録する。見つからない場合は、ユーザが熱特性目的を入力する。入力は熱特性メニューから測定に必要な熱特性を複数選択することによって行われる。

2. 類似事例探索

事例ベースの中で問題に類似した事例を

見つける。事例探索は、試料情報の類似性と測定目的の類似性の両方に関して行われる。事例のマッチングにおいては、必要に応じて分類木、概念辞書あるいはシソーラスを利用する。

3. 差異の認識

試料情報と測定目的について探索事例と問題との間の差異を求める。必要な試料情報の追加もここで行う。すなわち、事例修正に必要な情報で不足しているものがあれば、ここでインタラクティブに入力を行う。

4. 事例の修正

類似事例と問題との差異に基づいて該当の測定条件を修正する。

5. 出力

修正後の測定条件を画面に表示する。

2 熱分析事例の表現

本システムは熱分析の測定条件設定を支援することを目標としているが、熱分析の事例としては測定条件を含めて、(1) 測定目的、(2) 試料情報、(3) 測定条件、(4) 測定結果、および(5) 書誌事項、の5つの項目から構成されると考えられる。最後の書誌事項は事例そのものではないが、事例ベースの事例は論文誌、モノグラフ、ハンドブック等から収集されるので事例表現の要素として含めている。

2.1 測定目的

これはその試料の熱分析測定を行った目的を記述したものであるが、応用目的と熱特性目的という2通りの記述法が可能である。

1. 応用目的

これは測定目的をことば(日本語あるいは英語による文)で記述したものである。試料の特性をより高次の立場から解釈して記述したものであると言える。たとえば、その試料の応用的な観点からの記述であったり(例: "プラスチックの寿命予測" など)、あるいはより一般的な概念であったりする(例: "ポリマーブレンドの相図" など)。これによって応用的観点や一般的な概念による事例探索を可能としている。

2. 熱特性目的

測定目的を、測定する熱特性のリストとして表したものである。これは図1に示すように、熱分析の結果として得られるスペクトルデータのシフトやピークといった部分が直接ガラス転移や結晶化や融解といった熱特性に対応することに根拠を置いている。[6] たとえば、高分子の熱特性は表1のように分類することができる[7]。熱特性による測定目的の記述はこれらのいわば熱特性属性集合による測定目的のモデル化であると考えられる。また、測定目的の内容は上記の応用目的と当然同一であり、応用目的による記述をより低次の記述子、すなわち熱特性空間で記述したものが熱特性目的に他ならない。たとえば、"ポリマーブレンドの相図" という応用目的は、(ガラス転移、融解) という熱特性リストに変換することができる。

2.2 試料情報

試料に関する情報は次の6つの項目によって記述する。

1. 試料名: 試料の名前を与える。名前の表記法は、化合物の正式名称、製品名、慣用名、略語など何でもよい。種々の名称の一意性を確保するためにシノニムを含むシソーラスを用意しており、それによって探索の柔軟性を得ている。試料名は必須項目ではない。
2. 分類名: 試料は種々の観点や基準で分類することができる。したがって、試料はspecificな識別だけでなく、それが属す分類カテゴリによる識別が可能である。たとえば、polystyreneやpoly-2-chlorostyreneといったspecificな試料名に対してblend-polymerという分類名が与えられる。同一分類カテゴリに属す試料は、その分類の観点からは類似していると考えられる。(実際には、類似しているものが1つのカテゴリになるように分類の観点を与える訳である) TASCにおいては、与えられた試料に対してこの分類に基づく類似性を決定するために、分類名をノードとする決定木を用意している。これをここでは分類木と呼ぶことにする。分類木の直

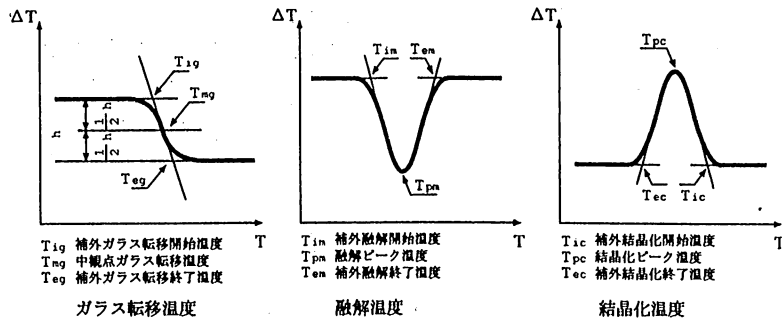


図 1: プラスチックの熱分析スペクトル(シフトおよびピーク)

表 1: 高分子の熱特性の分類

	高分子科学	高分子工業
物理的	ガラス転移, 結晶化, 融解, 結晶-結晶転移, 変形機構, 熱処理機構, 安定化機構, エンタルピー, エントロピー, 比熱, 熱伝導, 熱拡散, 相平衡, 溶解, 界面, 粘性	軟化, 溶解, 流動, 固化, 延伸, 熱変形, 熱処理, エージング, 熱履歴, 熱収縮, 熱膨張, 熱応力, 耐熱性, 耐寒性, 断熱性, 室温耐久性, 経時変化, 相溶性
化学的	熱重合, 熱硬化, 光重合, 熱分解, 熱酸化分解, 反応速度	ゲル化, 成形加工, 耐熱性(熱劣化, 熱酸化劣化), 難燃性, 耐久性(寿命予測)

接リンクされたノード間には is-a 関係が成立するので, 分類木上で is-a 推論を行うことができる. 分類名は必須項目である. 一方, 分類名は, 後述する概念辞書の項目でもあるので, 分類名から概念辞書の他の記述項目を知ることができる.

3. 構成: 試料が複数の物質で構成されている場合, その構成の内容を次のような形式で記述する.

構成関係 (物質名 1, 物質名 2, ...)

たとえば,

blend(polystyrene, poly-2-chlorostyrene)

は試料が polystyrene と poly-2-chlorostyrene の2つの物質の blend として構成されていることを表す.

4. 生成過程: 1つの試料は通常は何段階かの生成過程を経て得られる. それらの生成過程の各段階を次のようなリスト形式で記述し, それらのリストを並べて全体の生成過程を表すものとする.

(出発物, 生成物, 処理内容, 処理温度, 処理時間)

ここで, ある段階の生成物はその次の段階の出発物であり, 最後の段階の生成物が試料に一致する. たとえば, ポリマーブレンド(ポリスチレン/ポリ 2-クロロスチレン)の生成過程が「ブレンド試料は, 所定の組成比の高分子混合物のベンゼン均一溶液を過剰のメタノールに沈澱させ, 得られた白色粉末を加圧プレスすることにより均一 1 相フィルムとして得た」であるとすると,

((ポリスチレン ポリ 2-クロロスチレン), ポリスチレン/ポリ 2-クロロスチレン,
沈澱, nil, nil))
((ポリスチレン/ポリ 2-クロロスチレン, ポリスチレン/ポリ 2-クロロスチレン,
加圧, nil, nil))

という 2 段階のリストでそれを表す.

5. 前処理: 生成された試料に対して, さらに測定のために特別の前処理を施す場合がある. これも生成過程と同様の形式の次のような状態変化の系列として表す.

(出発物, 生成物, 処理内容, 処理温度, 処理時間)

たとえば, 上記のポリマーブレンドに対して, 「二相分離ブレンドは, 上記の方法で得られた均一相ブレンドを所定の相分離温度 (156.4 °C) で 19 時間 10 分熱処理することにより得た」という前処理は,

((ポリスチレン/ポリ 2-クロロ
スチレン, ポリスチレン/ポリ
2-クロロスチレン,
nil, 156.4, 1150))

と表せる。(処理時間は分の単位である)

6. 形状: 板状や粒子状といった, 測定結果に影響があると考えられる試料の形状を記述する。たとえば, 上記の試料例では「フィルム」と書かれる。

2.3 測定条件

測定条件を記述する項目は次の通りである。

1. 測定装置: どのような熱特性を測定するかという測定目的に応じて DSC あるいは DTA 等の装置を選択する。事例には実際に使用した装置が記述される。

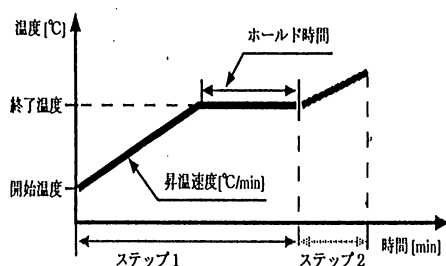


図 2: 温度プログラム

2. 温度プログラム: 測定温度を制御するためのプログラムである。開始温度, 終了温度, 昇温速度, および保持時間の 4 つのパラメータを 1 組としたステップを 1 ステップ以上組み合わせることによって構成する。図 2 に温度プログラムを模式的に示す。開始温度, 終了温度は昇温の開始と終了の温度, 昇温速度は単位時間当りの温度変化量, 保持時間は終了温度に達した後の熱電対の保温時間である。

3. 雰囲気ガス: 測定時に, 試料周辺と測定装置を満たす気体条件である。事例には用いられた気体の種類と流量を記述する。
4. 基準物質: 基準物質は, 熱的な基準を作るために選ばれる, 測定温度の範囲内で熱的に安定した物質である。事例には選択された物質の名称が記述される。
5. 容器: 試料や基準物質を入れる容器であるが, 事例にはその材質と形状を記述する。
6. 圧力
測定装置内の気圧を「通常」か「高圧」のいずれかとして記述する。
7. その他
上記以外の項目については, 項目名とその値とのペアを記述する。たとえば, 試料の重量 [mg], 形状や厚さ [mm] などがある。

表 2 にこれらの測定条件の項目とその値の例を示した。

2.4 測定結果

これは測定条件を設定するために直接必要とされる訳ではないが, 事例の構成要素としては必須であり, それ自体で利用できる情報なので事例表現の項目としている。測定結果は次のリスト形式で記述される。

(吸熱/発熱, ピーク・シフト, 高さ, 測定温度, 範囲, 面積, 熱特性)

吸熱/発熱は, いずれか一方が指定される。ピーク・シフトは, いずれか一方または両方を指定する。高さは, ピーク・シフトの最大の高さである。測定温度は, 熱特性が確認された温度または温度範囲を表す。範囲は, ピーク・シフトが起こった時の温度範囲を表す。面積は, ピーク・シフトが起こった面積である。

2.5 書誌事項

これは事例の出典である文献の書誌事項(書籍・雑誌名, ページ, タイトル等)を記述する。

以上の 5 つの項目による事例表現の形式を表

表 2: 測定条件

項目	内容
測定装置	DTA または DSC
基準物質	α アルミナ, 白金, 石英など
容器	材質: アルミニウム, ニッケル, α アルミナ, 白金, 石英など 形状: 開放型 または 密閉型
雰囲気ガス	種類: 空気, 酸素, アルゴンなど 流量: 単位時間あたりのガス流量 [ml/min]
圧力	高圧 または 通常
温度プログラム	開始温度, 終了温度, 昇温速度, 保持時間の組 例: (50 200 10 0)
その他	質量 [mg], 厚さ [mm], 直径 [mm], 形状: 粒子, 板など

3にまとめて示す。実際には属性-属性値の形式で格納されている。

2.6 シソーラス

事例を記述するためには、上述のように試料名、分類名、属性名等種々の名称が用いられるが、同一対象を表すのに必ずしも1つの名称だけが用いられるとは限らない。そこで、TASC においては名称を限定せずできるだけ自由に使えるように同義語を定義したシソーラスを用意している。同義語の他にも上位概念や関連語を与えることによって is-a 推論や関連語による飛躍を含む事例探索が可能となる。シソーラスで定義したこのような概念間の関係は、後述する概念辞書の記述項目とすることもできるが、ここでは概念間の包含、同等、関連という関係だけを抽出してシソーラスという独立した辞書として利用している。

一方、本シソーラスには名詞概念だけでなく、属性値の定性表現を与える述語に関する定義も与えている。たとえば、量的な定性表現として「ない」、「ほとんどない」「少ない」、「少しある」、「かなりある」、「ある」など種々の用語が考えられるが、これらの間には厳密ではないにしろ、ある程度の順序関係が成立していると考えられる。その順序関係をこれらの定性表現の間に導入することによって、ファジーな推論を実現することができる。たとえば、隣接する定性表現は同じであるとみなすことができる。ただし、現在実装しているシソーラスは事例収集に伴って得られた名称に限られており、量的にはまだ充実していない。

2.7 分類木

TASC においては、化学構造の観点から高分子物質を階層的に分類し、決定木として実現している。これが分類木であり、木の各ノードが物質の属すカテゴリを表している。作成した分類木の一部を図3に示す。たとえば、この図における「ポリエチレン」ノードは、分類名がポリエチレンで上位概念がポリエチレン系となっている。分類木の終端ノードは個別の物質名を表す。分類木は、類似事例探索時の類似分類名の特定や利用者による分類名の入力に利用される。

2.8 概念辞書

これも高分子物質を対象として作成した [7, 8]。高分子を試料とする熱分析の領域において共通に利用される概念を辞書として用意する。これはいわゆるオントロジーに相当するが、ここでは概念辞書と呼ぶことにする [9]。記述単位は個別の物質のすぐ上位の分類カテゴリ (分類木における終端ノードの直接の親ノード) である。これは、熱分析に必要な概念は個別物質単位の記述よりもその上位の分類カテゴリの方が有用であることによっている。記述項目は以下の6つである。

1. 分類名: 分類カテゴリの階層における最下位カテゴリで、試料情報における分類名に対応する。たとえば、「低密度ポリエチレン」のような高分子カテゴリである。
2. 相: 温度変化に応じて物質が取る相状態を、温度の低い方から順にリスト形式で記述する。たとえば、(ガラス, ゴム, 結

表 3: 事例ベース

属性	属性値
応用目的	日本語文または英語文
熱特性目的	(熱特性目的 熱特性目的 … 熱特性目的)
試料名	サンプルの名称
分類名	分類木によって分類される名称
構成	構成関係 (構成物 構成物質)
生成過程	((出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間) (出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間) … (出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間))
前処理	((出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間) (出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間) … (出発物 生成物 処理操作内容 処理温度 処理時間))
形状	塊, フィルム, 糸などの名称
測定装置	DTA または DSC
温度プログラム	((開始温度 終了温度 昇温速度 保持時間) (開始温度 終了温度 昇温速度 保持時間) … (開始温度 終了温度 昇温速度 保持時間))
雰囲気ガス種類	気体名
雰囲気ガス流量	[ml/min]
圧力	通常または高圧
基準物質	物質の種類
試料量	[mg]
形状	塊, フィルム, 糸など
厚さ	[mm]
測定結果	((吸熱/発熱 ピーク/シフト 高さ 測定温度 [°C] 範囲 面積 熱特性) (吸熱/発熱 ピーク/シフト 高さ 測定温度 [°C] 範囲 面積 熱特性) … (吸熱/発熱 ピーク/シフト 高さ 測定温度 [°C] 範囲 面積 熱特性))
書籍雑誌名	タイトル
ページ	(開始ページ 終了ページ)

晶, 融解) のような記述である。

- 状態: 上の相状態の中で, 常温での相状態を記述する。たとえば, "低密度ポリエチレン" に対しては "結晶" となる。
- 性質・特徴: 物理化学的性質や特徴をそのカテゴリの属性として (属性, 値) のペアのリストとして記述する。たとえば, 低密度ポリエチレンは次のように表される。

((結晶性, 低い) (耐衝撃性, 強い) (耐水性, ある) (耐薬品性, 優れる) (電気特性, 優れる) (耐寒性, 良好))

- 用途: そのカテゴリに属す物質の用途をリスト形式で記述する。個々の用途は"産業用フィルム" のような一般名称や, "バケツ" のような具体名称で表される。たとえば, 低密度ポリエチレンの用途は次のようになる。

(薄物フィルム, 産業用フィルム, 農業用フィルム, 重包装袋用フィルム, キャップ, 造花, 密封容器, 台所用品, バケツ,

ビールクレート, 灯油缶, 小型瓶, ドラム缶, テープ, クロス, ロープ, 漁網, 電気機器部品, 玩具, 文具, タンク, 浮標, パイプ)

- 化学構造 繰り返し単位の構造を記述する。したがって, 概念辞書の記述単位である分類名は繰り返し単位としては一意にきまるものである。表 4 に低密度ポリエチレンを分類名とする概念辞書項目の記述例を示す。

事例ベースの試料名と分類名, 概念辞書の分類名, および分類木の分類名には, 図 4 のような対応関係が存在する。分類木の終端ノードは事例表現の試料名と対応しており, その直接の親ノードである分類名は, 事例表現の分類名および概念辞書の分類名と対応している。

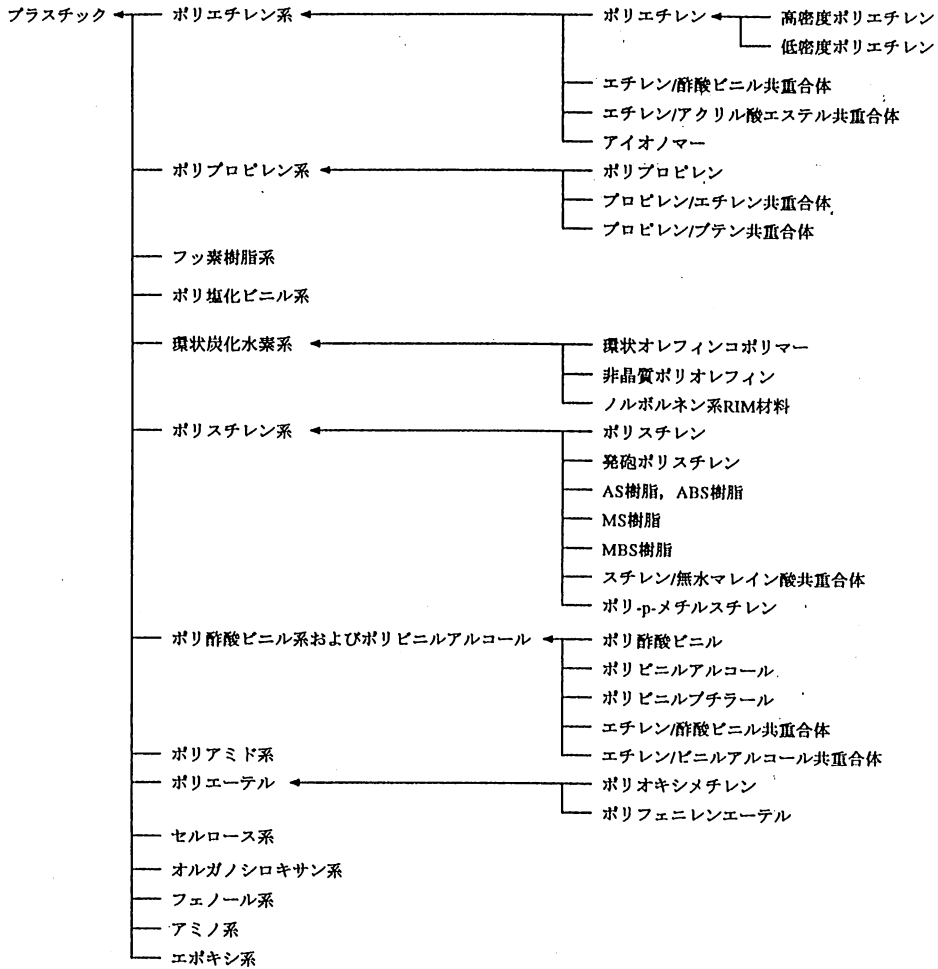


図 3: プラスチックの分類木

3 類似事例探索

3.1 事例ベース推論

事例ベース推論の一般的な枠組は次のモジュールから構成される。

1. 事例ベース：問題の解決事例の集まりである。
2. 問題解析部：与えられた問題を解析し、推論全体を制御する。
3. 事例探索部：解析した問題の特徴に基づいて、事例ベースから問題に類似した事例を探索する。
4. 事例修正部：探索した類似事例に対して、与えられた問題と異なる部分に（必要な

らば）修正を施して、その類似事例を問題解決に適用できるようにする。

TASC はこれらのモジュールを実装したものであるが、熱分析の問題にこの枠組を適用するために第一に行わなければならないのは、次に述べる類似事例探索のための類似性の定義である。

3.2 類似性の定義

熱分析の測定事例は、前節で述べたように、測定目的、測定条件、解析結果および書誌事項によって記述される。一方、与えられる問題について既知の情報は、測定対象である試

表 4: 概念辞書の記述項目

項目	内容
分類名	物質の名称 例:低密度ポリエチレン
相	温度変化による物質の状態 例:(ガラス 結晶 ゴム)
状態	相の記述中で、常温時の状態 例:ガラス
性質・特徴	物質の物理・化学的性質や特徴 例:((結晶化度 低い)(衝撃 強い)(耐寒性 良好)(耐水性 優れる)(耐薬品性 優れる)(電気特性 優れる))
用途	工業面での利用 例:(フィルム 日用品類 コンテナ類 紐類 電気機器部品)
化学構造	例:(CH_2)

料とその測定目的の2つである。問題と事例との間の類似性はその試料情報と測定目的の2つに関して定義される。試料の類似性はさらに、(1) 試料名レベル S_1^s 、(2) 分類名レベル S_2^s 、および(3) 性質・特徴レベル S_3^s という試料についての3つの識別レベルに細分して定義している。ただし、類似事例探索においてこれらが常に考慮されるのではなく、上位レベル(識別度の高いレベル、つまり S_i^s の添字 i の小さいもの)から順に考慮されて、そのレベルでの探索に失敗した場合に次のレベルに移行して再度探索を試みるという構造的な定義としている。逆に言えば、 S_i^s についての類似事例探索に成功すれば S_{i+1}^s 以降についての探索は行わない。これは上位レベルほど試料の物質全体としての具体的な類似性を表し、下位レベルは属性のような一般化された(部分的な)類似性を表すことに対応した定義である。類似性のこのような階層的な定義によって柔軟な探索が可能となっている。各レベルにおいては以下で述べるように S_i^s をスコアとして計算し、より大きなスコアを与える事例を類似した事例であると解釈する。

測定目的の類似性は、(1) 応用目的 S_1^p 、および(2) 熱特性目的 S_2^p という測定目的の2つの表現に関する観点から定義している。これも、試料の類似性の場合と同様に、 S_1^p を S_2^p よりも優先的に適用して類似事例探索を行い、 S_1^p に関して探索に成功すれば S_2^p については探索を行わない。

ここで、 S を S_i^s に関する探索で見つかった事例の集合、 P を S_i^p に関する探索で見つかった事例集合とすると、最終的な類似事例

は $S \cap P$ によって与えられる。上述の類似性の定義は、この $S \cap P$ を求めるという探索手順として実現されており、その意味でも構造的な定義となっている。類似性の定義の全体構成を図5に示す。

(1) 試料の類似性

(a) 試料名レベルの類似性

試料名が同じである事例は類似事例であるとする。この類似事例に対して類似スコアを次のように定義する。

$$S_1^s = \sum_{i=1}^4 w_i f_i$$

ここで、添字 i は試料情報の項目を表し、 $i = 1, 2, 3, 4$ が構成、生成過程、前処理、および形状をそれぞれ示すものとする。 f_i は i 番目の項目の一致した程度、つまりスコアを表す。 w_i は測定目的に応じて与えられる f_i の重みであり、値は1または0である。値1は、その測定目的においては i 番目項目の寄与が存在し、値0は存在しない(その項目はその測定目的には関係がない)ことを意味する。ここで、測定目的は熱特性によって記述されるものとする。たとえば、測定目的が“ガラス転移”の場合は、 $(w_1, w_2, w_3, w_4) = (1, 1, 1, 0)$ となるが、これはガラス転移の測定には形状項目($i = 4$)の影響がないことを表している。これらの重みベクトルは知識ベースとして用意されている。このように、 S_1^s の定義には測定目的

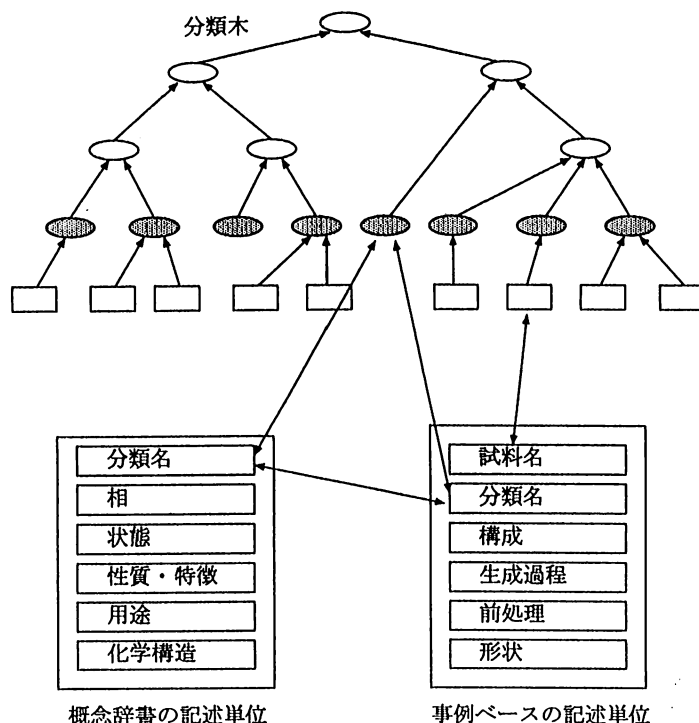


図 4: 分類木の各ノードと概念辞書・事例表現との関係

に関連した情報も反映されているので、厳密には試料の類似性と測定目的の類似性は独立ではないが、事例探索にとってはむしろ有利である。

スコアの計算

i 番目の試料情報項目のスコア f_i は以下のように計算される。この計算において名称に関するマッチングを行う場合には、前述のシソーラスを利用して同義語や上位概念を考慮することができる。

i. 構成 (f_1)

試料の構成が類似している程度をスコアとして計算する。構成の記述要素は構成関係と構成要素であるが、試料名が同じであるという前提があるので構成要素は同じであるとしてよい。そこで、事例と問題の試料構成の類似度は次のように定義する。

$$f_1 = \begin{cases} 1, & \text{if } C^c = C^p \\ 0, & \text{either one or both} \\ & \text{of } C^c \text{ and } C^p \\ & \text{has no description} \\ -1, & \text{if } C^c \neq C^p \end{cases}$$

ここで、 C^c と C^p はそれぞれ事例と問題の構成関係を表す。試料成分が1つである場合は、それを単一構成関係とみなして、 $C^c = C^p$ の場合を含める。(すなわち、 $f_1 = 1$ であるとする) たとえば、事例と問題の構成が共に

blend(polyester, poly2-chlorostyrene)

ならば、 $C^c = C^p = \text{blend}$ で、 $f_1 = 1$ となる。

ii. 生成過程 (f_2)

生成過程の各ステップが事例と問題とでどの程度一致しているかについて評価する。これは、事例と問題と

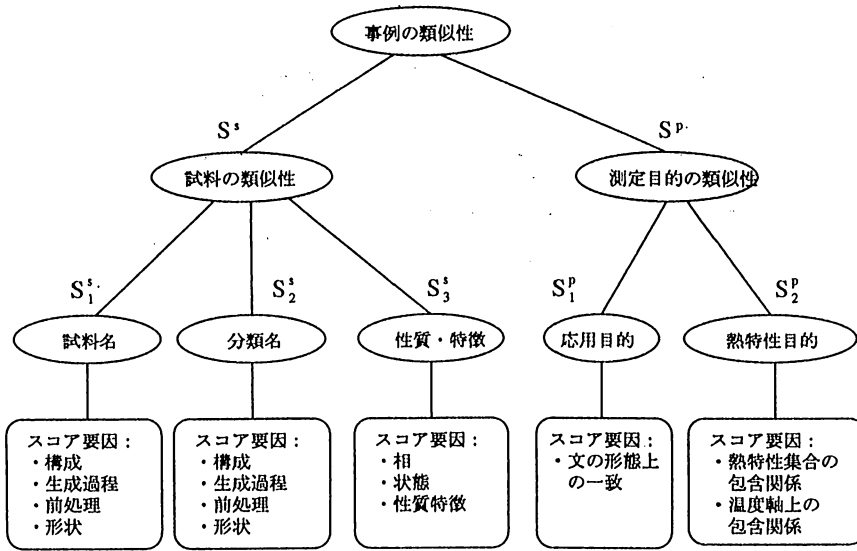


図 5: 事例の類似性

で出発物と生成物が同じステップについて、処理操作内容・温度・時間の3つのパラメータを用いて一致度を算出し、それらのステップについての一貫性の和を f_2 のスコアとすることによって実現する。事例と問題の生成過程の各ステップを表す組をそれぞれ $(s^c, p^c, m^c, e^c, i^c)$ および $(s^p, p^p, m^p, e^p, i^p)$ とすると f_2 は次式で表される。

$$f_2 = \sum (\delta(m^p, m^c) + r_e + r_i)$$

ここで、 $\sum$ は出発物と生成物が一致したステップについての和を表し、

$$\delta(m^p, m^c) = \begin{cases} 1, & \text{if } m^p = m^c \\ -1, & \text{if } m^p \neq m^c \end{cases}$$

$$r_e = \frac{1}{a |e^p - e^c| + 1}, \quad 0 < a < 1$$

$$r_i = \frac{1}{b |i^p - i^c| + 1}, \quad 0 < b < 1$$

とする。ただし、 $\delta(m^p, m^c)$ 、 r_e および r_i は、式の定義に要求されている値が1つでも記述されてなけれ

ば、0と定義する。 r_e と r_i は処理温度と処理時間についての一致度を表すが、これらは事例と問題とで厳密に一致しなくても同一であるとみなせる場合があるので、負のスコアは与えず、0に漸近するような関数として定義している。 a, b は漸近の程度を表す定数である。(実際には、 $\sum$ は1つか2つのステップの和がほとんどである)

iii. 前処理 (f_3)

前処理の各ステップが事例と問題とでどの程度一致しているかを評価する。各ステップの意味は上記の生成過程と同じであり、スコアの評価方法の定義も同じである。

$$f_3 = \sum (\delta(m^p, m^c) + r_e + r_i)$$

iv. 形状 (f_4)

試料の形状の類似度を評価する。形状は、たとえばフィルムや粉末などというような用語で記述されるので、類似度は用いられている用語が同じであるかどうかで次のように1または0と定義する。

したがって、 f^4 は次式で定義される。

$$f_4 = \delta(\text{shape}^p, \text{shape}^c)$$

$$= \begin{cases} 1, & \text{if } shape^p = shape^c \\ 0, & \text{if } shape^p \neq shape^c \end{cases}$$

(b) 分類名レベルの類似性

試料名が同じである事例が見つからない場合は、分類名が同じである事例を探索する。すなわち、分類名が同じである事例は類似事例であるとする。分類名探索においては分類名に関する完全一致またはシソーラスを利用した is-a 推論が行なわれる。探索事例に対して類似スコア S_2^s を次のように定義する。

$$S_2^s = \sum_{i=1}^4 w_i f_i$$

これは試料名レベルにおける類似事例のスコア定義とまったく同じである。 w_i と f_i の意味も試料名レベルの場合とまったく同じである。

(c) 性質・特徴レベルの類似性

問題に与えられた分類名を持つ事例が見つからない場合は、問題の試料の性質・特徴に類似した性質・特徴を持つ事例を探索する。しかし、事例ベースの事例には試料の性質・特徴のデータは記述されていない。そこで、概念辞書の分類カテゴリの属性の記述から類似分類名を推定し、それを対象として事例ベースで探索を行なう。概念辞書の節で述べたように、この分類名は分類木の終端ノードの親でもある。したがって、最初に概念辞書で見つかった分類名の代わりに、分類木上での上位の分類名を利用して探索することもできる。このための性質・特徴レベルの類似スコアを次のように定義する。

$$S_3^s = \sum_{i=1}^3 w_i g_i$$

ここで、 i は概念辞書の分類カテゴリの記述項目を表し、 $i = 1, 2, 3$ が相、状態、および性質・特徴をそれぞれ表すとする。 g_i は i 番目記述項目についての辞書の分類カテゴリと問題との間の一致の程度を、つまりスコアを表す。 w_i は S_1^s と S_2^s の場合と同様に、測定目的毎に与えられる g_i の重みで、値は1または0である。測定目的が g_i

に対して影響を与える場合に $w_i = 1$ 、そうでなければ $w_i = 0$ とする。この重みベクトルも S_1^s と S_2^s の場合と同様に、知識ベースとして用意されている。 S_3^s は性質・特徴の他に、相と状態の類似性を考慮した定義となっている。
スコアの計算

i 番目の辞書記述項目のスコア g_i は以下のように計算される。 f_i の場合と同様に、シソーラスを利用できる。

i. 相 (g_1)

相の値が一致している程度を評価する。

g_1 = 同一要素の数

前述のように、相はガラス、ゴム、結晶といった相状態を表す用語を要素とするリスト形式で表した集合として定義しているので、問題と分類カテゴリの相におけるそれらの同一要素の数によってスコアを与えている。たとえば、問題と辞書項目の相の記述がそれぞれ(ガラス、ゴム、結晶、融解)および(ガラス、結晶、融解)であるとする、 $g_1 = 3$ となる。

ii. 状態 (g_2)

$g_1 > 0$ の場合に、常温での相状態が同じであるかどうかを評価する。

$$g_2 = \begin{cases} 1, & \text{if 状態が同じ} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

たとえば、それぞれの状態がガラスと結晶ならば $g_2 = 0$ 、ガラス同士ならば $g_2 = 1$ となる。

iii. 性質・特徴 (g_3)

性質・特徴等の属性がどの程度類似しているかを、同一値を与える属性の数で定義する。

g_3 = 同一値を与える属性の数

たとえば、低密度ポリエチレン(LDPE)と高密度ポリエチレン(HDPE)の属性についての g_3 は表5から、耐衝撃性、耐水性、耐薬品性、および電気特性の4つの属性について同一値であると解釈されるので(シソーラスを利用する)、 $g_3 = 4$ となる。

表 5: LDPE と HDPE の性質・特徴

LDPE		HDPE	
性質特徴	内容	性質特徴	内容
結晶性	低い	結晶性	高い
耐衝撃性	強い	耐衝撃性	強い
耐水性	ある	耐水性	優れる
耐薬品性	優れる	耐薬品性	優れる
電気特性	優れる	電気特性	優れる
耐寒性	良好		
		剛性	ある
		表面強度	大きい
		軟化点	低い
		耐酸性	ある
		耐アルカリ性	ある
		溶剤	溶ける

(2) 測定目的の類似性

(a) 応用目的の類似性

応用目的は文(日本語, 英語)によって記述される。したがって, 2つの応用目的が類似しているか否かは文の意味の類似性によって判断しなければならないが, これを完全に自動的に行なうのは困難であるので, ここでは文の形態上まったく同一である場合に類似している(測定目的が一致している)とする。つまり, 応用目的については中間的な類似度は与えず, S_1^p は次のように定義する。

$$S_1^p = \begin{cases} 1, & \text{if two sentences} \\ & \text{matches exactly} \\ \text{unknown}, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$S_1^p = 1$ ならば, 次に述べる熱特性目的の類似性は評価せず, これを測定目的の類似度とする。 $S_1^p = \text{unknown}$ ならば, 熱特性目的の類似性を評価して, その結果を測定目的の類似度とする。

(b) 熱特性目的の類似性

熱特性目的は, 表 1 に示すような, 熱特性を表す用語の集合(実際にはリスト)によって記述される。これは, 文で表現される応用目的のいわば意味表現の一種であると考えられる。そこで, 事例と問題の熱特性目的がそれぞれ集合 T_c と T_p で表されるとする時, T_p に対する T_c の類似度 S_2^p を次のように定義する。

$$S_2^p = \frac{|T_c \cap T_p|}{|T_p|}$$

基本的には, $S_2^p = 1$, すなわち, $T_p \subseteq T_c$ となる場合に, T_c が S_2^p に類似していると解釈する。一方, 熱特性目的 T_p と T_c に対しては一般に集合の包含関係だけでなく, 他の関係を導入することもできる。熱特性を温度軸上に写像した場合, その軸上での順序関係という構造が生じて, その順序構造に関する類似性を定義することができる。たとえば, 結晶性高分子の場合は, その相として結晶状態が存在するので, 温度軸上での熱特性の出現順序はガラス転移, 結晶化, そして融解という順序となる。この様子を図 6 (a) に示す。この順序関係が結晶性高分子のすべてについて成立するならば, 2つの熱特性目的 T_c と T_p が,

$$T_c = (\text{ガラス転移, 融解})$$

$$T_p = (\text{結晶化})$$

と記述される場合, $T_c \cap T_p = \phi$ であるから $S_2^p = 0.0$ となるにもかかわらず, T_c は T_p の類似事例であると解釈できる。それは, T_c の持つ温度軸上の測定範囲が T_p で必要とされる測定範囲を包含していると考えられるからである。図 6 (b) にこの関係を示す。 T_p と T_c のこのような包含関係を次のように表す。

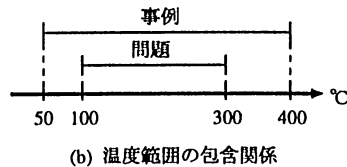
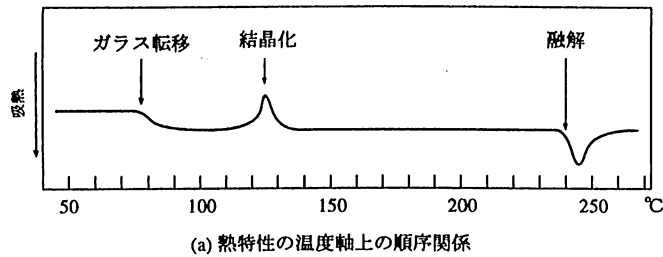


図 6: ポリエチレンテレフタレートのチャートと熱特性

$$T_p \leq T_c$$

したがって、熱特性目的に関しては $T_p \subset T_c$ または $T_p \leq T_c$ が成立する場合に問題 P と事例 C が類似していると解釈する。 $0 < S_2^p < 1$ となるような場合も、ある程度の類似性が主張できる可能性はあるが、これを自動的に判断するのは困難なので、本システムでは実装していない。

3.3 類似事例探索

前述のように、問題と事例との類似性は試料および測定目的の2つの観点から定義される。原則として2つの類似性が共に満たされる事例を類似事例として採用する。類似事例探索は次のように、それらの類似性評価を探索手順の中に組み込むことによって実行される。また、各段階での探索結果は、類似度情報と共にユーザに示され、事例検索システムとしてインタラクティブに処理することができる。

1 候補事例の探索

A 試料名による探索

問題に試料名が記述されていれば、同一試料名の事例を探す。見つけれ

ばそれを候補事例とする。これを事例ベース全体に対して行なうことにより、候補事例集合 S を作る。Dに行く。

試料名が記述されていないか、候補事例が1つも見つからない場合は、Bに行く。

B 分類名による探索

分類名は問題に必ず記述されている。それと同一の分類名を持つ事例を探して候補事例集合 S を作る。Dに行く。

候補事例が1つも見つからない場合は、Cに行く。

C 概念辞書による類似分類名を用いた探索

問題に直接記述した分類名の代わりに、問題で与えられた試料の性質・特徴のデータがあれば、それに類似した概念辞書中の分類カテゴリを探す。見つければ、類似度 S_3^p が最大の分類カテゴリを探索すべき分類名としてBに戻る。

概念辞書で類似の分類カテゴリが見つからないか、問題に性質・特徴データが与えられない場合は、探索に失敗して終了する。

D 応用測定目的による探索

問題に应用目的が記述されていれば、上で得られた候補集合 S の中

の事例の応用目的 (書いてあれば) と形態上のマッチングを行なう。完全に一致すれば、それを候補集合 R の要素とする。ここで、 Q を測定目的の類似性 S_1^p に関して得られる候補集合とすると、 $R \subseteq S \cap Q$ である。2 に行く。

応用目的が一致する事例がなければ、E に行く。

E 熱特性目的による探索

候補集合 S の事例の熱特性目的と問題のそれとの間で類似性を評価する。すなわち、 $T_p \subseteq T_c$ あるいは $T_p \supseteq T_c$ が成立するか否かを調べる。成立すれば、その事例を候補集合 R の要素とする。2 に行く。

熱特性目的が一致する事例がなければ、探索に失敗して終了する。これは、実際には次の 2 で処理される。

2 類似事例の選択

候補集合 R の要素が 2 つの観点で問題に類似した事例の集合を与える。 R のサイズに応じて次の処理を行なう。

- (a) $|R| = 0$ ならば、探索失敗で終了する。
- (b) $|R| = 1$ ならば、 R の中の事例を類似事例とする。
- (c) $|R| > 1$ ならば、試料情報の類似度 S_1^s または S_2^s を R の中の各事例について計算し、 S_1^s が最大となるものを類似事例とする。

4 問題と事例との差異の認識

探索事例を問題に適用するためには、必要に応じてその事例を修正しなければならない。この修正あるいは適合化処理は事例の記述項目について一律に決まるのではなく、問題に記述されている項目の値あるいはその組合せに依存して決まる。そこで、事例修正の前段階として、探索事例と問題との間で考慮すべき相違点を認識するという作業を行なう。記述の有無の組合せによって問題 (P) と事例 (C) の間の差は次のように分類される。

1. P と C の両方に記述があり、かつ値が同じである。
2. P と C の両方に記述があり、それらの値が異なる。

3. P に記述があるが、C にはない。

4. P に記述がなく、C にはある。

5. P と C の両方に記述がない。

ここで、1. と 5. については、差が検出されないので修正処理は実行されない。2. については、値の差は探索過程において類似度として算出されている。3. は事例に情報が存在しないので、処理の対象とならない。4. は、問題側の試料情報が不足していることを意味するが、可能であれば、ユーザに追加情報として入力を要求する。結局、修正の可能性があるのは 2. と 4. の場合である。追加情報の入力に続いて、試料の物質としての特徴認識と修正項目のマーキングを行なう。

4.1 試料情報の追加

問題の必須記述項目は、分類名と熱特性目的であり、それらに基づいて類似事例を探索することができる。しかし、事例修正は通常他の記述項目の値に依存するので、必要な試料情報が記述されていない場合は、この時点で、構成、生成過程、前処理、および形状の各項目の値を入力するようにシステムがユーザに要求する。試料情報の追加は、問題記述の詳細化を意味するが、ここで得られた情報は、次に述べる試料の特徴認識や事例修正などに利用される。この入力要求を動的に行なうために、次の形式のプロダクションルールを用意している。

```
if (( 試料名 | 分類名 ) and
    (( 構成 | 生成過程 | 前処理 | 形状 ) 項目の記述がない))
then ( 必要な項目の入力を要求
      する )
```

各項目値の必要性は試料が何であるかに依存するので、if 部に試料名または分類名を識別する条件を加えている。記号 | は選択を表すが、個々のルールは、必要な項目に対して入力を要求するようになっていて、記述のない項目すべてに入力を要求する訳ではない。

たとえば、ブレンドポリマーは構成要素、生成過程および前処理などによって測定条件を変更する必要があるので、これらの試料情報が得られないと適切な測定が行えない可能性がある。したがって、次のようなルールによって入力を要求する。

```

if ((ブレンドポリマー) and
    (構成, 生成過程, 前処理の
    記述がない))
then (記述がない項目の入力を
    要求)

```

4.2 特徴認識

問題の試料が有する性質・特徴をルールによって認識する。性質・特徴は概念辞書にも記述してあるが、概念辞書には試料が分類名レベルで識別された場合の固定的な特徴が記述されているのに対して、ここでは試料のその他の情報に応じて変化する特徴が認識される。言い換えると、試料情報が具体的に決まれば、それに対応してその試料が持つべき特徴を付与するという形で特徴認識する。すなわち、試料情報としては直接記述できないような特徴を個々の試料毎に知識として用意しておき、条件を満たす試料が問題として与えられた場合に、その特徴を詳細情報として動的に与える処理がここでの特徴認識である。したがって、特徴認識は探索事例と問題との両方の試料に対して行なわれる。得られた特徴情報は、事例修正に利用される。個々の試料情報に依存して特徴認識を行なうので、特徴認識用の知識は次の形式のプロダクションルールとしている。

```

if (試料情報) then (試料の
    特徴)

```

たとえば、2つの構成要素からなるブレンドポリマーは熱処理が施されているか否かによって、内部状態が1相あるいは2相になる。この熱処理の有無は、生成過程および前処理における処理操作内容の値として与えられる。したがってルールは次のようになる。

```

if (ブレンドポリマーの生成過程
    または前処理の処理操作内容 =
    熱処理)
then (試料は1相である)

```

```

if (ブレンドポリマーの生成過程
    または前処理の処理操作内容 ≠
    熱処理)
then (試料は2相である)

```

4.3 修正項目のマーキング

修正項目のマーキングは、問題と事例の試料情報および認識された特徴の差に基づいて、測定条件項目と其中的の要素に対して修正が必要となるものを判断し、この後で行なわれる修正処理のためにその項目に対してチェックをするということを意味する。探索事例に測定条件の項目が欠落している場合は当然、その項目がマーキングされるが、それ以外の修正の必要性は問題と事例の試料情報と特徴の差異の種類や値に応じて判断される。したがって、この判断を行なうための知識は、その差異を条件部とする次のようなプロダクションルールの形式で表現される。

```

if (問題と事例との試料情報の差
    異)
then (測定条件項目およびその
    項目の要素のマーキング)

```

たとえば、ブレンドポリマーは1相であるか2相であるかによって、開始温度および終了温度の設定値を変更する必要がある。すなわち、1相であれば測定したい熱特性について両者の熱特性が生じる温度の中間付近の測定を行えばよく、2相であれば両者の熱特性を共に含む温度範囲を測定しなくてはならない。また、問題と事例の物質が異なれば転移温度が異なるため、開始温度と終了温度を修正しなくてはならない。

```

if (問題と事例のブレンドポリ
    マーの相が異なる)
then (開始温度および終了温度
    をマーキング)

```

```

if (問題と事例のブレンドポリ
    マーの構成要素が異なる)
then (温度プログラムの開始温
    度と終了温度をマーキング)

```

5 修正

探索事例は問題に適合するように修正される。TASCにおいては、試料情報と測定目的に応じて測定条件の項目とその要素値を修正することになる。先述のように、修正すべ

表 6: ルールが決定する内容

測定条件		方針決定	範囲決定	詳細決定
測定装置		DTA / DSC		
温度プログラム	ステップ	設定する / 設定しない		
	開始温度	基準値より低く 基準値より高く etc	基準値-数値 / 数値範囲	数値
	終了温度	基準値より低く 基準値より高く etc	基準値-数値 / 数値範囲	数値
	昇温速度	ゆっくり下げる 速く上げる etc	数値範囲	数値
	保持時間	要 / 不要	数値範囲	数値
基準物質		要 / 不要	測定範囲で熱変化のしないもの	物質名
容器	材質		試料と反応しないもの etc	物質名
	形状		開放型 / 密閉型	
雰囲気ガス	種類		酸化性 / 還元性 / 腐食性 etc	気体名
	流量	静的 / 動的	数値範囲	数値
圧力		通常 / 高圧		
その他	質量	多く / 少なく	数値範囲	数値
	厚さ	厚く / 薄く	数値範囲	数値
	直径		数値範囲	数値
	形状		塊 / フィルム / 糸	

き項目はマーキングされている。修正はそのマーキングされた項目あるいは項目要素を条件部とするプロダクションルールによって行なわれるが、それらのルールはその動作部の抽象レベルに応じて、(1) 方針決定、(2) 範囲決定、(3) 詳細決定の3つのクラスに分けられる。この分類を表6に示す。表の中の空欄は対応するルールが用意されていないことを意味する。このようにルールを階層化することによって測定条件の設定を柔軟に行なうことが可能となる。たとえば、詳細決定のレベルでの推論に失敗して、測定条件の値が具体的に決まらなくても、方針決定と範囲決定のレベルでの推論結果はユーザに対するアドバイスとして利用可能である。

5.1 方針決定ルール

これは、条件部を試料情報と測定目的の記述とし、動作部をそれに基づく測定条件の基本的な方針の記述とする if - then 形式のルー

ルである。動作部は、範囲決定クラスのルールの条件部としても使われ、下で例示されるような定性的な記述によって与えられる。

例: 開始温度の方針決定ルール

```
if ( ブレンドポリマーのガラス転移の測定で試料が1相である )
then ( 2つの構成要素のガラス転移温度をデータベースによって調べ、
```

```
両者のガラス転移温度の中間値より低い値にする )
```

例: 昇温速度の方針決定ルール

```
if ( プラスチックのガラス転移である )
then ( 昇温速度を大きくする )
```

5.2 範囲決定ルール

先の方針決定ルールで決定された方針の具体化の中間段階として、測定条件の数値範囲を与える。範囲が数値で示せない場合は、用語によって定性的に記述する場合もある。

例: 昇温速度の範囲決定ルール

```
if ( ( 分類名 = プラスチック ) and
    昇温速度を大きくする )
then ( 昇温速度を 10~20[°C/min]
      の範囲にする )
```

この例では、条件部に方針決定ルールの動作部の記述内容である「昇温速度を大きくする」が条件の一部として記述されている。

5.3 詳細決定ルール

これは測定条件をできるだけ正確な値として決定するためのルールである。測定条件の項目は表 2 に示す通りであるが、これらは必ずしも独立ではない。したがって、確定済みの条件がある場合は、それと矛盾しないように決定しなければならない。ルールの条件部に測定条件が記述されている場合は、その条件部がそれまでに確定した測定条件と一致することが要求されるので、自動的に整合性が保証される。

例: 昇温速度の詳細決定ルール

```
if ( 試料量 < 5 [mg] ) then (
    昇温速度 = 20 [°C/min] )
```

この例では、条件部に質量の範囲を指定しているので、それを問題の質量とマッチングすることによって、問題の測定条件としての質量と昇温速度が共に満たされることになる。

探索事例と問題の差の認識から事例修正に至る処理の流れを図 7 に示す。

6 システム構成

TASC の全体的なシステム構成を図 8 に示す。類似事例探索、問題と事例の差異認識、事例修正の各モジュール、事例ベースへのアクセスなどは推論機構モジュールによって制御

されている。事例探索モジュールは、分類木、シソーラス、概念辞書および事例ベースを参照し、事例修正モジュールは方針決定、範囲決定、詳細決定の各ルールベースを参照している。高分子転移温度データベースはガラス転移と融解の温度を数値範囲で示したものであり、容器材質耐熱温度データベースは材質の耐熱温度についてのデータベースで、いずれも類似事例探索や事例修正において必要に応じて参照される。たとえば、前節で例示した、開始温度の方針決定ルールの中で「プレンドポリマーのガラス転移温度」と記述されているが、これは高分子転移温度データベースを参照することによって得られる。

7 結論

熱分析の測定条件を、測定対象である試料の物質としての情報と測定目的との 2 つの観点から推定するシステムを事例ベース推論 (CBR) に基づいて構築した。CBR は大量の具体的なデータに基づいて問題解決を行う記憶に基づく推論 (Memory-Based Reasoning; MBR) や比較的少数の抽象的な規則に基づいて問題解決を行う規則に基づく推論 (Rule-Based Reasoning; RBR) の中間に位置する、類推によく似た推論方式と考えられる [10]。その推論方式の性格から、問題の整理が進んでいない、あるいは困難な熱分析の測定条件のような問題に対しては CBR のような低次の情報を包含して扱える推論方式が適していると考えられる。専門家が測定条件を設定する場合も、自分の経験した測定の中の類似したケースを根拠とし、必要に応じてデータや知識を参照することによって新しい問題に対する解を与えていると思われる。この問題を解決するのに、試料情報と測定目的を入力データとして測定条件をアルゴリズム的に算出する効率的な方法は知られていないと思われる。一方、経験則を単純なルールベースとして推定を行なう方法では、現実の問題がほとんどの場合にルールの条件部に正確には一致しなくなるので、そのための解決法が要求される。本システムでは、推論方式として CBR を用い、シソーラスや概念辞書などを導入することによってこれを実現した。これは、たとえば、CBR と RBR や MBR など他の推論方式とを統合した問題解決の 1 つと位置付けることもできる [5, 11]。CBR の実

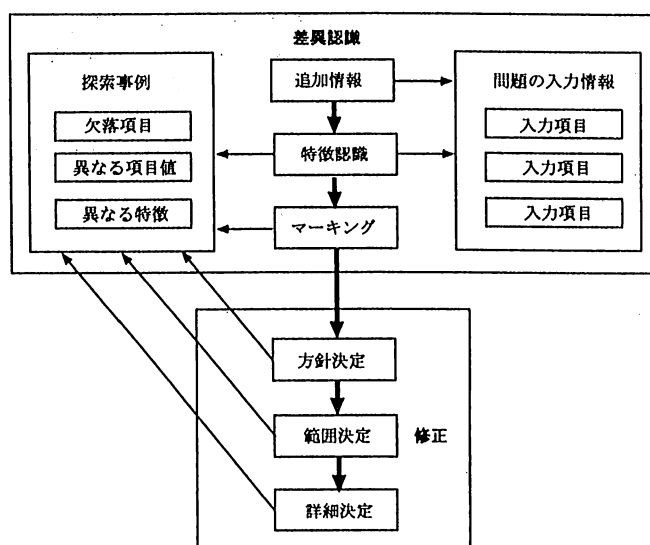


図 7: 事例と問題の差異認識と修正処理のフロー

現には事例表現，類似性の定義，事例修正の機構などを問題毎に最初から考える必要があり，実装のための一般的な手法が確立しているわけではない．TASC においても，事例表現と類似性の定義を試料情報と測定目的という一見独立した2つの観点から与え，類似事例探索に反映させている．また，事例修正はRBRに基づいており，様々の手法を融合したシステムとなっている．すなわち，類似事例の探索は試料名や分類名と測定目的といった名称レベルのマッチングで行なうことによって粗く候補事例を収集する．次に，種々の観点からの類似性を導入することによって候補事例の間に確からしさの順位をつける．そして，利用すべき類似事例を修正するために，具体的な属性値を条件とするルールベースを利用する．名称に関してはシソーラス，分類木，概念辞書を用意し，またルールベースは条件部の抽象度によって3段階に階層化することによって，マッチングにおける柔軟性あるいはロバスト性を確保したことなどが本システムの特徴となっている．

参考文献

- [1] 神戸博太郎, 小澤丈夫. 新版熱分析, 講談社, 1992.
- [2] 日本熱測定学会・応用熱測定研究グループ 編. 応用熱分析, 日刊工業新聞社, 1996.
- [3] 田中浩一, 西本右子, 中山堯: 事例ベース推論による熱分析支援システム, 第19回情報化学討論会講演要旨集, pp.41-44(1996).
- [4] David B. Leake: Case-Based Reasoning AAAI Press, Menlo Park, CA, 1996.
- [5] 小林重信: 事例ベース推論の現状と展望, 人工知能学会. Vol.7, No.4, pp.559-566(1992).
- [6] プラスチックの転移温度測定方法 K7121, 日本工業規格, 1987.
- [7] 日本分析化学会, 高分子分析研究懇談会. 高分子分析ハンドブック, 紀伊國屋書店. 1995.

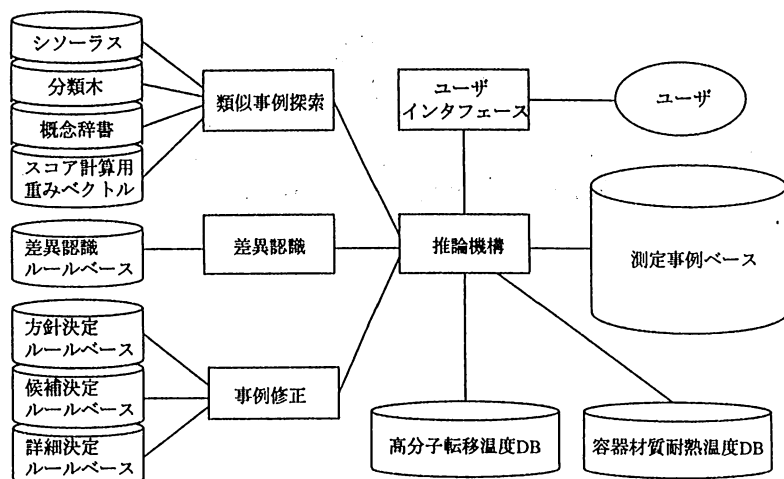


図 8: システム構成

- [8] 日本熱測定学会. 新熱分析の基礎と応用.
リアライズ社. 1989.
- [9] Michael Gruninger and Mike Uschold:
Ontologies: Principles, Applications and
Opportunities, Thirteenth National
Conference on Artificial Intelligence,
Tutorial SA1, 1996.
- [10] 松原仁. 推論技術の観点から見た事例に
基づく推論, 人工知能学会誌. Vol.7, No.4,
pp.567-575(1992).
- [11] 渡辺博芳, 奥田健三. ルールベース推論
と事例ベース推論の統合化の一手法, 情
報処理学会研究会人工知能. 97-2. pp.11-
20(1994).

中山 堯 (正会員)
理学博士
神奈川大学理学部情報科学科 教授
E-mail: nakayama@info.kanagawa-u.ac.jp

(1997年11月17日受付)
(1998年4月23日採録)

著者紹介

田中浩一 (非会員)
神奈川大学大学院理学研究科
(現在, 日本電信電話株式会社・理学修士)
E-mail: ko1@libra.nn.info.kanagawa-u.ac.jp

西本右子 (非会員)
理学博士
神奈川大学理学部化学科 助手
E-mail: nishimoto@chem.kanagawa-u.ac.jp