

本資料は 年 月 日付で登録区分、

変更する。

01.10. 4

[技術情報室]

# 高レベル放射性廃棄物処理処分に対する 高度基盤技術の適用に関する調査研究(Ⅲ)

(動力炉・核燃料開発事業団 委託研究成果報告書)

1992年2月

財団法人 原子力環境整備センター

本資料は、核燃料サイクル開発機構の開発業務を進めるために作成されたものです。したがって、その利用は限られた範囲としており、その取扱には十分な注意を払ってください。この資料の全部または一部を複写・複製・転載あるいは引用する場合、特別の許可を必要としますので、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村大字村松4番地49  
核燃料サイクル開発機構  
技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:  
Technical Cooperation Section,  
Technology Management Division,  
Japan Nuclear Cycle Development Institute  
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184  
Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)

さい。また今回の開示目的以外のことは使用しないものとします。

本資料についての問い合わせは下記に願います。

〒107 東京都港区赤坂1-9-13  
動力炉・核燃料開発事業団  
技術協力部 技術管理室



社内資料  
PNC 1561 92-001  
1992年2月

## 高レベル放射性廃棄物処理処分に対する高度基盤技術の適用に関する調査研究（Ⅲ）

伊加利勝晤\*，渡辺弘行\*，稻垣裕亮\*

### 要旨

我が国では、高レベル放射性廃棄物は地層処分することを基本方針としており、それが実際に処分可能となるまでには、関連技術の開発も含めて相当の時間が必要と考えられる。したがって、その間に諸般の将来技術（高度基盤技術）の開発の進展により、現在考えている処理処分技術に大きなブレークスルーをもたらすような技術革新が起こり得る可能性もある。

このような観点より、本調査研究では、地層処分に関連し得る高度基盤技術を抽出し、それらの研究の進展度を調査して、現在の処理処分システム・シナリオへのそれら技術の適用インパクトを研究するとともに、今後の研究開発計画の策定に資するための検討を行った。

本報告書は、平成3年度の研究成果をまとめたものであり、以下の内容について記述している。

- ①化学的シミュレーションに関する手法、モデルの概要や事例についての調査結果及びその課題や展望についての検討結果。
- ②人工知能技術の現状や実用化状況についての調査結果及びその課題や展望についての検討結果。
- ③地球化学プロセス研究の現状やそれに係わるデータベースや連成モデル研究の現状や動向についての調査結果。

---

本報告書は、財原子力環境整備センターが動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究の成果である。

契約番号：030D0175

事業団担当部課室および担当者：環境技術開発推進本部処分研究グループ  
(増田純男)

\* : システム開発調査室



OFFICIAL USE ONLY  
PNC EJ1561 92-001  
FEBRUARY, 1992

## Study on Application of Highly Advanced Basic Technology in the Field of High-Level Radioactive Waste Management(III)

Shogo Ikari \*  
Hiroyuki Watanabe \*  
Yusuke Inagaki \*

### Abstract

The Japanese waste management policy has been to dispose of High-Level radioactive waste resulted on the course of spent fuel reprocessing in underground geological repositories. It will take long time to develop technology related to geological disposal for the execution of this policy. It is expected that the extension of future technology, so called Highly Advanced Basic Technology, would bring a technological innovation which give a breakthrough to High-Level radioactive waste management.

Therefore, in this study, highly advanced basic technology which is related to disposal was selected, and an advancement of research and development of the technology was surveyed. It was also estimated for the impact which would be brought by the application of the technology on waste management program. Research and development plans for studying of it would be made.

This report contains the result of the fiscal year 1991 of this study. The followings are the heads of the result of this survey.

- The outline and the view of method and model on chemical simulation.
- The outline and the view of the technology on AI(Artificial Intelligence).
- The outline and the view of a study on Earth-Chemical.

---

Work performed by Radioactive Waste Management Center, julidial fundation, under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

PNC Liaison : Radioactive Waste Management Project, Isolation System Research Program (Sumio Masuda)

\* : System Engineering Division

目 次

まえがき .....	1
1. 化学的シミュレーションの調査 .....	3
1.1 概要 .....	3
1.1.1 データベース .....	3
1.1.2 コンピュータ計算技術 .....	5
1.2 コンピュータ計算技術による理論的手法 .....	8
1.2.1 電子レベル手法 .....	8
1.2.2 原子・分子レベル手法 .....	9
1.3 利用形態の概要 .....	11
1.3.1 データベース .....	11
1.3.2 コンピュータ計算技術 .....	16
1.4 適用事例 .....	29
1.4.1 データベース .....	29
1.4.2 コンピュータ計算技術 .....	31
1.4.3 ソフトウェア .....	44
1.5 課題と展望 .....	50
1.5.1 現状での課題 .....	50
1.5.2 今後の展望 .....	51
2. 人工知能技術の調査 .....	54
2.1 概要 .....	54
2.1.1 人工知能技術と関連した技術 .....	54
2.1.2 研究開発の経緯 .....	54
2.2 基礎技術 .....	57
2.2.1 知識 .....	57
2.2.2 推論 .....	60
2.2.3 ファジィ理論 .....	63

2.2.4 ニューロ	65
2.2.5 A I (E S) , ファジィ, ニューロの比較	69
2.3 言語	74
2.3.1 L i s p系	74
2.3.2 P r o l o g系	74
2.3.3 オブジェクト指向系	75
2.3.4 C言語系	75
2.4 マシン	76
2.4.1 ワークステーション	76
2.4.2 第五世代コンピュータ	76
2.4.3 ファジィコンピュータ	80
2.4.4 ニューロコンピュータ	82
2.5 ツール	86
2.5.1 エキスパートシステム構築ツール	86
2.5.2 ファジィツール	88
2.5.3 ニューロツール	88
2.6 応用分野	101
2.6.1 エキスパートシステム	101
2.6.2 理解システム	102
2.6.3 機械翻訳	105
2.6.4 知能ロボット	107
2.6.5 その他	111
2.7 実用化状況	113
2.7.1 概論	113
2.7.2 エキスパートシステム	115
2.7.3 ファジィシステム	165
2.7.4 ニューロシステム	172
2.7.5 その他	179
2.8 課題と展望	183
2.8.1 課題	183

2.8.2 今後の展望	184
3. 地層中での物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討	187
3.1 概論	187
3.2 地球化学プロセス研究の現状	189
3.2.1 地熱分野での現状	189
3.2.2 地球化学シミュレーションコードの現状	193
3.2.3 放射性廃棄物処分での地球化学プロセス研究の現状	196
3.2.4 CHEMBALプロジェクト	201
3.3 地球化学データベースの現状と動向	204
3.4 連成モデル研究の現状と動向	207
3.5 まとめ	212
あとがき	213
謝辞	214
参考文献	215
付録	225
• 付一 1 地球化学プロセス研究における最近の知見	
1. 「地層中での物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討」 慶應義塾大学 鹿園直健	226
2. 「地層中での物質移動の化学的シミュレーション —現在の到達点と今後の進むべき方向—」 岡山大学地球内部研究センター 千葉 仁	237
• 付一 2 化学的シミュレーション及び人工知能技術に関する用語	
	247

## 図 目 次

図-1	物質間距離と反応	6
図-2	標準的なエキスパートシステム基本機能構成	57
図-3	事例ベース推論システムの構成	61
図-4	メンバーシップ関数の例—適度な湯加減	63
図-5	ニューロンモデル	66
図-6	A I (E S), ニューロ, ファジィの各技術の融合	72
図-7	画像理解システムの構成	102
図-8	画像理解の基礎と応用	102
図-9	電子化辞書プロジェクトの開発スケジュールと電子化辞書の構成	105
図-10	ロボットの世代分けとその特徴	108
図-11	知能ロボットの構成	108
図-12	A I 導入事業所の導入システム利用状況	113
図-13	エキスパートシステムの利用状況	116
図-14	性能評価計算の概略図	189
図-15	部分平衡モデル	189
図-16	p H測定温度における化学種組成の計算フロー	190
図-17	貯留層温度における熱水の化学種組成の計算フロー	190
図-18	コロイド放出シナリオ	199
図-19	物質移動問題での化学反応の分類	209
図-20	地球化学感度解析のシナリオ	210
図-21	平衡を仮定した熱力学データベースで表される 化学反応プロセスと処分の安全評価の期間	210

表 目 次

表一 1	データベースの利用形態概要	11
表一 2	電子レベル手法の利用形態概要	16
表一 3	原子・分子レベル手法の利用形態概要	18
表一 4	データ利用手法の利用形態概要	25
表一 5	データベースの事例	29
表一 6	電子レベル手法の事例	31
表一 7	原子・分子レベル手法の事例	34
表一 8	データ利用手法の事例	42
表一 9	関連ソフトウェア一覧	44
表一 10	A I の研究開発経緯	55
表一 11	初期のころの海外の代表的なエキスパートシステム	55
表一 12	ファジィ理論の研究開発の経緯	63
表一 13	ニューラルネットワーク技術の研究開発の経緯	66
表一 14	A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較	71
表一 15	第五世代コンピュータの研究開発経緯	78
表一 16	ファジィコンピュータの国内の研究開発の経緯	80
表一 17	ニューロコンピュータの国内の研究開発の経緯	83
表一 18	代表的なニューロチップの性能	84
表一 19	国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール	88
表一 20	国内で販売されている主なファジィ・ツール	97
表一 21	国内で販売されている主なニューロ・ツール	99
表一 22	日本の産業用ロボットの分類	108
表一 23	極限作業ロボット研究項目	109
表一 24	産業分野別エキスパートシステム適用事例	126
表一 25	ファジィシステムの適用事例	166
表一 26	ニューロシステムの適用事例	173
表一 27	主な機械翻訳システム	179
表一 28	化学種組成計算プログラム	194

表—2 9 EQ 3／6 の構成	194
表—3 0 吸着データの変数	197
表—3 1 EQ 3／6 の固相溶解モデル	205
表—3 2 ゼオトン強度におけるアメリシウム(III) の Formation Constants	205

## まえがき

我が国では、高レベル放射性廃棄物は安定な形態に固化した後、30年から50年程度冷却のための貯蔵を行い、その後深地層に処分するとの基本方針が定められている。

ところが、このように放射性廃棄物の処理から処分に至るまでの時間的な隔たりが大きいことを考慮すると、基盤技術の開発の積み重ねによって、現在の処理処分技術体系に大きな波及効果を与える技術的革新が創出されることもあり得る。したがって、現時点で考慮されている処分技術は、実際の処分時点までに相当程度変遷する可能性があると考えることが出来る。

このような観点から、本調査研究では、地層処分に適用することにより既存技術にブレークスルーをもたらすような将来技術（高度基盤技術），並びに現時点で想定されている地層処分とは基本的に異なる処分概念を実現する上で、クリティカルとなる技術領域を抽出し、それらの研究開発進展度について調査することにより、現在想定されている処理処分システム・シナリオに対する当該基盤技術の適用によるインパクトを検討し、高度基盤技術の地層処分への適用に関する研究開発計画の検討に資することを目的としている。

本調査研究は、3年計画で実施されており本年度はその最終年度にあたるが、昨年度までの調査検討項目は次のようになる。

- ①処理処分に係わる要素技術の整理
- ②高度基盤技術の現状調査
- ③適用対象高度基盤技術の抽出及び技術調査
- ④高度基盤技術の適用インパクトの検討
- ⑤適用概念検討で対象とする高度基盤技術の抽出
- ⑥技術開発進展予測手法に関する調査検討

本年度は、昨年度までの成果を踏まえ、次の項目について調査検討を行った。

- ①化学的シミュレーションの調査
- ②人工知能技術の調査
- ③地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討

## 1. 化学的シミュレーションの調査

放射性廃棄物の化学的な挙動をシミュレートする手法を開発する場合の研究課題の抽出に資するため、化学的シミュレーションの基礎データとなる化学関係のデータベースを調査するとともに、シミュレーションを行う際の基礎となる計算の理論やその手法等について調査した。

化学計算としては、化学反応、イオン交換、分子移動等を対象としたものが考えられるが、本調査では、材料工学分野に適用が可能な化学分野を調査の基本対象とし、これと関連した化学分野も含めて、データベースや計算の理論・手法等について調査を行い、以下にまとめた。

### 1.1 概要

材料工学の分野にて種々の計算の対象としているのは、有機合成や蛋白質合成等の化学合成や腐食および構造解析等が主なものとなるが、それらの解を得るためにコンピュータの様々な能力が利用される。この場合に重要となるのは、関連するデータと計算に用いる理論や手法である。本節では、これらのデータベースとコンピュータ計算技術の現状等について概説する。

#### 1.1.1 データベース

データベースの位置付けとしては、要求性能をみたすような物質を検索し、化学物質や各種材料の開発における基礎データを得ることにあり、シミュレーションの基礎となるものである。

その為、化学構造や熱物性などの物理的性質や反応性などの化学的性質、および薬理活性や安全性などの生物学的性質といった化学分野でのデータベースが、これまで種々整備されてきている。また、材料工学の分野においても化学関係の文献検索は重要であり、それらの文献データベースの検索は大学、企業を問わずよく利用されている。

これらのデータベースは、化学構造や化学反応等についての化学合成データベースと材料の特徴等についての材料データベースに大別され、その内容により次のように分類される。

##### ①化学合成データベース

- a. 化学構造データベース
- b. 化合物物性データベース
- c. 合成反応データベース
- d. スペクトルデータベース
- e. 化合物総合データベース

## ②材料データベース

それぞれのデータベースについてその概要を述べる。

### (1) 化学合成データベース

#### (a) 化学構造データベース

化合物の構造に関する諸データをデータベース化したものである。材料開発にとって最も重要な構造データは結晶構造のデータである。

#### (b) 化合物物性データベース

化合物の物性に関する諸データをデータベース化したものである。化合物に関する種々の特性（物理的、化学的、生物学的性質等）を予測することは材料開発にとって最も直接的な目標である。

化合物の種々の物性値を集積したデータベースとしては多数のものがこれまでに構築されている。

#### (c) 合成反応データベース

石油化学産業や医薬品製造業では、目的の有機化合物の反応性に関するデータは最適な化合物合成経路や原材料を探索する上で重要である。合成方法の研究を効率的に迅速に行うためと経費を削減する目的のためにコンピューターを用いた支援システムが必要とされてきた。目的別に、化合物ごとの個別の反応例を多数収録した反応データベースと、個別の反応例から得られた一般則を用いて合成経路を検索する合成設計システムとに分けられる。

また、推論システムと知識ベースを応用したシステムがみられるが、これもデータベースの一分野とみなしここに含めて考える。

#### (d) スペクトルデータベース

赤外吸収スペクトル（IR），核磁気共鳴スペクトル（NMR）などを測定して，このデータから化合物の構造を推定する技術である<sup>8,5)</sup>。合成した材料の構造，化学式の確認を行うために必要である。多数の化合物についてのスペクトルを集積してデータベースを構築し，未知化合物のスペクトルに一致するものを検索するシステムと，人間がスペクトルを解析して未知化合物の構造を推定する過程をコンピューターに模擬させる構造解析システムとがある。

#### (e) 化合物総合データベース

(a)～(d)までの化合物に関する構造，物性，反応性，スペクトルなどの種々のデータベースを統合化し，どのデータベースへも容易にアクセスできるようにした総合的なデータベースが開発されている。

### (2) 材料データベース<sup>4,1)</sup>

材料の特徴毎にその性質をデータベース化したもの。産業の各分野で安全性と高性能を追求する過程での材料の役割の増大などによって以下のように特徴づけられている。

- ①材料の使用条件によって，システムに大きな違いがある。
- ②材料の多様性を網羅するシステムはほとんどなく，個別の目的別にシステムが構築されている。

#### 1.1.2 コンピュータ計算技術

コンピュータ計算技術を利用して計算を行う手法としては，計算対象に応じた理論を用いて解を推定する手法と，過去のデータ等を利用して解を推定する方法の2つに大別される。

以下にそれらの概要を述べる。

#### (1) 理論的手法

分子軌道法や分子動力学等の理論に基づいて，物質の構造や密度などの様々な性質

を計算によって算出する手法である。近年のコンピュータ計算能力の飛躍的な進展によって、化合物に関する種々の特性を計算によって推定する技術が化学物質、機能材料の開発に用いられるようになってきた。

計算手法は、対象となる物質の物質間距離と反応時間とで分類することが出来るが、材料工学の分野にて対象とするのは「電子レベル」「原子・分子レベル」となる。図一1にこの場合の物質間距離と反応時間を示す。

## (2) データ利用手法<sup>3) - 12)</sup>

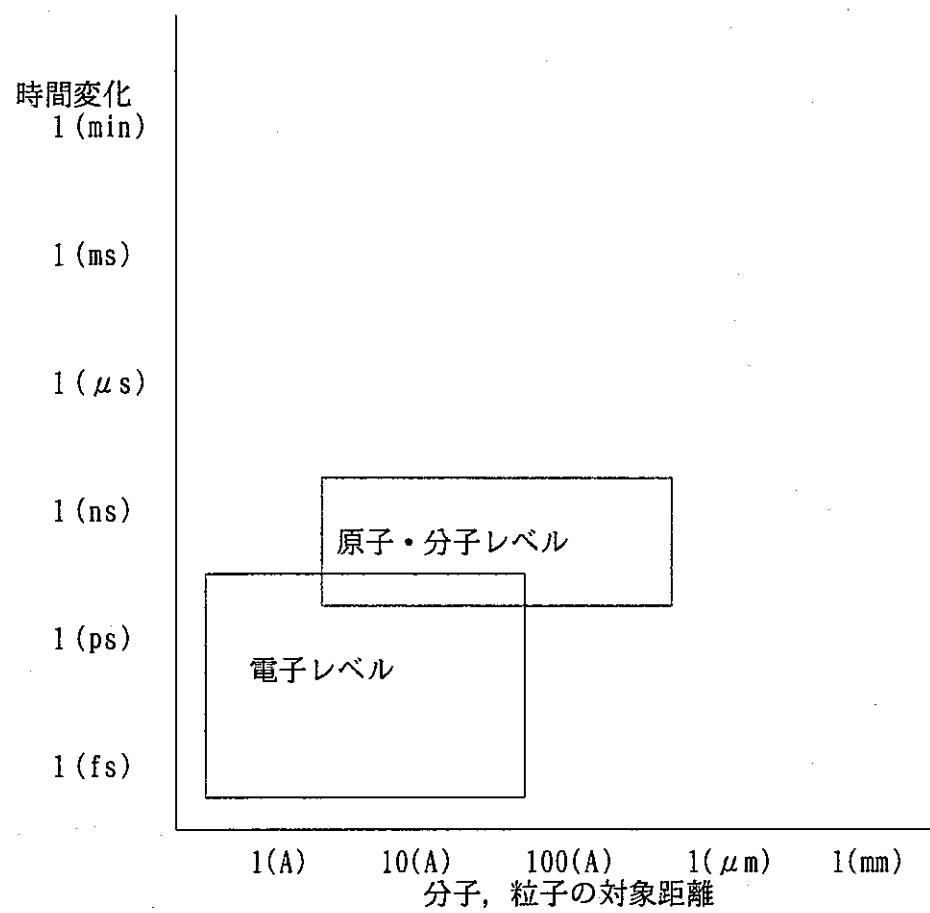
個々の対象に関する個別的なデータを整理、体系化し、その中から抽出して得られた何らかの一般則や、あるいはこれまでに知られている経験則を集積し、それらを用いて推論する技術はコンピュータ利用技術の中での比較的新しい技術であるが、化学の分野でもこのような推論技術の応用開発が行われている。

化学の分野でこれまでに開発してきた応用システムとしては、化学反応に関する一般則を利用して目標とする化合物の合成経路を設計する合成設計システムや、スペクトルの解釈に関する経験則を利用して未知化合物のスペクトルから構造を推定するシステムなどがある。最近では一般則や経験則をルールとして知識ベースに格納して推論を行う知識ベースシステムの開発が化学の分野でも行われはじめているが、まだ現在のところは開発途上にあるといえる。

このようなシステムは、現在次の2つの分野にて開発が進められている。

①分子設計

②材料設計



図—1

物質間距離と反応時間

## 1.2 コンピュータ計算技術による理論的手法

前節において、コンピュータ計算技術による理論的手法の概要について述べた。

本節においては、この理論的手法に含まれる各種手法の理論に関する概観と特色等について述べる。各種手法は次のように分類される。

### ①電子レベル手法

- a. 分子軌道法
- b. エネルギーバンド法

### ②原子・分子レベル手法

- a. モンテカルロ法
- b. 分子力学法
- c. 分子動力学法

#### 1.2.1 電子レベル手法

##### (1) 分子軌道法

Schroedinger方程式を解くことによって、原子核や電子の挙動に関する第一原理に基づいて分子内の電子状態を計算し、そのエネルギーを極小化させることによって分子構造や電子状態を決定するという方法である。この分子軌道法は、電子状態の計算に必要な電子積分の手法によって、非経験的分子軌道法と半経験的分子軌道法の2つに大別される。

非経験的分子軌道法は、計算精度は高いものの計算に要する時間が長いため、あまり大きな分子の計算には適さないという欠点がある。しかし、最近ではコンピュータの計算能力が大幅に向上し、特にスーパーコンピュータがかなり身近に利用できるようになったことにより、以前と比べるとかなり大きな分子の計算も現在では容易になっている。そのため、最近では導電性高分子などの機能性新素材の開発を目指して、かなり大きな分子の非経験的分子軌道計算を行う企業も現れている。

これに対し、半経験的分子軌道法では、電子積分を経験的パラメータによって評価することで計算時間の短縮を図っており、非経験的分子軌道法と比べると計算時間は1桁以上速くなり大きな分子の計算も容易である。しかし、この方法は非経験的分子軌道法より計算結果の精度が低いという難点がある。

したがって、計算する分子の大きさと要求する結果の精度に応じて2つの方法が使い分けられているのが現状である。たとえば、薬理活性物質や機能材料などの開発においては、非経験的分子軌道法では計算できないほどの大きな分子を取り扱うことが多いため、開発現場では半経験的分子軌道法の方がよく用いられている。

## (2) エネルギーバンド法

分子軌道法と同様に、Schroedinger方程式を解くことによって結晶内の電子の挙動に関する第一原理に基づいて結晶内の電子状態を計算し、そのエネルギーを極小化させることによって結晶の状態を決定するという方法である。電子状態の計算に必要な電子積分手法は、有効一電子ポテンシャルを密汎関数法（電子軌道を密度によって表現）による。なお、そのポテンシャルは結晶の並進性対象性を持っている。

適用対象は、金属や半導体などの安定構造や電子構造の計算であるが、全ての結晶内の電子を扱う方法と結晶内の価電子のみを扱う2つの方法に大別される。

分子軌道法と比べると研究例は少ない。

### 1.2.2 原子・分子レベル手法

#### (1) モンテカルロ法

ある初期配置におかれている粒子の集合に対し、個別の粒子の位置を乱数を用いてランダムに変化させ、収束条件にあてはまるまで反復計算を行うものであり、その反復回数は数千から数万回におよぶ。そのため、モンテカルロ法では、平衡状態のデータに適用が限られることと、解析にあたっては、適切な分子間の相互ポテンシャルが必要である。また、アルゴリズム上での課題として質の良い乱数を発生させる必要がある。

モンテカルロ法の適用対象は、粒子間に外力や相互作用がある時の状況を推定する場合か、粒子位置を変位させることにより構造を解析する場合の2つが主なものとなる。

#### (2) 分子力学法

分子内の原子の経験的な力場を仮定してエネルギーを計算し、このエネルギーを極

小化させることによって分子構造を決定するという方法である。この方法では分子軌道法のような電子状態の計算がないため、計算時間は分子軌道法に比べて、非経験的分子軌道法より2桁以上、半経験的分子軌道法より1桁以上速くなる。したがって、薬理活性物質や機能材料などの実用的な化合物の設計のための構造計算技術としてよく用いられている。また、タンパク質などの生体高分子の立体構造解析にも用いられている。

しかし、分子軌道法のように電子状態に関する知見は得られないという欠点があるため、導電性高分子や超電導セラミックスなど、電子状態が関係するような機能材料の開発には向きであり、これらの材料の開発のためには分子軌道法を用いる必要がある。

### (3) 分子動力学法

系内の個々の粒子に対して、他の粒子からの相互作用を求め、それに基づいて各粒子の時間的な挙動を計算する方法である。したがって、静的な状態だけでなく初期状態からの時間変化、構造変化も計算可能である。算出された粒子の位置と運動量から物質の構造、移動速度が求められ、さらに統計力学的計算から数々の物性値や熱力学的諸量が求められる。例えば、溶液状態や結晶状態など、分子集合体についての構造予測もこの方法では可能である。

分子動力学計算は一般にかなり長時間の計算を要し、スーパーコンピュータの利用が適している。そのため、この分子動力学法は、スーパーコンピュータの計算処理能力の向上とあいまってこれから大いに利用が広まると考えられる。

### 1.3 利用形態の概要

本節では、これまでに紹介した各種のデータベースやコンピュータ計算技術のそれぞれの利用形態の概要について述べる。

#### 1.3.1 データベース

データベースの利用形態の概要を表-1に示す。

表一 1 データベースの利用形態概要(1/4) 18) 20) ほか

種 別	分 類	利 用 形 態 概 要
化学構造 データベース	有機化合物結 晶構造 データベース	有機化合物の結晶構造に関するデータをデータベースとして構築されたものであり。イギリスのケンブリッジ大学で構築したデータベース(CCDC)やドイツで構築したデータベース(ICSD)等があり、その収録化合物の数はそれぞれ約7万と約3万である。
	タンパク質結 晶構造 データベース	タンパク質の結晶構造に関するデータをデータベースとして構築されたものであり。アメリカのブルックヘブン国立研究所で構築したデータベース(PDB)があり、その収録タンパク質の数は約300である。
化合物物性 データベース	熱物性 データベース	比熱、生成熱など熱力学関係の各種のデータを集積したデータベースがJICSTなどで構築され、オンラインの利用も可能である。
	安全性 データベース	化合物の安全性は化学材料を実用化する上で重要な項目であり、毒性、分解性など種々の安全性関連のデータを集積したデータベースが内外で構築されている。海外で構築された代表的なものにNUMERICAがあり、わが国からもオンラインで利用できる。国内で構築された安全性データベースとしては、化審法関連のKASHINや、環境関連化合

表一 1 データベースの利用形態概要(2/4) 18) 20) ほか

種 別	分 類	利 用 形 態 概 要
化合物物性 データベース		物のデータを収録した J E C D I S などがある。
	物性推算 システム	構造データと同じようにデータベースに収録されていない化合物の物性値を求めるためには計算技術が必要となる。しかし分子軌道法や分子力場法はまだ分子の物性値を推算できる段階ではないため、この目的には別の手法が用いられる。それはいわゆる原子団寄与法と呼ばれる経験的方法である。このような手法で各種の物性値を推算するシステムが多数開発されて多数開発されており、代表的なシステムとしてのとしては C H E T A H, E R O I C A, C L O G P などが上げられる。
合成反応 データベース	合成反応 データベース	化合物の反応例を収録してデータベースを構築し、これから合成経路を検索できるようにしたシステムとしては、海外で構築されたものとしては R E A C C S, S Y N L I B, O R A C などがあり、また国内で開発されているものとしては C O R E S がある。
	合成設計 システム	合成化学者（一般に有機化合物を取り扱うことが多い）が経験・研究により蓄えている合成法に関する経験則や、個別的な反応例から

表一1 データベースの利用形態概要(3/4) (19) 20) ほか

種 別	分 類	利 用 形 態 概 要
		抽出された一般則をコンピューターに集積し、最適な合成経路や原材料を検索するシステムである。欧米ではかなり以前から開発が行われており、代表的なものとしてはL H A S A, S E C S, E R O Sなどがある。
スペクトル データベース	構造推定 システム	人間がスペクトルのパターンから未知化合物の構造を推定する過程をコンピューターにまねさせるシステムが構造推定システムであり、この分野についても欧米ではかなり以前から開発が行われている。代表的なシステムとしてはD E N D R A Lがよく知られており、わが国で開発されているシステムとしてはNMRスペクトルを主に利用するC H E M I C Sがある。

表一1 データベースの利用形態概要(4/4) <sup>41) 87)</sup>

種 別	分 類	利 用 形 態 概 要
材料 データベース	材料 データベース	<ul style="list-style-type: none"> <li>・原子力プラント材料データベース 原子炉の種類別、材料特性別にデータを蓄積している。</li> <li>・その他の材料データベース 材料開発等の研究用のデータベースが1989年6月マテリアルデータベース編集委員会によってその必要とされる機能や現状について調査・検討されている。国内では、JICSTから、1990年3月より公衆回線によるオンラインサービスを開始している。</li> </ul>

### 1.3.2 コンピュータ計算技術

#### (1) 理論的手法

理論的手法の利用形態の概要として、電子レベル手法によるものを表一2に、原子  
・分子レベル手法によるものを表一3にそれぞれ示す。

表—2 電子レベル手法の利用形態概要(1/2) (27)-35) 42)

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
分子軌道法	材料設計	<p>原子の組み合わせを変えて計算を行い、磁性の予測、表面電子状態、安定構造の予測などを通して求める物性をもつ物質を設計する。</p> <p>例) <math>(\text{G a A s})_2</math> <math>(\text{A l A s})_2</math> 超格子の構造とエネルギーバンド構造</p>
		<p>合金状態図を構成原子の原子番号のみで予測する。</p> <p>例) 貴金属化合物について、Cu-Au系では規則相が安定相として出現可能だが、Ag-Cu系では相分離が生じる。</p>
	金属表面へのアルカリ吸着	<p>金属表面にアルカリ原子を吸着させていくと被覆度と共に仕事関数が減少しその後極小値へ近づくという現象がみられる。これには、従来からガーニー模型という簡単なモデルが提案されていたが、計算によって少なくとも単純金属表面上のアルカリ吸着ではそのモデルとはかなり異なる様子が見えてきた。</p> <p>(Na/AI系)</p>
	固体表面の反応	<p>表面を利用した人工物質創成の基礎として表面上で起こる数々の反応素過程を調べる。</p> <p>例) 金属クラスター表面上でのH<sub>2</sub>分子の解離。</p>

表—2 電子レベル手法の利用形態概要(2/2) 27) - 35) 42)

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
分子軌道法	触媒設計	単価錯体で、構造等を明らかにし、 $H_2 + C_2H_4 \rightarrow C_2H_6$ という反応をウィルキンソン錯体 Rh(C <sub>2</sub> L)(PH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> を用いる場合の全ステップを計算しこの錯体が触媒として有効であることを検証した。
	色素の分子設計	色素の励起エネルギー、遷移モーメント及びその方向、振動子強度などを求め、従来の色素とは異なる機能を持つ色素を求める。 例1) 分子に強い電場を与えると電場に対して非線形な光学応答を示す材料があり、その非線形な振る舞いを表す係数を計算する。 例2) 感熱色素であるフルオラン色素の置換基を変えて波長に対する影響を調べる。
	銅酸化物のクラスター	銅酸化物の示す高温超伝導現象の発現機構を知る手がかりにするため、クラスター・モデルで電子状態を計算した。銅酸化物では電子相関の寄与を無視できず、従来よりのバンドモデルは必ずしも良いとは言えない。計算の結果、ホールを導入するとどの様な軌道が安定かなどが分かる。
エネルギーバンド法	構造解析	アモルファスカーボンの多様な構造を解析し、室温での構造を解析した。

表一3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(1/6) 57) 64) ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
モンテカルロ法	水と水溶液	<p>水溶液中の水和や相互作用を知る。</p> <p>例) 純水と、メタン分子(無極性溶質)を含む水溶液中での水素結合を比べると、後者の方が水和構造が強化されている。</p>
	スピングラス	<p>常磁性からスピングラス(ガラス中の原子配置のように物質中の原子のスピントランダムに配置しているが、時間的にほとんど変動しない物質 ex. CuMn)への相転移が温度を下げるとき起きたが、スピングラスは準安定状態か熱平衡状態かが議論されてきた。スピングラス転移は熱平行状態であることが分かり、転移温度も求められた。</p>
	準結晶	<p>通常の結晶学上の対称性と相容れない5回軸を持つ構造の準結晶上のスピントランダムの影響をどのように受けるかについて興味が持たれている。準結晶の構造である2次元ペンローズ格子と裏格子のスピントランダムについて強磁性の磁化の温度依存性を調べたところ、どちらも明瞭に、常磁性-強磁性の2次転移が見られた。臨海温度については2次元規則格子との裏格子との間で知られている双対関係がペンローズ格子と裏格子の間にも同様に成立することが分かった。</p>

表一 3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(2/6) 57) 64) ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
モンテカルロ法	固体表面の構造	タンゲステン(W)結晶の(100)面は正方格子だが、固体の表面は内部と必ずしも一致せず、Wの場合も表面の原子は変位して再構成が起きる。この再構成は水素を吸着させる事によって変化する。変位の方向は<11>方向の場合と<10>方向の場合があり、水素の被覆度θとTの関係で相図を描いてみると低温では<11>+<10>の二相共存、それより高温ではある被覆度以上で<11>から<10>へ転移する事が分かった。
	液体構造解析	二体力を使ったハミルトニアンと量子モンテカルロシミュレーションによって、量子性が強くて古典的方法のとれない <sup>4</sup> Heの熱力学的性質(圧力、内部エネルギー、動径分布関数など)は良く再現され、実験とも一致している。内部エネルギーの温度依存性についての結果は、約2.2Kλ相転移(超流動-常流動転移)を示しており、大きな成果となっている。
	エピタキシー	エピタキシャル成長の技術は、従来格子定数がほぼ等しい物質の組み合わせで用いられてきたが、格子定数差の大きい物質を成長させ

表一3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(3/6) 35) 38) 48) ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
		る格子非整合エピタキシーが最近注目されている。界面の構造は、基盤と薄膜の間の相互作用とそれぞれの面内相互作用の競争で決まり、原子が変位して非整合を吸収する。そこで相互作用の大きさの比と格子定数比をえて原子の変位やエネルギーの変化を計算し、相互作用の大きさの比が大きいほど、格子定数比が小さいほど、局所的な渦状変位が現れることが分かった。
分子力学法	薬物の分子設計	分子の配座解析をして安定な配座が薬として活性を持つかどうかを調べる。 例) 高血圧の原因物質を生成するステップの一つに関わる酵素レニンの立体構造が予測され、レニン阻害剤（抗高血圧剤）のデザインに使われている。
	人工タンパク質設計	局所構造を見ながらつなげた人工タンパク質の構造エネルギーを計算し、極小となるよう構造最適化を行う。 例) りん脂質中を貫通する $\alpha$ ヘリックスがイオンチャネルを形成するように21残基のペプチドを設計。

表一 3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(4/6) <sup>35) 38) 48)</sup> ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
分子動力学法	立体構造	タンパク質の立体構造を時間的・空間的分解能の高い動的描像としてとらえる。
	ガラスの構造解析	ガラスの構造の立体図や物性(熱力学的性質, 分光学的性質, 動的性質, 電気的性質)を求める。
	分子の挙動	n-アルカンをCH <sub>2</sub> グループをランダムに配置することでMD法を適用し, 温度が低下することにより液相からガラス状態への転移が起き, その直前にネマチック液晶相が存在する可能性を指摘。
	水の構造	液体としての水の性質が, 他の液体に比べて異常(例えば, 高融点, 高沸点, 融解時の体積減少など)であることは知られているが, この異常性を微視的な立場から理解するにはシミュレーションが有用である。その結果より以下のことが分かる。  例1) 水分子の酸素間の動径分布関数を調べることにより, 液体中でもまだ氷類似性の構造を持つ。  例2) 1個の水のポテンシャルエネルギー周囲の水との相互作用の和)の分布を調べると, ガウス分布に近い形になり, そのピーク

表-3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(5/6) 35) 38) 48) ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
分子動力学法		は1つである。今まで、異常性を説明するために提案されているモデルに混合物モデルがある。このモデルでは水素結合した氷状の小集合体と水素結合していない単量体の水分子との間の平衡を考えるが、この場合、エネルギー分布のピークは1つにならないため、このモデルは疑わしい。
	立体構造	MD法で用いられる古典的な運動方程式を変形し、結晶の単細胞の変形が許されるように拡張する。このことにより結晶構造の変わる相転移のシミュレーションが可能になる。 例) K C Nの結晶は圧力を加えるとNaCl型からCsCl型へ転移する。 (ここではCN <sup>-</sup> イオンを一つの球状イオンとみなしている) 上記の方法で圧力を11kbar→61kbar→101kbar→11kbarと変化させたところ、101kbarでCsCl型への相転移がみられ、実際101kbarで結晶構造を調べるとCsCl型であった。
	不均一系の反応	分子量の大きい分子を対象とし、原子対間に半経験的なポテンシャルを仮定して、多くのパラメーターを決めて分子模型を設計する。

表一 3 原子・分子レベル手法の利用形態概要(6/6) <sup>35) 38) 48)</sup>ほか

手 法	分 類	利 用 形 態 概 要
分子動力学法	不均一系の反応	燃焼現象の中でも特に急激な状態変化を伴う現象の一例にデストネーションがある。デストネーションは燃焼波の一種であり衝撃波を伴って超音波伝播する。計算機実験により現実のデストネーションがよく再現されるが高密では理論との不一致が見られた。粒子が密に詰まっている状態では粒子の拡散過程がデストネーションの伝播の過程よりゆっくり進むため、粒子が不均一（クラスター化）になっていることが原因である。

## (2) データ利用手法

データ利用手法の利用形態の概要を表一4に示す。

表一4 データ利用手法の利用形態概要(1/3) <sup>3) - 14) 42)</sup>

分 野	シス テ ム 名	利 用 形 態 概 要
分子設計	A I M B	カリフォルニア大のW.T.Wipkeらの開発した分子の3次元構造モデルの迅速な構築を行うシステム。分子力学を用いずに、化学者の知識とアナロジーを利用している。目的化合物の構造式を入力すると、システムが化合物を認識し部分構造へ分割および3次元モデルの構築を行なう。
	C A S E	ケースウェスタン・リザーブ大のG.Kopmanの開発したシステムである。有機化合物を特徴づける分子基を自動抽出し、そのなかから活性に関与していると思われるものを選びだす、定量的構造活性相関分析のためのシステムである。
	Polymer Advisor	アメリカ・3M社が開発した用途に応じた特性を持つ高分子化合物の開発を支援するシステムである。入力された化合物の構造表示、他の物質と混合したときの作用の予測、要求仕様を満たすかどうかの予測をするTheoristと呼ぶサブシステムと過去の実験情報を記憶・理解し、ユーザーに助言を与えるサブシステム(Empiricist)からなり、Inteli Corp社で開発している。

表—4 データ利用手法の利用形態概要(2/3) <sup>31)-14) 42)</sup>

分 野	シス テ ム 名	利 用 形 態 概 要
分子設計	有機合成支援 システム (CASINO)	化学技術研究所で開発のシステムである。与えられた合成標的構造を入力すると、まずそれに最適の出発物質が選定され、次にその間の合成経路の可能性を提示する。
	合成設計・反応予測システム (AIPHOS)	豊橋技術科学大学で開発のシステム。①標的構造の特徴を認識し、その構造のどこをどのように切っていけば前駆体へもっていかれるなど、いわゆる反応発生機能を中心においた論理的取り扱いの機能、②多数の個別有機反応をデータベースとして保管し、それを管理する機能、③有機反応データベースから必要な情報を取り出し、一般化・定式化して、いわゆる知識ベースを自動発生させる機能をもっている。
	分子科学計算 エキスパート システム	花王(株)知識情報科学研究所が科学技術振興調整費を受けて作成。分子の構造式を入力して、計算したい物性を指定すると目的に適した計算プログラムを選択して教えてくれる。
材料設計	超電導材料設計支援システム	電子技術総合研究所で開発。転移温度の高い超電導材料の設計を目的とした対話型設計支援システムである。

表—4 データ利用手法の利用形態概要(3/3) <sup>3) -14) 42)</sup>

分 野	シス テ ム 名	利 用 形 態 概 要
材料設計	ヘテロ接合設計支援	電子技術総合研究所で開発。半導体材料設計の支援システムである。
	ガラスの材料設計と知識ベースのシステム化	60種類の酸化物から、ガラスを構成する酸化物を選ぶと、その物性（体積弾性率、剛性率、ポアソン比、密度、比弾性、原子充填度、熱膨脹係数等）を算出する。

## 1.4 適用事例

本節では、データベースやコンピュータ計算技術に関する適用事例や、日本国内にて販売されている関連ソフトウェアについて紹介する。

### 1.4.1 データベース

データベースの適用事例として、日本原子力研究所にて構築している原子炉材料データベースの事例を表-5に示す。

表一5 データベースの事例<sup>87)</sup>

種 別	材料データベース
分 類	材料データベース
概 要	<p>原子炉材料データベース JAMPD(JAERI Material Performance Database)使用例</p> <p>鋼中の硫黄含有量が異なる圧力容器鋼についてBWR(288°C, 8.3MPa, 溶存酸素 150~250 ppb)近似環境および、PWR(320°C, 15.7MPa, 溶存酸素 10ppb以下)近似環境における <math>da/dN - \Delta K</math> の関係を図1~図4に示す。</p> <p>このように、実験結果をデータベース化することによって、環境助長割れの主要支配因子が材料、および力学条件であることが分かる。</p>

図 1 PWR環境下、低硫黄材(S=0.094%)の  
 $da/dN - \Delta K$  の関係

図 2 PWR環境下、中硫黄材(S=0.014%)の  
 $da/dN - \Delta K$  の関係

図 3 PWR環境下、低硫黄材(S=0.004%)の  
 $da/dN - \Delta K$  の関係

図 4 PWR環境下、中硫黄材(S=0.014%)の  
 $da/dN - \Delta K$  の関係

## 1.4.2 コンピュータ計算技術

### (1) 理論的手法

理論的手法の適用事例として、電子レベル手法によるものを表一6に、原子・分子  
レベル手法によるものを表一7にそれぞれ示す。

表一6 電子レベル手法の事例(1/3) <sup>91)</sup>

手 法	分子軌道法
分 類	材料設計
概 要	<p>Cu-Au系, Ag-Cu系, Ag-Au系の貴金属合金について、原子番号と結晶構造のみで規則相のエネルギーを密度汎関数法で、完全ランダム固液体のエネルギーを原子間相関を考慮にいれたクラスター法で各々計算した(図1)。<math>\Delta E = 0</math>は純金属のエネルギーの濃度平均を示す。黒丸(25, 50, 75%)は規則相のエネルギーを、実線は固液体のエネルギーを表す。図1(a)のCu-Au系では規則相が安定相として出現可能であるが、(b)のAg-Cu系では規則相、固液相ともにエネルギーが正で相分離が生じること、さらに(c)のAg-Cu系ではCu-Au系同様、規則相形成の可能性はあるが、固液体とのエネルギー差が小さく、エントロピーの効果で固液体が形成されるであろうことなどが分かる。これらは実験で求められた相図と定性的な一致を見せる。</p>

図1  
貴金属二元素の規則相のGround Stateにおける  
生成エネルギーのバンド計算  
エネルギーの基準を純金属にとってある。(a)はCu-Au系  
(b)はAg-Cu系、(c)はAg-Au系で、黒丸は規則相を  
実線は完全ランダム固溶体を示す。

表一6 電子レベル手法の事例(2/3) <sup>30)</sup>

手 法	分子軌道法
分 類	色素の分子設計
概 要	<p>色素の電子状態は分子軌道が<math>\pi</math>電子系を構成している原子の原子軌道の一次結合で表されると仮定し、半経験的積分値を用いた半経験的分子軌道法で計算される。半経験適法法は幾つかあるが、色素の場合、励起エネルギー（吸収波長）の計算が主な目的のため、PPP-CI (Pariser-Parr-Pople Configuration Interaction) 法が最も適している。ファクシミリなどの感熱紙に塗布される感熱色素であるフルオラン色素を見てみる。色素は外部から加えられる熱により融解し、顕色剤によってスキーム1に示されるように1'となり発色する。R=Hの時のPPP-CI法による吸収スペクトルを図1に示す。1'は可視部に2つの吸収帯<math>\lambda_1</math>, <math>\lambda_2</math>を示し、しかもそのモル吸光度<math>\epsilon</math>は同じ大きさになっている。2つの吸収帯は補色関係にあり、<math>\epsilon</math>が等しいことから黒色を示す。また、置換基Rの種類や置換位置による<math>\epsilon</math>や<math>\lambda_1</math>, <math>\lambda_2</math>への影響を、PPP-CI法により調べることができる。</p>
	<p>R' = cyclohexyl</p> <p>スキーム 1</p> <p>図1 発色したフルオラン色素 1' の吸収スペクトル (酢酸中) と PPP-CI 計算による波長(直線)。</p>

表一6

電子レベル手法の事例(3/3) <sup>⑨2)</sup>

手 法	分子軌道法
分 類	固体表面の反応
概 要	<p>表面の上で起こる原子分子の反応素過程、例えば吸着、解離、拡散、脱離などの理解は、表面を利用した人工物質創世の重要な基礎である。1つの例として金属表面での水素分子の解離吸着を取り上げる。</p> <p>分子軸が表面と平行な場合、H-Hポテンシャル面の等高線を描くと、図(a)、(b)のようになる。(a)のIで示すように水素分子が原子間距離をほとんど変えずに表面に近づくと、障壁のために黒丸(●)で物理吸着状態になる。さらに表面に近づけると反応は点線の方へ進み、水素分子の解離が進み、バラバラになった原子は表面との間に強い共有結合を形成する。図(a)は活性障壁がある場合、(b)はない場合で、単純金属表面では(a)型、Ni、Pdなどの活性な遷移金属表面では(b)型と推定される。</p>

(a) (b)

図 金属表面における水素分子のポテンシャル面  
 (a)は反応路(R.C.)に沿って活性障壁がある場合、(b)は活性障壁がない場合である。(a)で黒丸で示す位置は物理吸着に対応する。

- 34 -

表—7 原子・分子レベル手法の事例(1/7) <sup>35)</sup>

手 法	モンテカルロ法
分 類	水と水溶液
概 要	<p>水は単分子としては単純だが、分子集団として示す性質は複雑である。水溶液中での水和や相互作用をモンテカルロ法で計算する。希ガス、フルオロカーボン、炭化水素などの水への溶解度は極めて小さいが、これらの気体の水への溶解では著しくエントロピーが減少することが分かっている。この種の疎水性溶質の溶解によって、周囲の水の自己組織化、構造化が起きるために、この現象は疎水性水和(図1(a))と呼ばれる。さらにより水との接触を少なくしようとして溶質は自己会合を起こす傾向がある。これを疎水性相互作用(図1(b), (c))。計算により、純粋中と、メタン分子1個を含む水溶液中での水素結合を比べると、後者のほうが水和構造が強化されていることが分かった。(図2)</p>

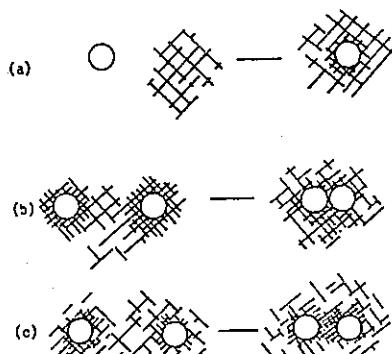
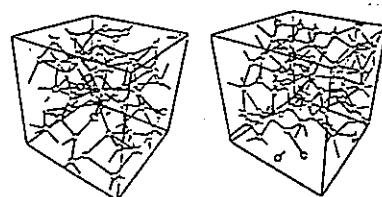


図1 疎水性水和(a)と二つの型の疎水性相互作用(b, c)のモデル。  
○は疎水性溶質、斜線は水の水素結合ネットワークを示す。



(a) 純水 (b) メタン水溶液  
図2 モンテカルロ計算でみた水(○)とメタン分子(●)の周囲の水の水素結合構造。後者の方がより規則的である。

表—7 原子・分子レベル手法の事例(2/7) <sup>62)</sup>

手 法	モンテカルロ法
分 類	準結晶
概 要	<p>通常の結晶学上の対称性とは相容れない5回軸を持つ構造の準結晶上のスピントリニティがその特徴の影響をどの様に受けるかについて興味が持たれている。準結晶の構造である2次元ペンローズ格子と裏格子(図1)のスピントリニティについて強磁性の磁化の温度依存性を調べたところ、どちらも明瞭に常磁性-強磁性の2次転移がみられる(図2)。臨界温度T<sub>c</sub>についてみてみると、どちらの格子も最近接格子点数は平均して4で、正方格子と同じである。ところがペンローズ格子のT<sub>c</sub>は正方格子のT<sub>c</sub>より高く、一方裏ペンローズ格子のT<sub>c</sub>は低い。</p> <p>2次元規則格子の強磁性体については、裏格子との間の双対関係が知られている。T<sub>c</sub>について、2次元規則格子と同じ双対関係を持つことが計算から分かった。</p>

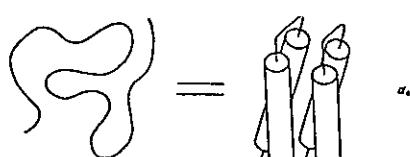
図1 ペンローズ格子(実線)とその裏格子(破線)。

図2  
強磁性イジング系の磁化  $\langle m \rangle$  の温度依存性。  
(a)はペンローズ格子、(b)は裏ペンローズ格子の場合で、Nは系のサイズ(スピントリニティの数)を表す。

表—7

原子・分子レベル手法の事例(3/7) <sup>31)</sup>

手 法	分子力学法
分 類	人工タンパク質設計
概 要	<p>人工タンパク質の設計の手順はまだ確立されていないがまず 望みの構造、アミノ酸配列を決め、次に分子力場法で構造の 最適化を行い、最後に評価する。具体例として、</p> <p>①ヘリックス-バンドル型タンパク質：De Gradoらは<math>\alpha</math>-ヘリックスが束になつて会合している、ヘリックス-バンドル型の人工タンパク質を新規に設計、合成している。（1）ヘリックス-バンドル構造の設計。16残基からなる両親媒性の<math>\alpha</math>-ヘリックス4本をプロリンーアルギニン-アルギニンの短いターンでつなぐことにより74残基からなる人工タンパク質（図1 a 4）を設計した。（2）DNA結合ペプチド。天然タンパク質を参考に、DNAに結合できるよう側鎖のモデリングを行った。（3）イオンチャンネルタンパク質。リン脂質膜中を貫通する<math>\alpha</math>-ヘリックスがイオンチャンネルを形成するように21残基長のペプチドが設計され、実験的にも確認された。</p> <p>②<math>\alpha/\beta</math>-バレル型タンパク質の設計：図2に示した<math>\alpha/\beta</math>-バレル型タンパク質は、極めて対称性が良く、構造上の制約が多いためある程度合理的に設計を進めることができる。設計した1つの結果を図3に示す。</p>



Helix -Gly-Glu-Leu-Glu-Glu-Leu-Leu-Lys-Leu-  
Lys-Glu-Leu-Leu-Lys-Gly-  
Loop -Pro-Arg-Arg-  
 $\alpha_1$  Met-Helix-Loop-Helix-Loop-Helix-  
COOH

図1 ヘリックス-バンドル型人工タンパク質

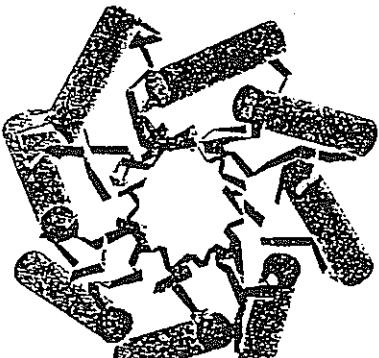


図2 蛋白工学研究所で設計・試作した $\alpha/\beta$ -バレル型タンパク質のモデル図。中央に $\beta$ -シートからなるバレル構造があり、そのまわりを8本の円筒で囲まれた $\alpha$ -ヘリックスがとり囲んでいる。

ループ	$\beta$ -シートループ	$\alpha$ -ヘリックス
SADT	GVIVYFG LDG	NPEELLKLLAKKG
PR	GVVLGI GSVTGG	NPEELLKLLKKKG
SADT	GVIVYFG LDG	NPEELLKLLAKKG
PR	GVVLGI GSVTGG	NPEELLKLLKKKG
SARGG	GVIVYFG GGAGVGKGTG	NPEELLKLLAKKG
SPFRSG	GVVLGI GANREKGG	NPEELLKLLKKKG
SADT	GVIVYFG LDG	NPEELLKLLAKKG
PR	GVVLGI GSVTGG	NPEELLKLLKKKG

図3 蛋白工学研究所で設計・合成した $\alpha/\beta$ -バレル型人工タンパク質のアミノ酸配列（アミノ酸の一文字表記による）。

表一7 原子・分子レベル手法の事例(4/7) <sup>86)</sup>

手 法	分子動力学法
分 類	体心立方鉄の変形、破壊
概 要	<p>2886個の原子からなる図1(a)の様な体心立方鉄の針状試料をコンピューター内に作る。(試料A)この試料の中央にクラックを作り、[001]方向に引っ張る。また、2632個の原子からなる試料(試料B)を作り、[111]方向に引っ張る。引っ張り変形は0.004の歪みに相当する分だけ均一に変形した後、分子動力学により100ステップ緩和させる。試料Bでは歪みが6.8%までは変位は均一であったがこれ以後試料は急激に変形し、結晶の中に6回対称構造がみられた。この6回対称構造は歪み約10%で急に双晶に変わった。歪み17%以上では大きな変形がみられた。歪み22%以上ではくびれも見られるようになった。さらに、28%で試料Bは完全に破壊されたが、同時に6回対称構造も消失した。すなわち6回対称構造は引っ張り応力の下でのみ存在することができる。</p>

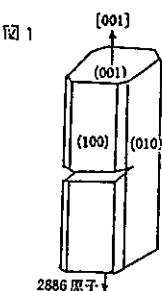


図1  
(a) 試料A、2886個の原子からなり、(100), (010), (001)面で囲まれている。[001]方向に引っ張りを与える。中央にクラックがある。

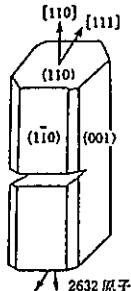


図1  
(b) 試料B、2632個の原子からなる。(110), (010), (001), (100), (001)面で囲まれていて、[111]方向に引っ張る。

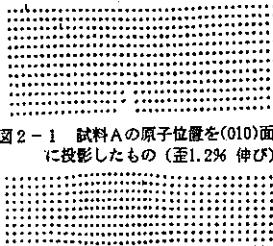


図2-1 試料Aの原子位置を(010)面に投影したもの(歪1.2%伸び)

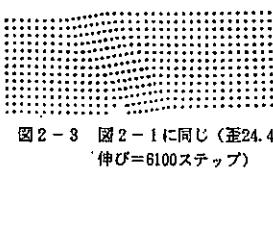


図2-3 図2-1に同じ(歪24.4%伸び=6100ステップ)

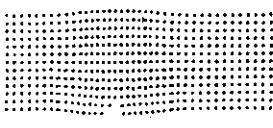


図2-2 図2-1に同じ(歪20.4%伸び=5100ステップ)



図3-1 試料Aの原子位置を(010)面に投影したもの(歪6.4%伸び)  
クラック先端に塑性変形が起こっている。



図3-2 図3-1に同じ(歪6.8%伸び)  
突然6回対称構造が現れた。

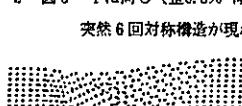


図3-3 図3-1に同じ  
領域Dにおいて双晶がみられる。



図3-4 図3-1に同じ(歪22%)  
ネッキングが観察される。



図3-5 図3-1に同じ  
完全に破壊した後、6回対称構造も消失した。

表一7 原子・分子レベル手法の事例(5/7) <sup>86)</sup>

手 法	分子動力学法
分 類	放射線損傷
概 要	<p>図1はノックオン原子Kが(100)面内で&lt;011&gt;軸から10°の方向に400eVのエネルギーを与えられた時の衝突事象である。ノックオン原子はKから出発してK'に至る。(a)には時間45までの原子の通った軌道が示されているが、&lt;100&gt;衝突連鎖A, B, ..., Hは表面に達しており、しかもそのエネルギーは衰えていない。(b)は最終的に生成する空格子点とスプリット型格子間原子(図2)の配置である。空格子点が11個、格子間原子が11個生成し、置換衝突が39回起こっている。このような計算により、解析的に取り扱う事が難しく、また、実験的に明らかにする事が難しい原子のはじき出しのしきい値や、多体的な原子衝突に結晶構造がどの様な影響を与えるか、はじき出されて結晶格子間に割り込んだ原子の安定性はどうなっているのか、などが分かる。</p>

(a) ノックオン原子が<011>軸から10°の方向にKから400eVのエネルギーを持って出発したときの時間45までの原子軌道。

(b) 最終的に生成する空格子点(白丸)とスプリット型格子間原子(黒丸)の配列を推定したものの。四角の枠はモデル結晶の大きさを示す。

図1 鋼の(100)面内の400eV原子衝突<sup>11)</sup>

図2 鋼の格子間原子のスプリット構造

表一7 原子・分子レベル手法の事例(6/7) <sup>88)</sup>

手 法	分子動力学
分 類	ガラスの構造解析
概 要	<p>分子動力学法では3次元の原子位置が各ステップごとに得られるため構造をそのまま立体図で見ることができる(図1)。これらの構造はX線回折からも類推できるため両者を比較してガラス構造を定めていく。求める物性を調べていくことも進んでおり、例えば、核融合の発展にともない盛んに研究されるようになってきたレーザーガラスでは、ドープされたNdやEuイオンが、線幅の鋭い発光を出すように母体ガラス組成を選ぶことが必要とされている。分子動力学では、ドープイオンの周りの構造が求められるため(図2(a))、配位子場理論を用いて発光スペクトルを推測することができる(図2(b))。実測と計算による発光スペクトルはほぼ一致しており、鋭いピークを得るためにどのような母体ガラス組成を選べば良いのかを系をいろいろと変えて計算することにより予測することができた。</p>
	<p>○: O, ●: Si 図1 分子動力学法による <math>\text{SiO}_2</math> ガラス構造の瞬間立体図 (ステレオ表示)</p> <p>●: Eu, ○: O, ■: Nd 図2 (a) ホウ酸塩ガラス中のEuイオンの構造</p> <p>図2 (b) (a1-a4) ガラスI ガラスII ガラスIII ガラスIV ●: Eu, ○: O 図2 (b) ホウ酸塩ガラス中のEuイオンの構造と発光スペクトル</p>

表一7 原子・分子レベル手法の事例(7/7) <sup>38)</sup>

手 法	分子動力学法
分 類	水の構造
概 要	<p>液体としての水の性質が、他の液体と比べて異常（例えば高融点、高沸点、融解時の体積減少など）であることは知られているが、この異常性を微視的立場から理解するにはシミュレーションが有用である。X線回折による動径分布関数から、水が普通の液体と異なって氷類似の構造を残していることがうかがわれる。氷類似性を強調して水の異常性を説明するため、2種類のモデルが提案してきた。混合物モデルでは、水素結合した氷状の小集合体と水素結合していない単量体の水分子の間の平衡を考え、連続体モデルでは氷またはアモルファス状の氷が、力学的な平衡位置から大きく歪んでいることを基本的な構想とする計算により、1個の水のポテンシャルエネルギー（周囲の水との相互作用の和）の分布を調べると、ガウス分布に近い形となり、そのピークは1つであることから（図1），混合物モデルは否定された。</p>
	<p>I-構造 分子動力学計算から直接求められるもの。 V-構造 速い分子間振動を消去したもの。 Q-構造 I-構造に対応するポテンシャルエネルギー極小の構造。水の場合はガラス状氷の対応する。</p>

図1 水分子のポテンシャルエネルギーの分布。  
実線；I-構造，破線；V-構造，太い実線；Q-構造。  
横軸は水の持つポテンシャルエネルギー (kcal/mol)。

## (2) データ利用手法

データ利用手法の適用事例として、逆合成反応に関する事例を表一8に示す。

表一8 データ利用手法の事例<sup>8) 10)</sup>

種 別	分子設計
分 類	逆合成反応
概 要	<p>図1に示したように、標的物質として構造2が入力され、また出発物質として構造1が選定されると、それを実現する合成経路として複数通りの可能性が提案される。この際、各反応経路は1と2との間に生成、展開できる反応行列を、同じく過去の反応例を反応行列の形式で格納している知識ベースをもとに検討を行ない、現実性のある素反応過程をつないでいくことで発生している。</p>

<注> 1 : ホランテリン

図1 ホランテリンの逆合成経路

### 1.4.3 ソフトウェア

データベースやコンピュータ計算技術に関して日本国内にて販売されているソフトウェアの機能や特徴等についてまとめたものを表一9に示す。

表-9 関連ソフトウェア一覧(1/5)

ソフトウェア名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	手法等
ACACS	日本電気	日本電気、住友化学工業	データベースから三次元グラフィックス、理論計算までの統合型分子設計支援システム	ACOS-4系	分子動力学法
BIOCES	"	日本電気、住友化学工業、キッセイ薬品工業など	未知タンパク質のモデリングと、ACACSと連動した薬物-受容体の相関研究が可能	"	分子力学法
BIOCES [E]	"	"	薬物-受容体理論にもとづくタンパク工学と医農薬設計のコンピューター支援システム。 EWS4800シリーズと3次元グラフィックス端末(PS390)をイーサネット接続し、安価なシステムを構築可能	EWS4800シリーズ+PS390(E & S社)	分子力学法
ANCHOR	富士通	富士通、呉羽化学工業	理論化学計算をベースにした分子設計支援システム	FACOM M, Aシリーズ、Sファミリー	分子軌道法 分子動力学法
MACCS	"	米モレキュラーデザイン	ANCHORと連動する分子情報/反応情報データ	"	データベース
REACCS	"	"	ベースマネージメントシステム	"	"
ADAPT	"	"	構造活性関係OSAR	"	"
CHEMTERM-BMD	"	富士通	ANCHORの機能をパソコンに凝縮した分子設計支援システムの入門ソフト	FMR-60、70	分子軌道法、分子動力学法、データベース
CHEMTERM-E	"	"	パソコンをANCHOR、MACCSなどの端末として利用するシミュレーションソフト	"	データベース
MODEL MATE	日立製作所	日立製作所、クラレ	汎用型分子設計支援システム。高度なデータベースを利用してあらゆる材料設計に対応。低価格EWS版との組み合わせなど独自性に富むシステムの構築も可能	HITACCSシリーズ M-640以上のMシリーズ、2050G、2050/32ワークステーション	データベース 分子軌道法

表一9 関連ソフトウェア一覧(2/5)

ソフトウェア名	国内販売会社	開 発 会 社	機 能 ・ 特 徴	シス テ ム 構 成	手 法 等
MOL-GRAFH	ダイキン工業	ダイキン工業	低分子、素材、合成高分子、生体高分子解析にパッケージ化したシステムを提供。エントリーから総合的な解析までニーズ別に選択可能	IRIS-4D/GTシリーズ、VAX シリーズ、FACOM IBM、HITAC の汎用コンピューター	分子軌道法 分子力学法 分子動力学法
INTERMOL	分子	分子	分子力学法および分子動力学法を背景としたエンジニアリングワークステーションを用いた分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、超電導物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデリングのリアルタイム操作を実現	SUN-3、SUN-4 YHP 9000シリーズ、DG、PRIME、VAX	分子力学法 分子動力学法
CHEM-X	理経	英ケミカルデザイン	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。扱い可能な原子、分子、ボンドの数に制限がなく、各種エネルギー計算と表示機能に優れる	VAXシリーズ、PS300、MAC	分子軌道法 分子力学法
BIOGRAF	"	米バイオデザイン	生体高分子を主とし、分子動力学計算による分子設計支援システム。タンパクの一部や核酸をその属性に応じて対話形式でまとめて扱うグループ機能が非常に便利	VAXシリーズ、SUN-3、4、ALLIANTFX シリーズ、IRIS4D/GT	分子力学法
POLYGRAF	"	"	ポリマー、アモルファス、結晶性物質等の合成高分子設計支援システム。分子動力学計算及び計算結果のアニメーション解析も可能	"	分子力学法 分子動力学法
CONCORD	"	米エバンス&ザザランド	スマイル表記法で記述された化学構造式を入力すると、立体構造の三次元座標を高速生成するシステムで、精度も高い	VAXシリーズ	分子軌道法

表一9 関連ソフトウェア一覧(3/5)

ソフトウェア名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	手法等
NACCS-II	伊藤忠／テクノサイエンス	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム	ホスト…VAXおよびIBM ディスプレー…テクトロニクス、PC-9801	データベース
REACCS CHEMLAB-II	" "	" "	反応情報データベース管理システム 分子設計支援システム。約100本のプログラムで構成。分析化学関連の処理も追加。		データベース 分子軌道法
ADAPT	"	"	構造活性解析システム。自動的に三次元配座計算。		分子軌道法
IGSUITE	"	米インテリジェンティック 米ポリジエン	遺伝子情報解析システム。ワークステーションはミニコンベースの高機能が特徴	VAXシリーズ、SUN シリーズ ステラ、コンベックス	分子力学法
CHARMM	"		分子動力学法を用いたタンパク用分子設計支援システム		分子動力学法
X-PLOR	"	"	結晶構造解析支援システム	"	分子軌道法
BIOGRAF	クボタコンピュータ	米バイオデザイン	低分子、タンパク、DNA、炭水化物、脂質について専用ビルダーを持つ表示&解析一体型の分子設計システム、グラフィックスーパーコンピュータTITANとの組み合わせで、計算&表示のリアルタイムなシミュレーション環境を提供する。その他各種データベースQCPEプログラムへのインターフェイスを完備	TITAN	分子力学法
POLYGRAF	"	"	ポリマー専用ビルダー（アモルファス、スターバースト、ブロック状ポリマー等）を備えた表示&解析一体型の分子設計システム。その他周期境界条件を用いた解析、一定圧力下での運動シミュレーションが可能超電導・ゼオライト触媒の取り扱い		分子力学法
ITALGRAF	"	"			分子軌道法

表-9 関連ソフトウェア一覧(4/5)

ソフトウェア名	国内販売会社	開 発 会 社	機 能 ・ 特 徴	シ ス テ ム 構 成	手 法 等
S Y B Y L Basic モジュール	三井物産	米トリボス	基本的な分子モデリング、データベース、エネルギー計算等	VAXシリーズ、IRIS 4D/GTシリーズ、 Sun-4, コンベックス、 クレイなど	分子軌道法 データベース
Advanced Computation モジュール-Biopolym erモジュール			立体配座解析、量子力学計算、分子動力学計算 等 タンパク質、核酸等の生体高分子	" "	分子軌道法 分子動力学法
Q S A Rモジュール Polymer モジュール			定量的構造活性相関操作 合成ポリマー専用モデリング操作	" "	分子力学法 分子力学法
D I S C O V E R	三菱商事、菱化システム	米バイオシム	分子エネルギー極小化、ダイナミックス手法を 用いた分子設計シミュレーションプログラム、 コンソーシアムで力場パラメータを吟味	IRIS、VAX、CRAY	分子力学法
D e l p h i	"	"	計算プログラム。分子・溶媒のイオン強度、誘 電率を考慮した計算が可能	CONVEX、ALL IANT、IBM	分子軌道法
D m o l	"	"	局所密度汎関数法によるab-initio 分子軌道法 プログラム。50から100 原子程度までの分子の 諸性質が計算によって得られる	IRIS、VAX、CONV EX、CRAY CRAY、IRIS、SUN VAX	分子動力学法
S Y N L I B	長瀬産業	米ディストリーブューテッド・ケ ミカルグラフィックス	有機合成反応のライブラリーとデータベース管 理システム。55,000件の反応を収録	VAXシリーズ、EWS 4,800 シリーズ	データベース

表一9 関連ソフトウェア一覧(5/5)

ソフトウェア名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	手法等
SPARTAN	センチュリーリサーチセンター	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経験的分子軌道法GAUSSIAN85のグレードアップ版。化学者が手元で活用できるよう、対話型のデータ入力環境と計算結果のグラフィック表示機能を備えたソフトウェア	マッキントッシュ IRIS-4D	分子軌道法
TEO/CHEMICAL	日本データゼネラル、長瀬産業	豊橋技術科学大学	リードゼネレーション志向の分子設計支援システム。データベース管理からモデリング、理論解析、グラフィックスなどEWSで実行	DS/7500シリーズ	分子軌道法 データベース
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	米PDAエンジニアリング	三次元複合材の材料と構造の詳細な定義、温度依存性を持つ複合材構造特性の線形、非線形解析、各層ごとの破壊評価を行う有限要素法プログラム	APOLLO、CRAY VAX、IBM、SUNなど	分子動力学法
SAVVY/FT-IR	日経情報システム	米エクスカリバー・テクノロジー	ニューラルネットを応用し、赤外線スペクトルのデータベースから未知試料の類似スペクトルを高速に検索する。スピードは10,000件データから約10秒	VAX/VMSシリーズ	データベース
FRODO MMS	住商電子システム	カリフォルニア大学サンディエゴ校	X線結晶構造解析の結果を表示できる分子グラフィックスシステム 汎用の分子グラフィックスシステム。外部計算プログラムとのインターフェースも完備	IRISシリーズ "	分子軌道法
GEM	グラフィカ	グラフィカ	ユーザーが解析したりプログラム処理してできた分子構造に関するデータから、三次元の分子モデルを作成する	ホスト各機種+自社製グラフィックディスプレーIMシリーズ	分子軌道法
EXPOD	三菱総合研究所	三菱化成	多種多様な有機合成化合物の性質を、官能基等の性質から割り出し、有機合成化合物の有用性を検証する	ホスト各機種	データベース

## 1.5 課題と展望

### 1.5.1 現状での課題

#### (1) データベース

化学合成データベースについては、化学反応・化合物特性に関してのガラスや金属化合物についてのデータが収集量および質共に不十分であり、特に、寿命に関するデータが不足している。また、化学反応データは有機化合物に偏重しており、知識ベースの構築も有機化合物についてのシステムが中心となっている。しかし、現在ではコンピュータそのものの性能の向上と、従来からの有機化合物に対するソフトウェアの開発が一段落を迎える、開発意欲が有機化合物から無機化合物に移りつつある状況である。今後は、ガラスや超電導物質についても物性や合成方法等の情報が蓄積が増進されることが期待される。

一方、材料データベースについては、原子炉関連素材などに関する破壊等のデータが蓄積されてはいるものの、今後、寿命を含めたデータをさらに蓄積し、新素材開発に役立つ機能をもったデータベースが必要とされるであろう。

#### (2) コンピュータ計算技術

##### (a) 理論的手法（電子レベル手法）

分子軌道法について、現状では次のような問題点や課題が残されている。

①分子軌道を原子軌道の線形結合と仮定しているため、規定関数の選び方や基底関数の数、分子軌道の作り方によって精度が異なる。現在の計算機の能力から数十個の粒子系に適用できるに過ぎない。

②分子軌道を扱うために、金属、セラミックスのエネルギーバンドに対してのシミュレーションを行うことができない。

③格子欠陥、不純物や微量添加元素、表面の問題を解明しなければならない場合が多く、大きな系の最適原子配列を計算する手法の開発が望まれる。

また、エネルギー bandwidth 法については、結晶や金属化合物に対して有効な手段であり、構造を解析することが出来るという特色はあるものの、電子状態を記述出来

ずその場合は分子軌道法によるしかない。したがって、寿命に関する研究にエネルギー・バンド法は適さないが、材料設計に対してその性質を予想することには適用が可能となる。

#### (b) 理論的手法（原子・分子レベル手法）

化学的シミュレーション技術として、今後さらに利用が広がると考えられる分子動力学法については、以下のような課題がある。

- ①ポテンシャルや境界条件、またこれらに係わるパラメータが、計算結果と実験結果が整合するように半経験的に選ばれており、理論的に設定する根拠に乏しい。
- ②材料設計の手段として使用するためには、未知の物質系に対しても適切な計算条件を決定できるように、解析例をデータベース化し系統的な半経験則を求め既存の計算方法や条件を利用できるようにすることが必要である。
- ③ポテンシャルを非経験的に求める方法論を確立する必要がある。
- ④適切なポテンシャルモデルが選定できる場合でも、現在計算対象外とされている数千個の粒子系では、相転移等のゆらぎを正確に計算することができない。

#### (c) データ利用手法

データを利用した手法を、材料化学の分野に応用した事例はまだ少ない。現状では、分子設計や材料設計に携わっている研究者の補助を行う段階に過ぎないが、関連技術の進展とともに、この分野での役割も大きいものとなろう。

### 1.5.2 今後の展望

#### (1) データベース

今後、コンピュータの情報処理能力とデータ蓄積能力の向上により、既存のデータベースの能力をはるかに上回るデータを蓄積し、高性能の知識ベースを備えたシステムが構築される可能性はある。しかしながら、データベースを真に有用なものとするには、従来からのデータベースの基本的な問題点を検討した上で、データベースを新

たに構築する必要がある。

データベースの抱えている基本的な問題点をあげると次のようになる<sup>88)</sup>。

- ①論文、報告等のデータの記述が不完全である。
- ②データの質の評価がなされない。
- ③データ提供者とユーザー及びシステム開発者等の間につながりがない。

また、データベースの構築には、データ評価の専門的知識が必要となることから、高度のデータベースを構築するには人材の確保が重要であり、この意味からデータの収録範囲が狭くなる傾向があるとの人的な問題もある。

このように、データベースの今後の発展はハードの発達にソフト（人的側面）がどの程度のところまでサポート出来るかという点にかかっているともいえる。容易にはならぬ問題ではあるものの、データベースの重要性についての見識は化学の分野に限らず広範に広まっており、将来の発展性は大きいと考えられる。

## (2) コンピュータ計算技術

### (a) 理論的手法（電子レベル手法）

分子軌道法については、計算手法の開発や専用のコンピュータシステムの開発、さらにコンピュータ計算能力の向上とにより、現在では、従来100個程度の粒子にのみ可能であったものが1,000個以上の粒子系についても適用が可能になりつつある。今後はさらに、コンピュータの能力が向上するにつれて、材料工学手法と材料化学的手法双方で解析することのできなかったサブ・ミクロンオーダーのシミュレーションが分子軌道法によって可能になる可能性がある。

一方、材料化学分野においては、特に数万年単位の腐食・破壊の研究を行う研究者が不足している状況であるが、この手法の応用で長期間にわたる腐食の研究が進展する可能性は高い。

人材の登用を含めた研究の活性化を図り、超高性能のコンピュータの活用によって現在以上の研究の進展が今後期待できるであろう。

エネルギー・バンド法についても状況は同様である。今後、材料開発や材料設計に密着したシステムの構築が望まれる。

### (b) 理論的手法（原子・分子レベル手法）

分子動力学法の場合、コンピュータの計算能力の向上により、計算できる粒子系が大きくなるがそれにも限度がある。粒子の立方根に計算時間は比例するため、抜本的な計算方式の転換が必要である。また、既存の解析情報をデータベース化した上で、予測的手法を取り入れて構造予測を行う専用システムの開発も可能であると考えられている。

### (c) データ利用手法

周辺技術の進展にあわせて飛躍的に進歩することが考えられるが、材料化学に適用可能なシステムとしては、次の項目を充実させる必要があろう。

- ①知識ベースに用いるデータの質。
- ②知識ベースとして用いるデータの合理性。
- ③シミュレーション（計算）による物性予想システムとの連携。

## 2. 人工知能技術の調査

人工知能技術に関しては、昨年度、地下深部の解析にブレークスルーをもたらす可能性のある技術として、定性推論とニューラルネットワークについての調査を行った。

今年度は、実際に産業界において適用事例のみられる人工知能技術を中心に、関連した技術やその理論等について調査した。

### 2.1 概要

#### 2.1.1 人工知能技術と関連した技術

人工知能（A I : Artificial Intelligence，以下A Iとする）には、さまざまな定義があるが、「人間が用いる知識や判断力を分析し、コンピュータ上で生かそうという技術」（通産省機械産業情報局）の定義が一般的で、1985年頃から米国を中心に急速に進展した。

A Iは、次の2つのアプローチがあり、相互に密接に関連して発展している。

- ① 認知科学：科学的立場から、人間の知能、知的行動の原理を解明する
- ② 知識工学：工学的立場から、人間の知的能力をコンピュータに与える

A Iの代表的な応用分野としては、エキスパートシステム（E S : Expert System，以下E Sとする）や、機械翻訳システム、知能ロボットなどがある。

日本においては、A IはE Sを中心に銀行・証券分野、建設分野等、多くの産業分野で実用化されている。（このA Iを以下ではA I（E S）という）

また最近、「あいまいさ」を処理するファジイ理論や、脳の神経回路の働きを模擬した機能をもつニューロ技術を取り込んだシステムも実用化されはじめている。A I（E S）は、知識情報処理を中心とした記号処理を主な対象としているのに対し、ニューロは認知処理を、ファジイは技能処理を得意とし、共にパターン認識情報処理を主たる対象としている。

#### 2.1.2 研究開発の経緯<sup>1) ほか</sup>

A I研究は、1956年にダーツマス大学で人工知能セミナーが開催されたのに始まる。当初はパターン認識の研究が中心で、郵便番号読み取り装置などが実用化されたが、機械翻訳等の難しさが壁となり、1970年頃はA I研究は低調となった。1970年代後半に米国スタンフォ-

ト大学で知識工学の概念を導入したE Sが開発され、医療診断システムMYCINなどが発表されると、A IはE Sを中心に1980年代から世界的ブームとなった。また、MICYNからは診断・コンサルティング用ツールとしてEMYCINが誕生している。日本では1982年にA I向けコンピュータの研究開発として「第五世代コンピュータプロジェクト」が開始され、その成果を受けて1992年度からさらに応用研究が実施される予定である。また、ポスト第五世代コンピュータプロジェクトとして「新情報処理技術プロジェクト」が1992年度から10～12年計画で開始される予定にある。

表—10にA I研究の主な動きを、表—11に初期のころの代表的なE Sを示す。

表-10 A I の研究開発経緯

年代	A I 研究開発の経緯	主なA I用言語	主なA I用汎用ツール
1950年代	・ダートマス会議開催 (AIの誕生) (1956)		GPS(一般問題解決システム, 1959)
1960年代	・自然言語理解 (1964) ・論理プログラムの基礎となる「融合原理」 (1965) ・知識表現 (1968)	LISP (1960)	
1970年代	・認知科学の誕生 (1973) ・フレーム理論 (1975) ・知識工学の提唱 (1977) ・第6回IJCAIを東京で開催, 応用人工知能が盛んになる (1979)	PROLOG (1972)	OPS KRL AGE EMYCIN (1979)
1980年代	・AIの世界的ブーム ・「第五世代コンピュータプロジェクト」の開始 (1982)	ESP GHC Smalltalk80 (1983)	KEE (1984) ART (1984)
1990年代	・「第五世代コンピュータプロジェクト」 PSIマシンにより並列処理を実現 (1990)		

(注) ES: エキスパート・システム, IJCAI: 人工知能国際学会  
出典 各種資料より作成

表-11 初期のころの海外の代表的なエキスパートシステム

システム名	開発年	記述言語等	概要・特徴等
MACSYMA	1971	LISP	数式処理システム 代数や微積分に関する知識ベース
MYCIN	1975	INTERLISP EMYCIN	医療診断システム 血液伝染病と肺膜炎の診断, 及び投薬
DENDRAL	1975	INTERLISP SAIL	有機化合物の構造式決定支援システム
INTERNIST/CADUCEUS	1975	INTERLISP	内科疾患診断システム
SOPHIE	1975	INTERLISP	電子回路のCAIシステム
PROSPECTOR	1979	INTERLISP	鉱物資源(モリブデン鉱)に関する探査アシスタントシステム
PUFF	1979	EMYCIN	肺機能障害診断システム
XCON/R1	1981	BLISSB, OPS5	VAXコンピュータシステムの構成決定支援システム
DIPMETER ADVISOR	1983	INTERLISP	油田採掘分析システム
ACE	1983	FRANZLISP, OPS4	電話ケーブルの保守, 管理支援システム

出典 各種資料より作成

## 2.2 基礎技術

A I の基礎技術は、知識獲得、知識表現、推論、視覚・言語理解などからなり、それらをシステムとした標準的な E S を図一 2 に示す。

本節では、上述の知識と推論についての現状技術の他、ファジィやニューロに関する技術の概要を説明する。

### 2.2.1 知識

#### (1) 知識ベース<sup>2) ほか</sup>

A I では知識を、宣言的知識と手続き的知識に分類する。前者の宣言的知識は、たとえば「トマトは赤い」「二郎の兄は太郎である」というような単なる事実をさし、後者の手続き的知識は、たとえば「病気になったら薬を飲む」「雨がふったら傘をさす」というような規則を示す知識である。このような、宣言的知識や手続き的知識の集まりを「知識ベース」と称する。

現在までに提案されている知識表現の手法として、主なものをあげると次のようになる。

- ①意味のネットワーク
- ②フレーム理論
- ③プロダクションシステム
- ④述語理論

以下、各手法についての概要を説明する。

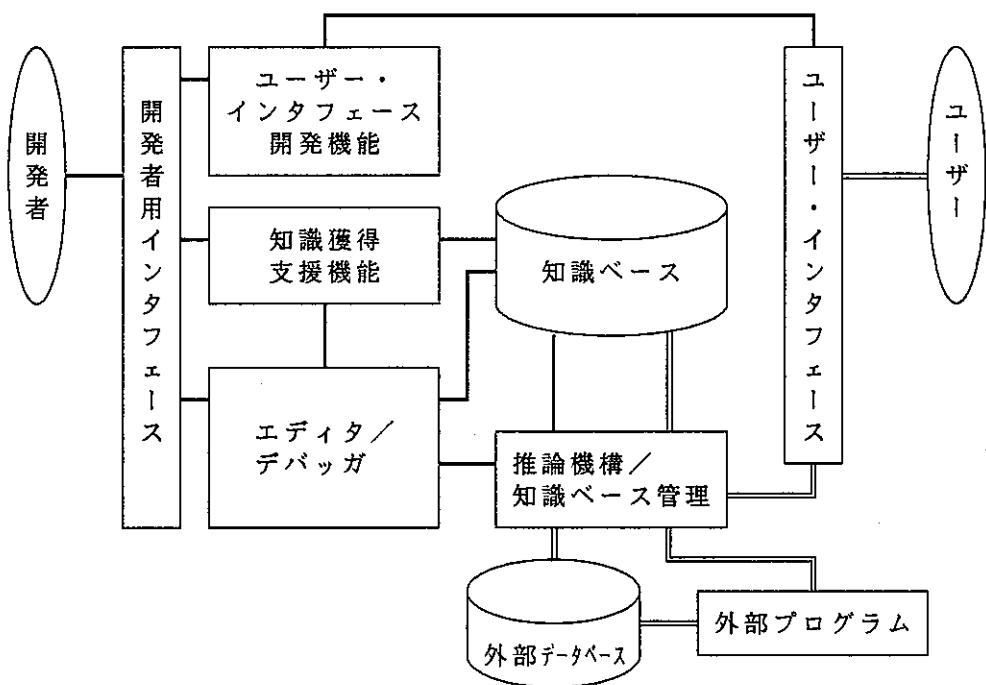
#### (a) 意味のネットワーク (Semantic Network)

物、事実、概念などをある関係（包含、性質、階層など）でネットワーク状に結び合わせて表現する方法である。ネットワークの表現にはノード（意志決定の分岐点、物・事実・概念に相当する）とリンク（関係）を用いる。

宣言的知識の表現には適しているが、手続き的知識には向かない。

#### (b) フレーム理論 (Frame Theory)

フレームとは、「もの」を理解するときの枠組みであり、ある特定の状況に関する



(注) ——; 開発者からの関係  
 ==; エンド・ユーザーからの関係

図-2 標準的なエキスパートシステムの基本機能構成<sup>④)</sup>

る情報（たとえば、人間が一度に想起または連想する事象と関連する概念との結合関係）を保持したデータ構造をいう。フレームはフレーム名と、属性名、属性値から成るスロットで構成される。一つのフレームの中の要素はそれをさらに詳述する自分のフレームを持ち、各フレームは階層構造になっている。フレームはその上位のフレームの情報を継承する。

最近の A I ツールではフレーム表現をオブジェクト指向表現に置き換えたものがでてきてている。オブジェクト指向表現では、対象をクラスとインスタンスに分けている。たとえば、「人間」という対象について「人間全般」がクラス、「Aさん」がインスタンスになり、哺乳類と人間といった階層関係とクラス-インスタンス関係の両方の枠組みを持つ。宣言的知識のみでなく、手続き的知識を表現することができる。

#### (c) プロダクションシステム (Production System)

「もし～ならば～である (IF ~ THEN 文)」という形式で知識を表現するシステムである。この「IF ~ THEN 文」を「プロダクションルール」または「ルール」と称する。

代表的な適用例としては、医療診断エキスパートシステム M Y C I N がある。

ルール表現に「あいまいさ」を考慮するためには、「確信度」や「ファジィ理論」などが採用されている。

確信度は知識や結論のあいまい性・不確実性を表すために、確信度係数（プラス 1 からマイナス 1 の数値で表される確かさの度合い）をルールに付け、ある事実が得られた時にそのルールによって確信度係数の数値が変更されていく。

ファジィ理論はルールの条件部と結論部にファジィのメンバーシップ関数を記述し、推論ではこれらの値を合成することで結論を生成する。

#### (d) 述語論理

知識の表現の単位として、基本命題を述語とその引数で記述する。

例えば、「b は a の父親である」とは、

FATHER (b, a)

のように表現し、FATHER が述語で、a, b が引数となる。

A I 向き言語の P R O L O G はこの論理式を採用している。

## (2) 知識獲得

領域専門家などからの知識獲得は A I の重要な課題となっており、これを支援するための知識獲得支援ツールの研究開発が進められている。領域専門家をベースに初期知識ベースを作成するが、テスト的運用によりルールの過剰汎化や過剰特殊化をチェックして適切なものに洗練化していく必要がある。

事例や関連知識からの知識抽出と利用の方法としては、ルールインダクション (rule induction) や概念学習などの知識ベースを自動生成する学習アプローチと、事例ベース推論やニューラルネットワーク利用など知識ベースを介さず事例を直接利用するアプローチとがある。ルールインダクションとは、専門家の知識を具体的な事例として与えると事例の類似性やパターンを調べ、Decision-tree やルールを自動的に生成するシステムである。

### 2.2.2 推論

解答を導出するための推論は、次の 3 つに類別される。

- a. 演繹的推論：事実と規則から結論を推論
- b. 帰納的推論：事実と結論から規則を推論
- c. 類推 : 規則と結論から事実を推論

推論の代表的な方式としては次のものがある。

- ①前向き推論
- ②後ろ向き推論
- ③黒板モデル
- ④ファジィ推論
- ⑤事例ベース推論

以下、これらの方について説明する。

#### (1) 前向き推論

プロダクションルールにおいて、条件部 (I F で示される事実) から処理部 (T H E N 以降の結論部) を導く推論方式。多くの E S で採用されている方式である。

## (2) 後ろ向き推論

前向き推論と逆に仮説（処理部、結論部）から仮説が成立するための条件を導き出す推論方式。MYCINで採用された方式である。現在のESでは前向き推論に比べあまり採用されていないが、診断型システムでは多く採用されている。

## (3) 黒板モデル(blackboard model)

知識ベースを複数のモジュールに分け、個々のモジュールを「黒板」と呼ぶ共通の作業領域を介して協調させる（黒板に解決すべき問題を書き込むと、あるモジュールがその一部を処理して中間結果を黒板に書き込み、それを受けて別のモジュールが処理を進め、最終的な結論に導くまで続ける）ことで推論する方式。原型はHEARSEI IIという音声理解システムで、これを一般化したAIツールとしてAGEがある。

## (4) ファジィ推論

ファジィルールで記述されている知識をファジィ演算やファジィ関数の合成により推論する方式である。ファジィ推論の方法については次項にて述べる。

## (5) 事例ベース推論 (Case-Based-Reasoning)<sup>⑤)</sup>

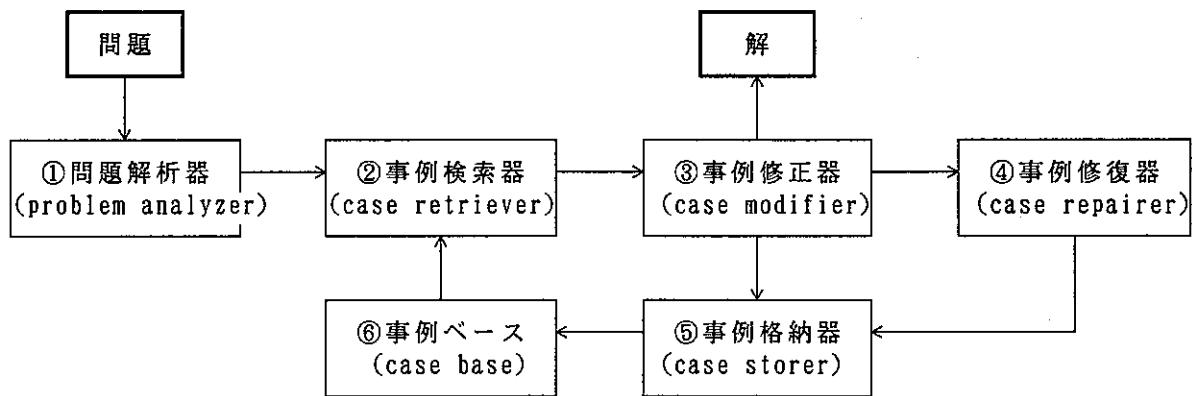
事例ベースは問題解決事例（成功例と失敗例）の集まりで、各事例に重要な属性によって特徴づけられており、これを利用した推論を事例ベース推論と呼ぶ。

図-3に推論手順を示す。

事例ベース推論の特徴は以下の通りである。

- ①部分的にしか照合しない事例が候補となり得ることから、事例が有効に活用される可能性が高い
- ②データベース検索とは異なり、修正または修復された結果が新しい事例として事例ベースに登録される（自己増殖的）
- ③事例の特徴づけが構成要素であり、問題解決に関連する属性を用いて、必要かつ十分な特徴づけがなされなければならない

例題集合に対する自己組織化を基本とするバックプロパゲーション型ニューラルネットワーク（バックプロパゲーション法によるニューラルネットワーク：それぞれについては後述）や、例



- ① 与えられた問題を解析して特徴づけを行うとともに、予想される問題点を列挙する。
- ② 与えられた問題の特徴と比べて、最もよく照合する事例を事例ベースから検索する。
- ③ 検索された事例と問題の間で照合しない部分の違いを考慮しながら、領域知識を用いて事例の解または解法に対する修正を施し、与えられた問題の解または解法を導く。
- ④ 検索された事例の問題への適用に失敗した場合に、領域知識または別の事例を使って失敗の原因を解析し、同じ誤ちを回避するように失敗事例の特徴づけを変更する。
- ⑤ 解決された問題を新しい事例として獲得する。特徴づけをして事例ベースに格納する。  
失敗事例も同様に格納する。

図－3 事例ベース推論システムの構成<sup>6)</sup>

題集合に対してメンバーシップ関数を調整することにより適応が可能なファジィ推論は事例ベース推論の一種とみなすことができる。

### 2.2.3 ファジィ理論

ファジィ (Fuzzy)とは羽毛のようにふわふわとして境界が明確でないという概念で、ファジィ理論は不確かさの様相を数学的に扱う理論である。

ファジィ理論は、1965年にカリフォルニア大学バークレイ校の Zadeh教授によりファジィ集合論が提唱されたことに始まる。その後、工学の分野を中心に理論面と応用面の研究が進み、制御工学やES分野に応用されはじめ、ファジィコンピュータの開発も進められている。

日本ではファジィ理論の研究・応用は世界的に進んでおり、列車の自動運転制御やプラント・プロセス制御などのマンマシンシステムへの適用に始まり、エレベータの群管理制御や自動車制御、家電制御などへ浸透しつつある。ESに対しては、「あいまいさ」を含んだ知識情報を生かすためにファジィ推論が用いられるようになり、金融・証券などでは、トレーディングシステムなどの判断支援などへの適用が始まっている。

ファジィ理論の基礎的研究と利用研究を総合的に推進し、また諸外国と積極的な研究交流を図るために国際ファジィ工学研究所 (LIFE : Laboratory for International Fuzzy Engineering Research)が設立されている。

表-12にファジィ研究の主な動きを示す。

以下にファジィ理論の概要として、ファジィ集合、ファジィ推論、及びファジィ制御について概説する。

#### (1) ファジィ集合<sup>⑥)</sup>

全体空間Xにおけるファジィ集合 (fuzzy set) Aは、メンバーシップ関数 (membership function)

$$h_A : X \rightarrow [0, 1]$$

によって特徴付けられる。ここで  $h_A(x)$  はXの要素xがAに属する度合いをあらわす。

たとえば、「41°C近辺の適度な湯加減」のメンバーシップ関数は図-4のようになる。

表 - 1 2 ファジィ理論の研究開発の経緯

年	ファジィ理論の研究開発経緯
1965年	Zadeh教授によるファジィ集合の提唱
1974年	イギリスロンドン大学 Mamdani, E.H教授によりスチームエンジンの自動運転に ファジィ推論を応用
1980年	M I N - M A X - C . G (重心) 法が考案され、現在も最も多用されている デンマーク Smidt社による、セメントキルン用ファジィコントローラーの実用化 - 産業応用第1号
1980年代	日本での実用化の開始 ・浄水場薬品注入制御（秋田市・神奈川県、東工大・富士電機、1985年） ・地下鉄の自動運転制御（仙台市、日立製作所、1987年） ・ポンプ浚渫船の自動運転制御（明電舎、1987年）
1985年	国際ファジィシステム学会(IFSA: International Fuzzy Systems Association) 設立
1989年	日本ファジィ学会設立
1989年	国際ファジィ工学研究所(LIFE)設立

出典 各種資料より作成

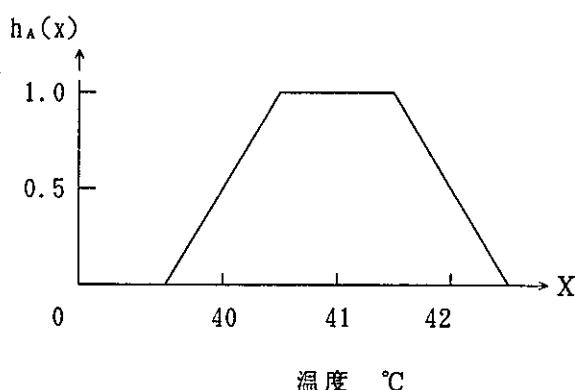


図 - 4 メンバーシップ関数の例 - 適度な湯加減

## (2) ファジィ推論<sup>7)</sup>

ファジィ推論とは、集合への帰属があいまいな対象をファジィ集合（メンバーシップ関数）として表現し、さらに因果関係があいまいな対象間の結合関係をファジィルールとして表現した上で、あいまいな観測事象に対し一般的に妥当な結果を与える推論方法である。

ファジィ推論の特徴としては次のことが挙げられる。

- ①パラメータで表現された技能処理が中心である。
- ②推論の実体は内挿、補間の1手法といえる。
- ③少ないルールで表現できる。
- ④例題集合によりメンバーシップ関数をチューニングすることが必要で、非線形最適化問題を解く必要がある。
- ⑤専門家から獲得した経験則はチューニングによって修正されることにより、原型を留めないことがある。
- ⑥入出力データに適合させることはできるが、その根拠を説明できないため、十分なテストデータが利用可能でない場合には信頼性が低い。
- ⑦多段的に適用すると、あいまいさの爆発を起こす危険がある。

## (3) ファジィ制御

ファジィ制御が登場するまでの制御は、P I D制御法則や最適制御法則が使用されていた。P I D制御は装置の構成がシンプルでパラメータの調整が簡単であるため（制御偏差の2乗積分最小、限界感度法など）、今日でも広く使用されている。最適制御は制御対象の厳密な数学モデルを必要とする。

ファジィ制御は専門家の制御知識（経験知識を含む）をファジィプロダクションルールとして知識表現し、ファジィ推論により出力を計算する。計算時間を短縮させるため、実際には推論の前提是ファジィ値でなく普通の値であることが多い。

### 2.2.4 ニューロ

脳は多くのニューロン（神経細胞）が結合してできた大規模なシステムであり、情報の並列処理、学習機能、自己組織化能力および連想記憶、パターン認識、総合的判断などの情報処理機能などの優れた特徴をもっている。

ニューラルネットワークは、このような脳における神経回路網(Neural Network)を数学的にモデル化したものであり、非線形なニューロンモデルを人工的に多数結合し、並列分散的に情報処理を行うものである。ニューロン同士を接続して信号を受け渡す機構をシナプスと称し、ニューロン同士の結合の強さを重み付け関数で記憶する。ニューロンは、それが結合している全てのニューロンから受け取った信号に、経由してきたシナプスの重みをかけて入力値とこの値の総和を取る。総和値が「しきい値」を超えるとニューロンが「発火」し、次のニューロンに出力信号を送り、この処理を繰り返す。「学習」は、ニューロンの結線やシナプスの重み付け関数を変化させることによって行われる。

一般的にニューロンとは、ニューロンのモデルを用いた人工のシステムを総称したものとさす。

図-5にニューロンモデルを示す。ニューラルネットワークは、このようなニューロン単体をネットワーク状に多数組み合わせたものである。

ニューラルネットワーク技術の研究開発はコンピュータができる以前の1943年のMcCulloch と Pitts(米)のニューロンモデルの提唱に始まるとしている。表-13にニューラルネットワークの研究開発の経緯を示す。

以下に、代表的なニューラルネットワークについて概説する。

#### (1) パーセプトロン(perceptron)

1個以上のS(感覚、刺激)層、1個以上のA(連想)層、1個のR(反応)層が直列に結合したニューラルネットワークである。

S層に入力パターンが与えられると固定増分訂正法(対応する出力パターンと理想値の差からシナプス結合の伝達効率を更新するアルゴリズム)により、線形分離可能な入力パターンの識別が行われる。しかし、線形分離が不可能な対象に対しては有効でないため、適用範囲に限界がある。

#### (2) ホップフィールドモデル(Hopfield Model)

相互結合型のニューラルネットワークである。

対称シナプス結合(ある処理ユニットiから別のユニットjにシナプス結合があれば、必ずjからiへの結合も存在する、 $w_{ij} = w_{ji}$ )をもつある種のニューラルネット

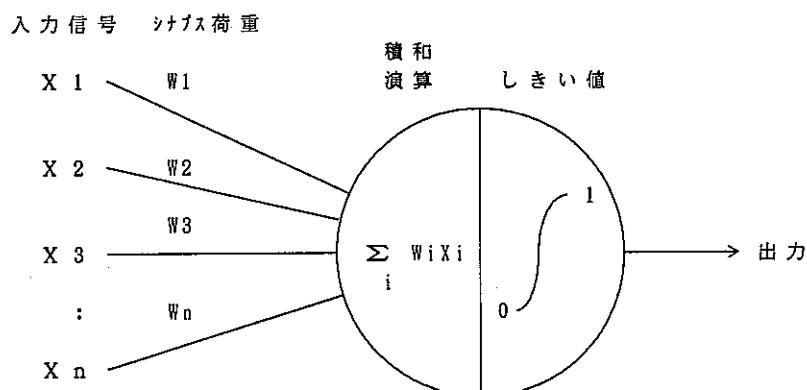


図-5 ニューロンモデル<sup>⑧)</sup>

表-13 ニューラルネットワーク技術の研究開発の経緯

年	ニューラルネットワーク技術の研究開発経緯
1943年	ニューロンモデルの提唱 (McCulloch & Pitts) 多数の入力信号をもとに積和演算により1つの答えを出力する。
1949年	学習の仮説の提唱(D. O. Hebb) 「脳で行われている学習はシナプス荷重の変化によるものである」 — ニューロン間の結合の強度の変化で学習が実現できる
1958年	パーセプトロンの開発(F. Rosenblatt) 形式ニューロンと学習仮説をくみあわせた最初のニューロコンピュータ 「第1次ニューロブーム」の引き金
1960年代	米国を中心とした「第1次隆盛期」
1969年	パーセプトロンの限界説(Minsky & Papert) より複雑な問題の処理に対して実用的でないことに対する警鐘 米国におけるニューロ研究の「冬の時代」
1982年	スピングラスモデル（1970年代に研究された連想記憶モデル）をベースとしたホップフィールドネットの提唱 (J. J. Hopfield)
1983年	ボルツマンマシンの開発(J. Hinton ほか)
1986年	バックプロパゲーション法（逆伝播法）の提唱(D. E. Rumelhartほか) ニューラルネットワークの実用化へ 「第2次隆盛期」
1987年	第1回国際ニューラルネットワーク会議

出典 各種資料より作成

トワークにおいては、エネルギー関数が存在し、ネットワークはこのエネルギー関数を減少させるように動作することが示された。

ホップフィールドモデルは、巡回セールスマン問題（ $n$  個の都市を一人のセールスマンが順次訪問するとき、総距離を最小とする経路を求める問題）に適用され、従来の計算手法では困難であった大規模な問題が解けることを示した。この方法では最適解を得られる保証はないが、多くの場合、準最適解が得られるとされている。

### (3) ボルツマンマシン (Boltzman Machines)

相互結合型のニューラルネットワークである。

ホップフィールドモデルが決定論的な入力パターンに対するものであるのに対し、ボルツマンマシンは確率的に動作するニューロンからなるニューラルネットワークであり、その平衡状態はボルツマン分布で記述される。

この方法は、収束が遅く、局所的な最小値に収束してしまう弱点がある。それを解決する方法として次のような方法をとることがある。つまり、エネルギー関数を減少させようと確率的にニューロンが動作するとき、各ニューロンの動作の揺らぎを決定する温度パラメータを調整することにより、シミュレートアニーリング（模擬冷却）する。このシミュレートアニーリングとは、平衡状態を求める反復計算の中で、熱力学的温度に対応するパラメータの値を、初めは高い値から始めて急速に値を小さく（急冷）し、その後はゆっくりとさらに小さい値にしていく方法である。

### (4) バックプロパゲーション法

多層構造のネットワークの学習則であり、逆伝播学習則とも呼ばれる。

入力層（入力パターンの処理層）と出力層（出力パターンを出す処理層）の間に、隠れ層（hidden layer）と呼ばれる処理ユニットの層を持ったニューラルネットワークを用いる。

あるパターンが入力されたときに、その出力と望ましい出力との二乗誤差が極小となるように、学習によりネットワークの結合荷重を変化させる方法である。学習信号（理想値と実際値の誤差）は入力信号の伝播方向とは反対に、出力層から入力層に向かって逆に伝播されることにより、入力パターンを識別できるようなシナプス結合の伝達効率を求めるものである。

## 2.2.5 A I (E S), ファジィ, ニューロの比較<sup>7)</sup>

A I (E S) は知識処理を, ファジィは技能処理を, ニューロは認知処理を得意としており, 知能システムの実現には, それぞれの技術の長所を融合した技術が求められる。A I (E S), ファジィ, 及びニューロの各技術の比較を表-14に示す。

### (1) 各技術が得意とする情報処理

情報処理は音声・画像・文字などに代表される非記号的・アナログ的なパターン情報処理と, 自然言語に代表される宣言的・手続き的に表現された記号的な知識情報処理とに大別される。

パターン情報処理は, 認知処理と技能処理とに類別される。認知処理は, パターン情報がもつ特徴を抽出, 分析してあるクラスに識別することが求められ, 技能処理では, その認知に基づく作業が求められる。

一方, 知識情報処理は, 演繹的推論, 帰納的推論, 類推の3つに類別される。

A I (E S) は, これまで知識情報処理を主に対象としてきており, 中でも演繹的推論が適している。

パターン情報処理に対してはA I による解決も可能であり, データ解釈分野のE S が開発されているが, 認知的処理にはニューロが, 技能的処理にはファジィがより適しているとされている。

### (2) 各技術の問題解決方式

問題解決の方式は, 以下のように探索, 知識, 事例ベースの3つに類別される。

①知識ベース: 対象領域に関する, 専門知識や経験的知識に基づいて解を得る方式。エキスパートシステムの最も標準的な解決方式。

②探索ベース: 代替案の生成, 評価, 修正の繰り返しにより, 試行錯誤的に解を得る方式。複雑なスケジューリング問題等で採用されている。

③事例ベース: 過去の問題解決事例(成功例及び失敗例)を利用して解を得る方式。

A I (E S) にはどれも適用可能であるが, ぼう大な知識獲得が困難な場合には, 知識ベースのすき間をうめる手法として事例ベースの解決方式を採用することが注目されている。

ファジィは知識ベースと事例ベースの両方と関連し, メンバーシップ関数のチュー

ニングに豊富な事例ベースを必要としている。

ニューロは事例ベースの問題解決法をとっている。訓練事例集合に対し、ニューラルネットの内部構造を学習に基づいて変えることにより、汎化させていく。

### (3) 各技術の学習

A I (E S) では領域専門家からの知識獲得が困難なことが多いことから、これを支援するための知識獲得支援ツールの研究開発が盛んである。機械学習の手法としてはS B L (Similarity-Based Learning : データ駆動型（帰納的）学習で、類似性に基づく) や、E B L (Explanation-Based Learning : 目標駆動型（演繹的）説明ベース学習で、説明に基づく) が使われている。

ニューロでは誤差関数を最小化するようにネットワークを構成するユニット間の結合の強さを調整することが学習であり、逆伝搬学習則はその代表的なアルゴリズムである。

ファジィでは、ルールのメンバーシップ関数を調整することが学習であり、非線形最適化手法が扱われる。

### (4) 各技術の特徴

A I (E S) の長所は演繹的に推論するため、結果の妥当性や透明性が保証されていることである。

ニューロの最大の長所は、知識の獲得が不要である上に並列高速処理が可能なことである。

ニューロとファジィの短所は、推論結果の妥当性を説明する根拠に乏しいことがある。

### (5) 各技術の応用対象領域

各技術の対象となる問題は、解析型と合成型に大別できる。

①解析型問題領域：事象の構造と構成要素の特性が与えられたときの特性を導く問題で、あらかじめ解の候補が容易されている。  
対象問題は解釈、診断、制御等。

②合成型問題領域：事象の特性が与えられたときに、これを実現する事象の構造と構成要素の特性を決定する問題で、解の候補が用意されて

いない。

対象問題は計画、設計等。

解析型では、認知処理や技能処理が必要であるため、ニューロやファジィが適しているが、複雑な対象に対しては知識処理的な接近も必要となる。

合成型では、知識処理が中心となり A I (E S) が適している。

#### (6) 各技術の融合

人間の知的な活動は、事象の認知、問題の発見、関連知識の参照、結果の学習などの機能を複雑に組み合わせた過程であるため、それぞれに適した A I (E S)、ファジィ、ニューロなどの技術を組み合わせて、より優れた人工知能システムを追求する動きが加速されている。（図一6）

表-14 A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較<sup>7)</sup>

## (a) A I (E S), ファジィ, ニューロが得意とする情報処理

情報処理技術		A I	ファジィ	ニューロ	備考
パターン情報処理 (非記号的・ アナログ的)	認知	△	○	◎	例:球審のストライク/ボールの判定
	技能	△	◎	○	例:ボールを判断して打つバッター
知識情報処理 (記号的)	演繹	◎	×	×	
	帰納	○	△	△	
	類推	○	△	△	

(注) ◎: 最も得意, ○: 得意, △: 可能, ×: 不得意

## (b) A I (E S), ファジィ, ニューロの問題解決方式

情報処理技術	A I	ファジィ	ニューロ
探索ベース	○		
知識ベース	○	○	
事例ベース	○	○	○

## (c) A I (E S), ファジィ, ニューロの学習

情報処理技術	A I	ファジィ	ニューロ
知識源	専門家&文書	専門家&文書	事例集合
知識獲得	インタビュー	インタビュー	不要
洗練化	知識ベース管理	membership調整	誤差関数最小化
学習技術	機械学習手法	非線形最適化	逆伝搬学習法

## (d) A I (E S), ファジィ, ニューロの特徴

情報処理技術	A I	ファジィ	ニューロ
長所	<ul style="list-style-type: none"> <li>推論過程が論理的で透明</li> <li>推論結果の妥当性の説明が可能</li> <li>知識ベース拡張が容易</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>並列処理が可能で高速化可能</li> <li>領域知識を利用可能</li> <li>事例により調整可能</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>知識獲得が不要</li> <li>並列処理が可能で高速化可能</li> <li>ノイズや破壊に頑健</li> </ul>
短所	<ul style="list-style-type: none"> <li>知識獲得が必要</li> <li>競合する知識の制御が難しい</li> <li>逐次処理のため遅い</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>推論結果の説明が不可能</li> <li>多段であいまいさ爆発を起こす</li> <li>知識獲得が必要</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>推論結果の説明が不可能</li> <li>事例に過剰適合の危険がある</li> <li>学習に多量の計算が必要</li> </ul>

表 - 1 4 A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較<sup>7)</sup> (つづき)

(e) A I (E S), ニューロ, ファジィの応用対象領域

情報処理技術		A I	ファジイ	ニューロ
解析型問題	解釈問題	△	△	○
	診断問題	○	△	△
	制御問題	△	○	△
合成型問題	計画問題	○	×	×
	設計問題	○	×	×

(注) ○ : 得意, △ : 可能, × : 不得意

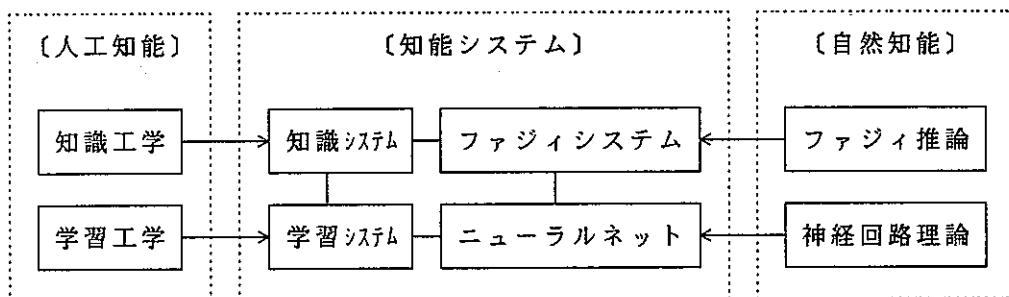


図 - 6 A I (E S), ファジィ, ニューロの各技術の融合<sup>7)</sup>

## 2.3 言語

A I プログラムを作成するための言語として、記号処理や推論能力に適したL I S PやP R O L O Gなどが使用されている。また、C言語やP L / I, F O R T R A N等の手続き型言語も他のシステムやデータベースとの融合を図る上で用いられている。

以下に主なA I 向き言語を概説する。

### 2.3.1 L i s p (List Processor)系

1950年代頃、アメリカ・マサチューセッツ工科大学(M I T)のMcCarthy, J.により開発された言語で、最も多くのA I 用に使用され、特に米国で開発されているA I システムのほとんどはL I S Pで開発されている。

計算の過程を、関数の合成で記述する記号処理言語で、非手続き言語(ノイマン型の逐次的な手順実行の概念によらずに記述するプログラミング言語)である。短所は、現場でのシステム運用などの際に、他の言語あるいはシステムとの融合が難しいことがある。

このL I S PはM I TのMacLisp系列と、ゼロックス社のInterLisp系列とに大別される。

これらの仕様を統一して標準化したものがCommonLispである。

### 2.3.2 P r o l o g (Program in Logic)系

1972年にフランス・マルセイユ大学のColmerauer, A.らにより開発された言語である。

処理対象間の関係を示す論理式で記述する論理型言語で、非手続き言語である。推論機能をもっているため、L I S Pに比較してプログラミングが容易でわかりやすい。

第五世代コンピュータプロジェクトで開発言語のベースに採用され、E S P (Extended Self-contained Prolog)が開発されている。(株)A I 言語研究所(A I R : AI Language Research Institute)では、E S Pをベースとしてさらに高機能化を図り、汎用コンピュータ上で動作可能な高機能A I システム記述用言語、Common E S Pの試験研究を行っている。このプロジェクトは1988年3月に始まり1992年3月で完了する予定である。

### 2.3.3 オブジェクト指向系

データとデータに対する処理をひとまとめにしたオブジェクトと称するモジュール(単位) すべての処理を記述する。プログラムが単純化され、生産性と信頼性の高いシステムを構築できる。代表的な言語としては、ゼロックス社のSmalltalk 80があり、LispやC言語にオブジェクト指向の機能を追加したものなどがある。

### 2.3.4 C言語系

推論処理機能の記述などで難点があるが、開発や運用面で既存システムとの整合性をとりやすいため、比較的最近開発されたA I ツールには、C言語で記述されたものが多い。

代表的なA I ツールとしてはART-IMやNEXPERT OBJECTなどがある。

## 2.4 マシン

従来の第4世代までのコンピュータは、前もって与えられた一つ一つの命令の実行の順序（逐次的処理の手順）に従って計算が行われるノイマン型コンピュータである。

A I を実現するための知識情報処理においては、記号処理、非手続き的処理、専門家知識や常識支援による処理（知識ベース型処理）の概念を基本に据えた新しい情報処理体系や、知的インターフェース（自然言語、音声理解、画像理解等）機能を備え、高速で処理ができる、問題を協調的に解決するための並列処理ができる非ノイマン型コンピュータが必要とされる。

日本では、通産省が1982年に10年計画で「第五世代コンピュータプロジェクト」を国家プロジェクトとして開始した。（財）新世代コンピュータ技術開発機構（I C O T）が開発主体となって、人工知能的処理を目的とした非ノイマン型の新世代のコンピュータ開発が行われており、1991年度が最終年度となる。

また、人間のあいまいさを伴う思考過程に極めて近い形で推論を行わせようとするファジィ・コンピュータや、人間の脳の神経回路網（ニューラル・ネットワーク）の働きを模倣したニューロ・コンピュータなどの研究開発が行われている。

### 2.4.1 ワークステーション

L I S P や P R O L O G などの A I 向き言語で記述されたプログラムを効率良く実行するために設計された A I 専用のワークステーションが開発されている。

①ワークステーション : SYMBOLICS 3000, L A M D A マシン,  
S U N, A P O L O, M E L C O P S I など

②バックエンド型 A I マシン : F A C O M  $\alpha$  (FACOM M, S シリーズと接続) など

③パーソナルコンピュータ : P M C 177000 など

最近は C 言語をはじめ、P L / I や COBOL をベースとするツールの開発が進み、汎用コンピュータ、特にパーソナルコンピュータの利用が進んでおり、PC-9801 や IBM PC などで稼働する A I システムが増えている。

### 2.4.2 第五世代コンピュータ<sup>8), 10)</sup>ほか

「第五世代コンピュータプロジェクト」は通産省の委託を受けて（財）新世代コンピ

ュータ技術開発機構（I C O T）が1982年度から10年計画で開発を進めている。

本プロジェクトは前期（1982～1984年度），中期（1985～1988年度），後期（1989～1991年度）に分けて進められ，1991年度で完了する予定である。

各計画期の目標あるいは成果は表－15の通りである。

1991年度で本プロジェクトを終了するのを受け，1992年度からは並列推論マシンPIM（Parallel Inference Machine）を使用し，人間の遺伝子の解析や法律判断など，実際の複雑な問題を解決できる実用システムを目指す新プロジェクトを5～6年計画で開始する予定である。開発体制は，これまでのI C O Tに代わり，メーカーや海外の研究機関なども含めた産官学の新たな組織が検討されている。遺伝子解析では，米国の研究機関が整備しているデータベースなどを知識情報として活用し，約30億の単位からなる人間の遺伝子の全構造を決定しようという国際研究計画「ヒト・ゲノム計画」への応用を試みる予定である。また，法律判断では，膨大な判例や条文を与え具体的な訴訟事例の解決能力などを検証する。

なお，遺伝子解析への応用研究は2つのサブシステムで構成されているが，その概要を以下に述べる。

#### (1) 総合的な分子データベースの構築

データベース管理システムKappaにGen Bank（ロスアラモス研究所）とPIR（米国生物医学研究財団）のデータをすでに格納し，演繹オブジェクト指向データベース言語を使って蛋白質の機能に関する知識ベースを構築している。

将来的には，系統発生や種，遺伝子，RNA，蛋白質，分子などの基本的知識を含んだ知識ベース／データベースの開発をめざしている。

#### (2) 蛋白質の構造予測，機能予測システムの実現

蛋白質の配列データから高次構造を予測する1つの方法は，構造がわかっている蛋白質の配列から意味のあるパターンを抽出して，その配列パターンを未知の蛋白質の中から探し出して構造を予測する方法である。

意味のあるパターンを抽出するため，蛋白質を進化，機能，構造などの観点からグループに分類し，同一グループの配列比較（マルチプルアライメント）をして，共通パターンを抽出しようとしている。

そのために、本研究では、ダイナミックプログラミングやシミュレーテッドアニーリングなどに基づいて、配列比較の並列プログラムを3種類開発し、これらのプログラムによる結果と専門家の結果との比較検討や、アミノ酸の性質などの生物的な知識を利用したアライメント技術の改良を行っている。

将来的には、高次構造予測などの並列プログラムを開発し、生物学者の配列解析支援ツールの一部を提供することをめざしている。

表-15 第五世代コンピュータの研究開発経緯 83.10月

開発時期	成 果
前期 1982～ 1984年度	ハードウェア： 逐次型推論コンピュータ P S I 関係データベースマシン Delta ソフトウェア： 逐次型論理言語 E S P 逐次推論制御ソフトウェア（OS） S I N P O S
中期 1985～ 1988年度	ハードウェア： 並列型推論コンピュータ M u l t i - P S I ソフトウェア： 並列論理型言語 K L 1 並列推論制御ソフトウェア P I M O S 分散知識ベース管理基本ソフトウェア Kappa 簡単な文章・談話を理解する談話理解実験システム D U A L S
後期 1989～ 1991年度	ハードウェア： 並列推論マシン P I M (Parallel Inference Machine) コンピュータ 1000台を並列につなぎ、K L 1で書かれた プログラムを数百MLIPS (Million Logic Instructions Per Second) (汎用コンピュータの約1000倍) のスピードで処理。 大規模知識処理／並列処理実験環境の提供 基本ソフトウェア： 並列推論制御ソフトウェア（OS） P I M O S 並列知識ベース管理システム K B M S 知識プログラミング・システム： 知識の記述、蓄積、利用及び並列処理の効果的利用のためのソフトウェア 技術の確立 そのほか、機能実証／並列応用実験ソフトウェアを試作し、システムの評価を行った。

「第9回第五世代コンピュータに関するシンポジウム（1991年6月）」でデモンストレーションされたアプリケーション

- ①タンパク質の配列解析実験プログラム（3次元ダイナミック・プログラミングによるマルチ・アライメント）
- ②同（並列シミュレーテッド・アニーリングによるマルチプル・アライメント）
- ③階層再帰並列レイアウト実験システム「c o - H L E X」
- ④並列版L S I - C A D 実験プログラム（セル配置）
- ⑤法的推論実験システム「H E L I C - I I」  
法律家が行う推論を、ルール・ベースと事例ベース推論の2つの推論方式を補完的に組み合わせた知識処理としてモデル化し、それを並列処理する並列推論方式を開発
- ⑥適応型電子装置診断実験システム
- ⑦並列定理証明システムとその応用
- ⑧分子生物学データベース・システム
- ⑨並行プログラムの知的プログラミング支援システム「M E N D E L S Z O N E」
- ⑩論理アーキテクチャ設計支援システム「R O D I N」

### 2.4.3 ファジィコンピュータ<sup>11), 12) ほか</sup>

ファジィコンピュータは、ファジィ理論にしたがって「あいまいな」言語情報を処理するコンピュータで、現在研究開発の段階にある。

デジタルコンピュータではすべての情報を二値(0, 1)で割り切って処理するが、ファジィコンピュータは、0~1のアナログ信号を扱い、ファジィ推論を高速に実行する専用マシンである。

現在日本で試みられているファジィコンピュータの主なものとしては以下の2通りの例があるが、ファジィコンピュータはまだ実用化に入っていない。

① ファジィ推論のMin演算、Max演算、及びメンバーシップ関数発生のためのファジィ論理回路で構成される。アナログ技術を使用しており、超高速演算が可能である。

② ファジィ推論用ICを製作しこれを従来のデジタルコンピュータに接続する。

このファジィ推論用ICは、デジタルコンピュータに接続することを考慮してすべてデジタル技術(二値論理)を用いている。真理値として、0と1との間の連続値を許すのではなく、2進4ビットを用いて16段階で近似して表現する。

制御用のファジィコントローラは、従来のデジタルコンピュータを用いて、ソフトウェアによりファジィ推論を行っている例が多い。

最近は家電製品にファジィ制御が用いられているが、家電製品では、シミュレーションに基づいた推論結果をルック・アップ・テーブルとしてROMに書き込んでおき、センサーからの入力信号でそのROMから推論結果を読み出し、内蔵されている汎用のマイコンで制御する方法が多い。この方式をテーブル方式と称している。ルール数が膨大になるシステムや高速化を必要とするシステムでは、ファジィ専用チップやハード的に推論エンジンを内蔵したチップなど、ハードウェアで対応する方法が取られている。

表-16にファジィコンピュータの国内の研究開発状況を示す。

表-16 ファジィコンピュータの国内の研究開発の経緯

年	ファジィコンピュータの国内の研究開発経緯
1984年	ファジィ推論プロセッサを開発 (戸賀, 渡辺)
1984年	P-MOSプロセスで作成した電流モードで作動するファジィ演算素子を開発 (熊本大学 山川)
1987年	ファジィコンピュータで「倒立振子」を実験 (山川)
1988年	ファジィコントローラ FZ-1000 を開発 (オムロン) 専用ハードウェアとして最初のもの
1990年7月	ファジィプロセッサを開発 (沖電気工業, 熊本大学電気情報工学科) 処理速度は 7.5メガFLIPS
1990年7月	実用レベルで世界最高速度のファジィチップを開発 (オムロン) 処理速度は10FLIPS
1991年4月	世界初の1チップ化したファジィコントローラを開発 (富士通, 富士通VLSI)
1991年6月	ディジタル・ファジィICを開発 (オリンパス光学工業) 1チップで確定演算まで可能
1991年7月	ファジィ推論エンジン搭載の1チップファジィコントローラ「MB64110」を開発 (富士通) 家電分野, 計測器などに適用
1991年10月	パソコン(J-3100)用ファジィ推論ボードを開発 (東芝)
1991年10月	ファジィプロセッサを搭載した業界初のファジィWS「Fuzzy LUNA」を開発 (オムロン)
1991年11月	従来のソフト対応の約1万倍の高速度のファジィ推論を1チップにまとめたファジィチップを開発 (オムロン)
	その他, ファジィ・コントローラとして, 明電舎のファジイコントロールシステム 工業用コンピュータμOIRT-IIとファジィ推論パッケージで 構成. 富士電機のプログラマブルコントローラ「MICREX」 FUZZY-FM (ファジィ演算専用ファンションモジュール) を 搭載.

出典 各種資料より作成

#### 2.4.4 ニューロコンピュータ <sup>18) ほか</sup>

ニューロコンピュータは、人工のニューラルネットワークを活用して並列分散的に情報処理するコンピュータである。

ニューロコンピュータの主な特徴としては、同時（並列）処理、学習機能、アナログデータ処理に優れていることなどが挙げられる。

ニューロコンピュータは、問題解決自体が明確でない対象を学習によって処理することができるため、診断、制御、予測等を得意とする。さらに、莫大な数の組み合わせの中から最適な答えを求める最適化問題、ノイズに埋もれた情報を正確に認識するための認識処理への応用が有望とされている。

応用分野としては、パターン認識・理解、ロボット制御、大量のあいまい情報の処理などがある。

ニューロコンピュータの実現には、

①ニューラルネットワークの原理を既存のノイマン型コンピュータでソフトウェアにより模擬する

②ニューラルネットワークの専用ハードウェア

の2通りの方法があるが、①は学習時間がかかり演算量が膨大になるため、スーパーコンピュータレベルのCPUパワーのコンピュータが要求される。

専用ハードウェアを実現するために、ニューラルネットワークのメカニズムを組み込んだ半導体チップの開発が行われている。チップの開発では米国が先行しているが、1990年代に入ってからは、日本のメーカーでも盛んに研究開発が行われている。

ニューラルネットワーク専用ハードウェアとしては、

①ニューロアクセラレータ（ネットワークの演算を高速かつ効率的に行えるように設計された並列コンピュータで高速のMPU(Micro Processor Unit)やDSP(Digital Signal Processor)が用いられる）

②Si-VLSIニューロチップ（ニューラルネットワークそのものを模擬するアナログ回路あるいはデジタル回路により処理する方法がある）

③光ニューラルネットワーク（ニューラルネットワークそのものを模擬する）

の方式がある。アクセラレータは製品化されており、アクセラレータを用いたシステムが実用化されつつある。ニューラルネットワークが本格的に実用化されるのは、数百ニューロンのSi-VLSIチップが実用化されてからと考えられている。

1992年度から開始される「新情報処理技術プロジェクト」（通産省）ではニューロコンピュータや光コンピュータの研究開発が目標のひとつに設定されている。

ニューロコンピュータの国内の研究開発状況を表-17に、海外も含めた代表的なニューロチップの性能を表-18示す。

表-17 ニューロコンピュータの国内の研究開発の経緯

年	ニューロコンピュータの国内の研究開発経緯
1988年4月	ニューロシミュレータの開発 (日本電気)
1988年5月	ニューロコンピュータによるロボット制御技術の開発 (富士通)
1989年3月	世界初のアナログニューロチップ( $2\mu\text{mBi-CMOS}$ )を開発 (富士通) ニューロ製品第1号
1989年6月	パソコン(FMR)用ニューロシミュレータNEUROSIM/Lと高速演算ニューロボードを商品化 (富士通)
1990年4月	学習機能を持つニューロICの開発を発表 (リコー) 文字、画像の認識や、ロボット、機械などの制御に応用できる性能をもつ。ニューロICそのものに学習機能を持たせてあるので、外部コンピュータや、そのための特別のソフトを使う必要がない。
1990年7月	光ニューロチップを開発 (三菱電機) 1つのチップでアルファベット26文字を認識できるのは世界最初。 文字が少しゆがんでいても、かなりの判断をして正解を出す。
1990年9月	スーパー・ニューロ・コンピュータを開発 (富士通) 演算回路(ニューロ)を250個つなげたもので、高速処理が可能で、学習機能を有し、株式の相場予測に適している。1.2年後の製品化が目標。
1990年10月	学習機能を持つ世界初の光ニューロチップを開発 (三菱電機) 8個の神経細胞にあたる回路を持ち、これらの結合の強さを毎秒6億回変化させ、入力信号に対し正しい出力信号を出すよう学習する。
1990年11月	世界最高速度の学習機能を備えた汎用ニューロコンピュータを開発 1秒間に最高23億回の学習動作が可能。 (日立製作所)
1990年12月	世界初のニューロ素子間を磁気信号で結合するニューロコンピュータを開発 (徳島大、ワコム) これまでのニューロコンピュータの弱点である素子数増加に伴う応答速度の低下を克服したとしている。
1991年1月	光ニューロン素子を開発 (松下電器産業) 1個の入力情報を複数個の情報に展開するマルチレングスアレイ、情報を学習結果と照合する学習メモリマスクを用いて2層構造、36ニューロの全光演算方式の光ニューラルネットワークを構成し、英文字(O,P,T)の連想記憶機能を実現。
1991年3月	世界最大規模・最高演算速度の学習機能付ニューロチップを開発 (三菱電機) ニューラルネットワーク素子に「カオス振動子」を取り込んだ新タイプのニューロコンピュータを開発 (鹿児島大)
1991年9月	「アナログメモリ内蔵型光ニューロチップ」の試作に世界で初めて成功 (三菱電機) 自ら学習した知識をチップに長時間記憶する人間の脳により近い構を持つ。5年以内に画像処理専用チップとしての実用化を目指している。
1991年12月	「超電導ニューロコンピュータの基本素子」を世界で初めて開発 (東北大電気通信研究所) 半導体素子では実現できない百億個以上の素子を集積できることになるため、約150億個の神経細胞からなる人間の脳のまねた本格的な超並列コンピュータを作れる可能性がある。
1991年12月	デジタルニューロチップを開発 (東芝) ASCI(最先端の特定用途向け集積回路)ニューロチップを用い、多層パーセプトロン型の処理・学習、フィードバック型、その他各種の処理をプログラムにより行う。

出典 各種資料より作成

表-18 代表的なニューロチップの性能<sup>12)</sup>

開発会社	ニューロン数	処理方法	処理速度 (CPS) *	特徴
A T & T ベル研究所	54	アナログ (抵抗)	$4.4 \times 10^0$	連想メモリ
三菱電機	336	アナログ／ ディジタル	$10^{12}$	ボルツマンマシン学習 チップ
Inte1	64	アナログ	—	EPPROMを用いたアナログ 可変シナプス
日立製作所	576	ディジタル	$1.2 \times 10^8$	—
富士通	1	アナログ／ ディジタル	$10^6$	バス結合によりネットワー クを構築
カリフォルニア 工科大	$48 \times 48$	アナログ (抵抗)	—	網膜の模倣
三菱電機	90	光／電子	$2 \times 10^8$	—
カリフォルニア 工科大	256	光／電子	$5 \times 10^8$	CCDアレイによるシナプ スチップ
A T & T ベル研究所	128	光／電子	—	アモルファスSi光伝導体 アレイによるシナプスチ ップ

\* CONNECTION/SECOND

## 2.5 ツール

A I ツールとしてエキスパートシステム構築ツール、ファジィツール、ニューロツールについて以下に説明する。

### 2.5.1 エキスパートシステム構築ツール

エキスパートシステム構築ツール（以下 E S ツールと称す）は、空の知識ベースをもつ汎用の推論システムで、エキスパートシステムを構築するための有効な道具であり、シェルとも呼ばれる。

特定用途向けのツールはドメイン・シェルと呼ばれ、特定の専門分野に関する基本的な知識ベースが組み込まれており、ユーザーはこれを少し修正すれば簡単にエキスパートシステムとして使えるものである。製品化されているドメイン・シェルのほとんどは機器の故障診断を対象としている。

#### (1) E S ツールの分類<sup>4)</sup>

E S ツールは大きく 4 つの型に分類することができ、製品化されているものはこれらの型のひとつ、あるいはいくつかを組み合わせて採用している。

以下にそれぞれの概要を述べる。

##### (a) ルール型システム（プロダクションシステム）

IF～THEN～型のプロダクションルールを知識表現の主体としたシステムで、 OPS 5 , BRAINS, ZEUS/AMSなど、最も多くのツールに採用されている。

推論方式は、前向き推論、後ろ向き推論、前／後ろ向き推論がある。

長所は、

- ① 「もし～ならば～する（である）」という表現が分かりやすい
- ② 各ルールを独立して使える

短所は、

- ① ルールの数が増えると知識ベースの保守が難しくなる
- ② 知識の階層構造を表しにくい

##### (b) フレーム型システム

フレームを使って知識表現をするシステムである。

フレームは推論制御をしにくいため、ほとんどがルールまたは黒板型システムと組み合わせて使用されている。

(c) 黒板（ブラックボード）型システム

推論に黒板型モデルを採用しているシステムである。

原型はHEARSAY IIという音声理解システムで、これを一般化したのがAGEである。国内で開発されたツールとしてはE SHELL, ES/KERNEL, EXC OREなどがある。

(d) ハイブリッド型システム

それぞれの知識表現の欠点を補うために、複数の知識表現を組み合わせたシステムである。

フレームとルール、黒板とフレームを組み合わせるシステムが標準的で、実用性の上からハイブリッド型が多くなってきている。

(2) ESツールの開発動向<sup>3)</sup>

LISPやPROLOGのAI向け言語で記述されているツールは、単独の推論機能は優れているが、他のソフトウェア資源とのインターフェースを考慮していないため、他のシステムとの融合化に制約があった。

1988年頃からC言語やPL/I, COBOLをベースとするツールの開発が進み、AI開発環境と実行環境が同一マシンで実現できるようになった。最近開発されたESツールの傾向として、次のことが挙げられる。

①既存プログラムとの結合

②外部データの利用

Oracle, Sysbase, DB2などの各種RDBや、dBASE, Lotus 1-2-3にアクセスできるツールが多い

③様々なハードウェア上で同じように開発・運用できるマルチプラットフォーム化

メインフレーム、ワークステーション、パーソナルコンピュータ等で構成

される分散処理システムでの実行など

- ④汎用ツールではカバーできない専門とするドメインに適した特定業務向けのツール（ドメイン・シェル）の登場

国内で販売されているESツールは特定用途向けのドメイン・シェルを含めると70種類以上あるとされている。

ESツールの中にはファジィ推論を搭載しているものや、知識獲得のためにニューラルネットワークを併用するツールもある。例えば、ブレインズ社のHyperBrain/脳力男（のりお）は、PC-9800を対象としたツールであるが、これは同社のニューロツール HyperBrain/網力太（のりた）を利用し、脳力男のルール・モジュールをニューラルネットワークに変換して学習させ、アプリケーションの実行時に對応するルール・モジュールの部分をこのニューラルネットワーク呼び出しに置き換えて利用することが可能である。

表-19 国内で販売されている主な汎用AI(ES)ツールと、計画型シェル、診断型シェル、制御型シェルの一覧を示す。

### 2.5.2 ファジィツール

ファジィ推論の応用は、大規模プラントの運転支援や経営戦略の意思決定支援システムなどの膨大なルール数をもつ場合には、いかにファジィルールを獲得するかが課題である。メンバーシップ関数やルールの作成、推論のシミュレーション、ニューラルネットを利用したメンバーシップ関数のチューニング機能などを搭載したファジィツールが開発されている。

表-20に国内で開発、あるいは販売されている主なファジィツールを示す。

### 2.5.3 ニューロツール

国内で販売されているニューラルネットワーク用構築ツールの一覧を、表-21に示す。そのほとんどは、バックプロパゲーション・モデルおよびその改良型を採用している。また、メーカーの中にはツールを提供するだけでなく、ノウハウを提供するための「ニューロシステム構築ガイド（階層型ニューラルネットワークの学習方法）」（富士通）を作成し、開発支援を行っているところもある。

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>31</sup> (1/9)

(a) 主な汎用AIツール (1/5)

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名			
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	フ ア ジ イ 度 利 用	確 信 度 利 用	フレ ーム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ー ザ ー 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能			
XPT-II (CSK総合研究所)	○	○	○	XPT-Prolog C 言語	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	○	各ルールの優先順位を ダイナミックに決定で きる。	IBM 3090, 308X, 4381, 9370, RS/6000, HP, Sun, NEWS, DECstation, AS PS/55, PC-9801
NEXPERT OBJECT (Neuron Data)	○	○	○	C 言語	○	×	×	○	○	○	○	○	○	○	○	×	非単調推論、ゴール自 動生成、ルール制御構 造化など。	IBM 3000, 9370 RS/6000, HP9000, NEWS, Sun, Macintosh, VAX IBM PC
ART-IM/MVS, /UNIX, /VMS, /Ultrix, /MS-DOS (Inference)	○	○	○	C 言語	○	×	○	○	○	×	○	○	○	○	△	○	データ駆動型推論。	IBM 30XX, 43XX RS/6000, HP9000, Sun, DECstation, VAX, DGAV PC-9801, IBM PC AT, PS/2, PS/5
IBMナレッジツール (IBM)	○			PL/I	○	×	×	○	×	×	○	○	○	○	×	○	推論エンジンの戦略の 指定及びユーザー・コ ーディングが可能	IBM/370, 390, AS/400
日本語エキスパート・ システム環境 (ESE) (IBM)	○			Pascal	○	×	○	×	×	○	×	×	○	○	×			IBM/370, 390, PS/55
日本語 VAX OPS 5 (Digital Equipment Corp.)	○	○		BLISS-32	○	×	×	×	×	○	×	○	×	○	×	×		VAX シリーズ
KES II (Software Architect- ure and Engineering)	○	○	○	C 言語	○	×	○	○	×	×	○	×	○	○	×		外部手続きを利用可。	UNISYS 2200, 1100, A NW2, U6000, PW2, J-3100
GNOSIS-II (日本ユニシス)	○			FORTRAN	○	×	×	○	×	×	○	×	○	×	○		外部手続きを利用可。 フレーム間に関係の設 定が可能。	UNISYS 2200, 1100
EXCORE (日本電気)	○	○		Utilisp	○	×	○	○	○	×	○	×	○	○	○		確信度つき述語型知識 表現が可能	ACOS-4系 ACOS-6系 N5200, BWS4800
ES/KERNEL (日立製作所)	○	○	○	C 言語 アセンブリ (HD)	○	○	○	○	○	×	○	×	○	○	○		異機種の多階層協調推 論が可。 多重世界管理機能	HITAC M 2050, 2020
ESHELL/X (富士通)	○	○		Utilisp	○	○	○	○	○	×	○	○	○	○	○		時間概念は黒板、オブジェ クトにより離散的に扱る	FACOM M FACOMA, FMG

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (2/9)

(a) 主な汎用AIツール (2/5)

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現					推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名			
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	フ ア ジ イ 度 利 用	確 信 度 利 用	フレ ーム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ニ ザ イ ー 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能		
FORTRAN/KR (富士通)	○	○		C 言語 FORTRAN	○	○	×	○	○	×	○	×	○	×	×	FACOM M VP, S ファミリ, FACOM A	
YPS/KR V10 L11 (富士通)	○			C 言語	○	○	×	○	○	○	○	○	×	○	×	仮説オブジェクトとその間の リンクで探索木を形成	FACOM M
ProKAPPA (IntelliCorp)		○		C 言語	○	×	×	○	○	×	○	○	○	○	×	バック・トラッキング 機能など。	Sun, HP9000
KEE (IntelliCorp)		○		Common Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	ワールド機能、ルール ・クラス指定可。	Sun, HP9000
KBMS V2.2 (NTT)	○	○	/PC	Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	3種類のルール競合解 決戦略をもつ。	Sun, HP9000, NEWS, ELIS, VAX, PC-9801
AI-DNA (アドイン研究所)	○	○		C 言語	○	×	×	○	○	×	○	×	○	×	○	ファジィ検索用特徴ベ クトルを利用可。	Sun, NEWS, RS/6000, LUNA, PC-9801
AI-RNA (アドイン研究所)	○	○		C 言語	○	○	×	×	×	×	○	○	○	○	×	ファジィ推論モジュー ル時間概念は予測閾数 及び時間積分機能あり	Sun, NEWS, RS/6000, LUNA PC-9801
ZERO (東京電機大学)	○			Lisp C 言語	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	拡張フレームによる対 象モデルの表現可。	NEWS, SPARCLT
Knowledge Craft (Carnegie Group Inc)	○			Common Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	○	○	×	時間概念はフレームの コンテキスト機能で対 応可能。	Sun, Symbolics, VAXstation, DECstation
大創元 NEWS (エー・アイ・ソフト)	○			C 言語	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	述語論理を記述して Prolog提供と同様の論 理型推論可。	NEWS
IXLA (シーアイテクノセー ルス, ISR)	○			C 言語	○	×	○	○	○	×	○	○	○	○	○		Sun, NEWS, HP9000, LUNA, RS/6000, EWS4800, 2050
ESPARON (システム総合開発)	○	○		C 言語(WS) Prolog(PC)	○	○	○	×	×	×	○	○	○	○	○	時間概念は知識表現を 行う述語式中に記述で きる。	Sun-4, MicroVAX2000 PS/55, MS-DOS/ワコン DN3000, 3500, 4000
ART (Inference)	○			Lisp	○	×	○	○	○	×	○	○	○	○	○	データ駆動型、時制 型、仮説型推論が可。	Sun, HP9000, Symbolics, VAX, DN3000, 3500, 4000

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (3/8)

(a) 主な汎用A I ツール (3/5)

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名		
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	レ ア ジ イ 度	確 信 度	フ レ ム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ー ザ ー 閲 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能		
OPS 83 (Production Systems Technologies)	○	○	C 言語	○	○	○	○	○	○	×	○	×	○	○	○	言語であるためルール表現以外の知識表現も記述可。	NEWS, HP9000, RS/6000, Sun, VAX, DECstation, DN, PC-9801
G 2 (Gensym)	○		Lisp	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	イベント駆動型推論や周期的ルール発火が可能。AI/ES構築用	Sun, HP9000, RS/6000, VAX, DECstation, PS/2
ORBS(Oregon Rule-Based System) (oregon州立大学, 経済)	○	○	C 言語	○	×	×	○	○	×	○	×	○	○	×	×	ユーザーがルールの競合解消戦略を柔軟に構成可能。	SUN, PS/55, PC-9801
Egeria (Experitech)	○	○	C 言語	○	○	○	○	○	○	×	○	×	○	○	○	オブジェクト指向を取り込んだ知識表現用言語。	Sun, NEWS, IBMPC, OS/2 パソコン
ZEUS-II (三菱総合研究所)	○		Common Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	○	○	○	×	生成検査手法、時間概念はフレームのインスタンス作成で対応。	Sun, Apollo, DGAV
$\mu$ -EXTKERNEL (三菱電機)	○		C 言語	○	×	×	○	×	×	×	×	○	○	○	○		MELCOM ME, MS9000, Multi16
EXTKERNEL II (三菱電機)	○		ESP	○	×	×	○	○	○	×	○	×	○	○	○		PSI II, PSI/UX
EXSYS Professional (Exsys)	○	○	C 言語	○	×	○	○	×	×	○	×	○	○	○	○	内部関数や表形式で知識記述が可。	Sun, NEWS, HP, DECstation, PC-9801, IBM PC, J-3100
SMI/MARKS-II V (住友金属工業)	○		C 言語	○	×	○	○	×	×	○	×	○	×	○	○	診断型システムを容易に構築できる分類型知識表現可。	VAX, MicroVAX, VAXstation
NSRAIS (新日本製鉄)	○		C 言語	○	○	○	○	×	○	○	×	○	○	○	○		Sun, VAX, MicroVAX, VAXstation
源蔵I (島津製作所)	○	○	C 言語	○	×	○	×	×	○	○	×	○	○	○	×		Sun, VAXstation, DGMV PC-9801
源蔵II (島津製作所)	○	○	C 言語	○	×	○	○	○	×	○	×	○	○	○	○	プロセラ間通信による統合型推論が可。	Sun, VAXstation, DGMV PC-9801
ASIREX (東芝)	○		C 言語	○	×	○	○	×	×	○	×	○	○	○	×	コンテキストを用いた多重世界管理機能。	AS3000, 4000, 1000

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (4/9)

(a) 主な汎用AIツール (4/5)

MP:汎用機 WS:ワークステーション, PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名			
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	フ ア ジ イ 利 用	確 信 度	レ イ ム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ イ ザ イ 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能			
She11-Friday (東芝情報システム)	○			C-Prolog	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×	メッセージ交換により 推論を進める。	AS3000, 4000
She11-Sunday (東芝情報システム)	○	○		C 言語	○	×	○	×	×	○	○	×	○	○	×		AS3000, 4000, J-3100, PC-9801	
EX/CL (日本電気)	○			UtiLisp	○	×	×	○	○	×	○	×	○	×	○	ATMSの拡張機能のSA TMSを提供。	BWS4800	
KBMASTER (富士ゼロックス)	○			Xerox Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	×	Active Valueの記述表 現、リレーションの記 述など可。	Xerox1121, 64XX	
Humble (Xerox Special Information Systems)	○	○		Smalltalk-80	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	○		NEWS, HP, Apollo, Sun, Macintosh, Xerox64XX PC-9801
ESHELL/SB (富士通)	○			Lisp C 言語	○	○	○	○	×	×	○	×	○	○	○	ファクト記述はフレー ムのインスタンスで対応。	FACOM A	
KwESHELL (富士通)	○			CLDS	○	○	-	-	-	-	-	-	-	-	-		FACOM S(EWS)	
KDL (明電舎)	○			Lisp	○	×	○	○	○	×	○	×	○	×	○		VAX, VAXstation, MicroVAX	
KAPPA-PC IntelliCorp)		○		C 言語	○	×	×	○	○	×	○	○	○	○	○	KAL言語による知識 の記述が可能。	IBM PC AT	
大創玄 (エー・アイ・ソフト)		○		C 言語	○	○	○	○	○	○	○	○	×	○	○	述語論理を記述して Prolog提供と同様の論 理型推論可能。	PC-9801	
創玄 TOWNS (エー・アイ・ソフト)		○		C 言語	○	×	○	×	×	×	×	×	×	○	×	制限付前向き推論が可 能。	FM TOWNS	
創玄 (エー・アイ・ソフト)		○		C 言語	○	○	○	×	×	×	○	×	×	○	×	制限付前向き推論が可 能。	PC-9801, PS/55, J-3100 FM, AX パソコン	
HyperBrain/ 脳力男 (のりお) 386 (ブレインズ)		○		Lisp	○	○	○	○	○	×	○	×	○	○	×		PC-9801	
AI-plan TELL (ワネック、岩崎技研)		○		Prolog	○	×	○	○	×	×	○	×	○	○	×	必要／不必要な事実の 重み付けテーブルによ る推論が可能。	PC-9801, PS/55	

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (5/9)

(a) 主な汎用AIツール (5/5)

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現				推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名			
	M F	W S	P C		ル ー ル 表 現	フ ア ジ イ 表 現	確 信 度 利 用	フレ ーム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ー ザ ー 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能	
Xi Plus (Expertech)		○	C 言語	○	x	x	x	x	x	○	x	○	○	x	PC-9801, PS/55	
GURU (Micro Data Base Systems)		○	C 言語 アセンブラー	○	x	○	x	x	x	○	x	○	○	x	RDB, スルッドシート、手続きにより知識を記述可。	PC-9801, PS/55, J-3100, PS/2, FMR
MYIREX (東芝)		○	C 言語	○	x	○	○	x	x	○	x	○	○	x	コンテキストを用いた多重世界管理機構。	J-3100
RTPS (安川電機製作所)		○	C 言語	○	x	x	x	x	x	○	x	○	x	x	LEX, MBAの2種類の競合解消戦略をもつ。	(PC-9801)
SMI/MARKS-II RT (住友金属工業)		○	PL/M, C 言語 FORTRAN	○	x	○	○	x	○	○	x	○	x	○	診断型システムを容易に構築できる分類型知識表現も扱える。	インテル 286系マイコン

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>31</sup> (8/9)

## (b) 計画型メイン・シェル

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名		
	M F	W S	P C		ル イ ル 表 現	フ レ ア ジ 度 利 用	確 信 度 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ニ ザ ー 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能			
計画大王 (エ・ケー・エクサ)	○			C 言語	○	×	×	×	×	×	○	×	○	×	×	設備競合を解消するスケジューリング専用エンジンをもつ。	Sun
Vi o 1 (東洋情報システム)	○			C 言語	×	×	×	○	×	×	○	○	○	×	×	時刻表示が可能、計画割付け可能期間の抽出	SPARCstation, NEWS, BWS 4800
PLANBOX/SCH (日本電気)	○			UtLiLisp C 言語	○	×	○	○	○	×	○	○	○	○	○	制約評価に基づきタスクと資源を逐次的に割付ける。	BWS 4800
APSHELL/SCHEDDES (富士通)		○		C 言語	×	×	×	○	○	×	○	○	○	○	×	生産・工程計画分野の知識として時間概念、制約記述、戦略などの表現が可能。	FMG
HyperBrain/ 脳力男Planner (ブレインズ)		○		Lisp	○	○	○	○	○	×	○	○	○	○	×	仮説推論により1日後、2日後…と多重な世界を扱える。	PC-9801

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (7/9)

(c) 診断型ドメイン・シェル (1/2)

MF: 汎用機 WS: ワークステーション PC: パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構		知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名				
	M F	W S	P C		ル イ ル 表 現	フ ア ジ イ 度 利 用	確 信 度 利 用	フ レ イ ム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ニ ザ イ ザ イ ン シ ス ト	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能			
TESTBENCH (Carnegie Group Inc)	○	○		Common Lisp C 言語	○	×	○	○	○	○	○	○	×	○	○	×	Sun, VAX Station, Explorer, IBM PC AT	
LUNA-Fuzzy RON (オムロン)	○			C 言語	○	○	×	×	×	×	×	×	×	○	×	×	ファジ制御の合成則とて 5通り(ファジ関数) × 3通り(確定方式)を提供	LUNA
I-CAT (Automated Techno- logy Systems)	○			C 言語	×	×	×	×	×	×	○	×	○	×	×	診断対象のブロック・ ダイアグラムをマウス 入力	Sun, Macintosh II	
XLAIS (横河電機)	○			C 言語	○	○	○	○	×	○	○	○	○	○	○	×	データ収集プログラムとの連 携で時間処理が可、データ履歴も推論で扱える	XLAIS
Intelligent Code Box (Intelligent Terminal)	○				○	×	×	×	×	○	○	×	○	×	×	表形式や事例を用いて 知識を記述できる。	Sun	
EXPERT-U (住友電気工業)	○			EProlog, C 言語, アセンブ	○	×	×	×	×	○	○	×	○	×	○	×	SUMIstation	
EXPERT BLOCK (Integrated Systems)	○				○	-	○	-	-	-	-	○	-	-	-	リニアIES構築ツール、 制御システム設計用 MATRIXx の機能	VAX station, AC-100	
Knowledge Network (千代田化工建設)	○			Common Lisp	○	×	○	○	○	○	○	○	○	○	○	×	事象の因果関係を表す ネットワークで知識記述。 推論は事象駆動・周期的 ルール発火。 リニアIES構築ツール。	HP 9000, Explorer
DIAGBOX/MAT (日本電気)	○			C 言語 Utilisp	○	×	○	×	×	○	×	×	○	○	×	S/H マトリックスによ る知識表現。EXCORE と の組合せ利用が可。	EWS 4800	
CSRL (Battell Memorial Institute)	○			Lisp	×	×	×	×	×	○	○	×	×	×	×	階層構造と決定表現形 式で知識を表現。	NEWS, Sun, Apollo, DN, XEROX 1121	
r t KDL (明電舎)				C 言語 Lisp	○	×	○	○	○	×	○	○	○	○	○	時間変数、事象変数、 内部時計、遅延実行、 周期実行で時間概念を 扱う。多重世界機能。	VAX, VAXstation, MicroVAX	
匠心、匠心 II (住友電工システム エンジニアリング)		○		arity Prolog	○	×	○	○	○	○	○	×	○	○	×		PC-9801, PS/55, J-3100, FMX	

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (8/9)

## (c) 診断型ドメイン・シェル (2/2)

MF:汎用機 WS:ワークステーション PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現					推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名			
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	フ ラ イ ア ジ 度 確 信 利 用	レ イ ム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ー ザ ー 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黒 板 機 能			
Xpert RuleProtoTyper (Atter Software)		○		Pascal	○	×	×	×	×	○	×	○	○	×	×	日付型属性の定義により時間概念を扱える。	PC-9801, PS/55, J-3100, FMR, B16
Super Expert Plus (IntelligentTerminal)		○		Pascal	○	×	×	×	×	○	×	○	○	×	×	日付型属性の定義により時間概念を扱える。	PC-9801, PS/55, J-3100, FMR, B16
DIAGBOX/MAT (日本電気)		○	C 言語		○	×	○	×	×	○	×	×	○	○	×	S/H マトリックスによる知識表現。EXCOREとの組合せ利用が可。	N5200, PC-9801
APSHELL/GUIDE (まなでしくん) (富士通東海システム エンジニアリング)		○	C 言語		○	×	○	○	×	○	○	×	○	×	×	因果関係を表で表す。 知識は日本語記述。 確信度計算は加算法と MYCIN法から選ぶ。	FMR
APSHELL/GUIDE (富士通)		○	GCLISP		○	×	×	○	○	○	○	×	○	○	○	日本語文章によるルール記述。グラフィックによる推論ネットワークの表示・編集。	FMR
AIMAX-D (富士通ファコム 制御)		○	C 言語		○	×	×	×	×	×	○	×	○	○	×	知識をマトリックス形式、因果ネットワーク形式で記述する。	PFU A
ES/PROMOTE /W-DIAG (日立製作所)	○	○	○		-	-	-	-	-	○	-	-	-	-	-	事例からルールを導き出す知識獲得支援ツール。ES/TOOL/S-RI、ES/KERNEL と連動できる	
SGULE-01 (オムロン)					○	○	-	-	-	-	-	-	-	-	-	生産現場の保全管理・ 品質管理業務支援ES構築ツール。複数の知識とファジ演算により自動的に合成して推論。	FC-985(FA コンピュータ)

表-19 国内で販売されている主なエキスパートシステム構築ツール<sup>3)</sup> (9/9)

(d) 制御型メイン・シェル (2/2)

MF:汎用機 WS:ワークステーション, PC:パソコンその他

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			ツールの記述 言語	知識表現						推論機構			知識表現、推論方式 などに関する その他の特徴	対象モデル名		
	M F	W S	P C		ル ル 表 現	フ ラ イ ル 表 現	確 信 度 利 用	フレ ーム 表 現	オ ブ ジ エ ク ト	診 断 木 表 現	ユ ザ I 関 数	時 間 概 念 の 記 述	前 向 き 推 論	後 向 き 推 論	黑 板 機 能		
FRUITAX-L (富士ファコム制御)		○		FORTRAN C 言語	○	○	×	×	×	×	×	○	○	×	×	ある操作をしてからの 経過時間を入力時の判 断値として利用可。	PFU A
ΦNET (富士ファコム制御)		○		C 言語	○	×	×	×	×	×	○	○	○	×	×	パリオットにより参照する ルールの制御を行う。 タイマにより時間間隔 を扱える。	PFU A
FRUITAX-MF (富士ファコム制御)		○		Lattice C	○	○	×	×	×	×	○	○	×	×	×	ある操作をしてからの 経過時間を入力時の判 断値として利用可。 UI部はPC-9801, FMR 演算部は MiCREX-F250, F500	PFU A
AIMAX-C (富士ファコム制御)		○		C 言語 FORTRAN	○	○	○	○	○	×	○	×	○	×	×	ルールのif部、then部 ごとに判定と手続き処 理をグループ化した表 現を利用。	PFU A

表-20 国内で販売されている主なファジィ・ツール (1/2)

ツール名 (開発会社)		特 徴 等 (( ) 内は適用機種)
フ ア ジ イ ・ エ キ ス パ リ ト シ ス テ ム 構 築 ツ ル	E S / K E R N E L (日立製作所)	汎用 (HITAC M, 2050, 2020)
	E S H E L L / X, / S B (富士通)	汎用 (FACOM M, FACOM A, FMG)
	F O R T R A N / K R (富士通)	汎用 (FACOM M, VP, S, A)
	Y P S / K R (富士通)	汎用 (FACOM M)
	A I - R N A (アドイン研究所)	汎用 (Sun, NEWS, RS/6000, LUNA, PC-9801)
	E S P A R O N (システム総合開発)	汎用 (Sun, MicroVAX, PS/55, MS-DOSパソコン)
	O P S 8 3 (Production Systems Technologies)	汎用 (Sun, NEWS, RS/6000, HP9000, VAX, DECstation, DN, PC-9801)
	G 2 (Gensym)	汎用 (Sun, RS/6000, HP9000, VAX, DECstation, PS/2)
	E g e r i a (Espertech)	汎用 (Sun, NEWS, IBM PC, OS/2 パソコン)
	N S R A I S (新日本製鐵)	汎用 (Sun, VAX, MicroVAX, VAXstation)
	大創玄 (エー・アイ・ソフト)	汎用 (PC-9801)
	創玄 (エー・アイ・ソフト)	汎用 (PC-9801, PS/55, J-3100, FMR, AX PC)
	HyperBrains/脳力男386 (ブレインズ)	汎用 (PC-9801)、計画型 (PC-9801)
	L U N A - F u z z y R O N (オムロン)	計画型 (LUNA)
	S G U L E - 0 1 (オムロン)	診断型 (PC-985(FA コンピュータ))
ツ ル	X L A I (横河電機)	計画型 (XL AIS)
	F R U I T A X - L, - R X (富士電機)	制御型 (PFU A) オンライン制御用の大規模システム組込形
	F R U I T A X - M F (富士電機)	制御型 (PFU A, Σ station) オンライン開発支援用のAW (AI Advanced Work Station) 形
	F R U I T A X - U X (富士電機)	制御型 (UI部はPC-9801, FMR, 演算部はMICREX-F250, F500)
	A I M A X - C (富士ファコム制御)	制御型 (PFU A)
ファジィプログラミング言語 「T I L - F P L」		ルールやメンバーシップ関数などのファジィ知識ベースを記述し易い構文からなる。C言語をベースとする。
ファジィ推論汎用シェル (松下電器産業)		多段推論を採用。
「F T - 5 0 9 8」 (オムロン)		ファジィ知識データ作成ツール
ファジィ自動構築システム (日立製作所)		ニューラルネットを応用し、自動的にファジィルールを獲得するとともにメンバーシップ関数の最適チューニングを行う。

表-20 国内で販売されている主なファジィ・ツール (2/2)

ツール名 (開発会社)	特徴等 (( ) 内は適用機種)
ファジィルールの自動生成ツール 「TILGen」 (トガイ・イクフラヨウ社)	エキスパートシステムの知識をファジィ連想メモリと称する相互結合型のニューラルネットに学習させて最適なファジィルールを獲得する。
ファジィコントローラ用開発ツール (富士通)	メンバーシップ関数・ルールの作成・編集、推論のシミュレーション、知識ファイルのアセンブラソースへの変換などの機能をもつ。
開発支援ツール「T/FT」 (東芝)	j-3100でルールやメンバーシップ関数の作成を支援。
Fruitax-FS (富士電機)	ファジィ推論シミュレーションプログラム (PC-9801, FMR)
Fruitax-FR (富士電機)	前件部ファジィ変数探索プログラム (PC-9801, FMR)
Fruitax-3D (富士電機)	三次元表示プログラム (PC-9801, FMR)
ファジィキャラ (アドイン研究所)	コンピュータゲームのキャラクタに人間らしい振る舞いを与える。ファジィ推論ルールでキャラクタの行動パターンを記述する。

出典 各種資料より作成

表-21 国内で販売されている主なニューロ・ツール<sup>15)ほか</sup>

ツール名 (開発会社)	稼働マシン			利用 ニューラル ネットワーク モデル	特 徴	対象 ハードウェア
	M F	W S	P C			
HyperBrain ／網力太（ブレインズ）			○	BP	AIツール「HyperBrain/ 脳力男」との連携も可能。	PC-9801
PHINEシリーズ (セントリー・リサーチ 総合研究所)			○	BP		PC-9801
SkillTrain (千代田化工建設)		○		スカルトンネットワーク	ノード同士の結合が図示できる。	Sun, Macintosh
NEUROSIM/L (富士通)			○	BP及びその改良 型3種	専用ボードを使用。	FMR
NEUROLIB/L (富士通)			○		アプリケーション・プログラムからNEUROSIM/L の学習結果を利用するためのライブラリ郡。ESHELL/X, Lisp, Cに対応。	FMG
ANZAシリーズ (米HNC)		○	○	BPほか18モデル (BPの改良型含)		Sun, IBM PC
Explore Net 3000 (米HNC)			○	BPほか21モデル (BPの改良型含)	ニューロ・アプリケーション開発用ツール・メニューから 機能を選択していくことで開発を実行する。	IBM PC
NEURO-TURBO (マイティック)			○	BP		PC-9801
SYSPRO (米Martingale Research)			○	BP, ホップフ ィールドほか	FORTRAN ソース・コードつき。	IBM PC PC-9801
NDS1000, 同500 (米Nestor)		○	○	RCE	学習や認識用プログラムをライブ リで提供。	SUN, IBM PC
Neural Works (米Neural Ware)		○	○	BPほか21モデル		SUN, IBM PC, PC-9801
MAC BRAIN 3.0 (米NEURONIX)		○		BPほか14モデル	グループ編集機能、デバッグ／解析 ツール、ハイパーテキスト機能等を装備。	Macintosh
NEURO-07 道真および 道灌（日本電気、日本電気 情報システム開発）			○	BP(道真), ホップフィールド(道灌)		PC-9801
OWL Neural Network Li- brary(米Olmsted & Watkins)		○	○	BPほか10モデル	C言語に対応。	DOS 及びUNIX 対応機
ANSkit (米SAIC)			○	BPほか13モデル	ニューラル・ネット開発用キット。	IBM PC
ニューロバイザー (住友金属工業)			○	BP	学習途中のネット状態が表示できる	PC-9801
SkillTrain (千代田化工建設)					最適ノード数を自動的に決定する。	

MF:汎用機, WS:ワークステーション, PC:パソコンその他, BP:バックプロパゲーション・モデル

## 2.6 応用分野

A I の応用分野としては、E S（問題解決システム），画像理解，音声理解，自然言語理解，機械翻訳，知能ロボット，自動プログラミング，マンマシン・インターフェース等がある。以下に主な応用分野の技術の現状について概説する。

### 2.6.1 エキスパートシステム

E S は、知識ベースと推論機構および知識ベース管理機構により構成されている。ある特定の領域の専門家の知識に基づいて構築された知識ベースを、推論機構が解釈し推論することにより、ユーザーの問題解決を行うシステムである。

E S は A I 技術の中でもっとも利用が進んでいる応用分野である。

E S は、演绎的推論を基本としているが、この限界を克服するうえで事例ベース推論が採用されるようになった。

E S の主な対象領域としては、解釈、予測、診断、設計、計画、監視、指示、制御、教育等があり、

- ①異常・故障診断および対策支援
- ②スケジュール作成・シミュレーション
- ③運転・操作支援
- ④設計支援
- ⑤コンサルタント
- ⑥C A I

等の業務に、幅広い産業分野で利用されている。

最近は、「あいまいな」事象にファジィ理論を適用したファジィ E S やいろいろなデータをニューロン（神経回路）の並列処理によって総合的に解答を生み出すニューロ・モデルを適用した E S の適用事例がみられる。

ファジィ E S の利点は、専門家から獲得した自然言語で表現されている知識に近い形でシステム移植することができ、さらに推論にファジィ推論を用いることにより、あいまいなデータや知識からでも妥当な解答を得ることができることにある。また、ファジィプロダクションルールを用いることにより、システム全体の開発をより容易に行うことができる。しかし、多くの推論過程を経ると結論があまりにもあいまいになり、有用な情報を与えることができなくなる「あいまいさの爆発」が生じる。

ニューロ・モデルによるESは、推論機能よりも直感・連想に近いパターン認識機能を持っており、事例教示だけで構築できるため、ルールで記述しにくい問題への適用が期待されている。またニューロモデルはファジィESにおけるメンバーシップ関数のチューニングに利用され始めている。

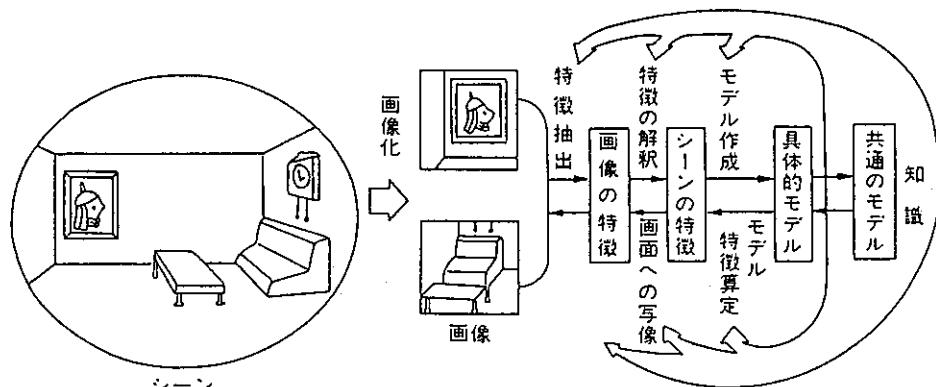
## 2.6.2 理解システム

### (1) 画像理解

画像理解とは、入力された画像情報から対象物が何であるかを理解するパターン理解システムである。画像理解システムの構成を図-7に、画像理解の基礎と応用を図-8に示す。

画像のパターン認識には、従来の統計的手法にニューロモデルを組み合わせることにより、認識率を向上させる試みが行われており、手書き文字認識や表面品質検査装置などに適用されている。また、画像処理にファジィ推論を適用している事例がある。

画像理解システムとしては、ランドサットやノア等の衛星画像や航空写真の解析等で実用化が進んでいる。製造業では製品検査や金属材料の特性解析に、医療では医療写真の解析による治療支援等に研究が進められ、また、自動走行ロボットの視覚部分への高度利用を目指した研究が進められている。



入力画像からシーンの記述(室内に椅子と机があり壁には絵がかかっている)を得るため知識が利用される

図-7 画像理解システムの構成

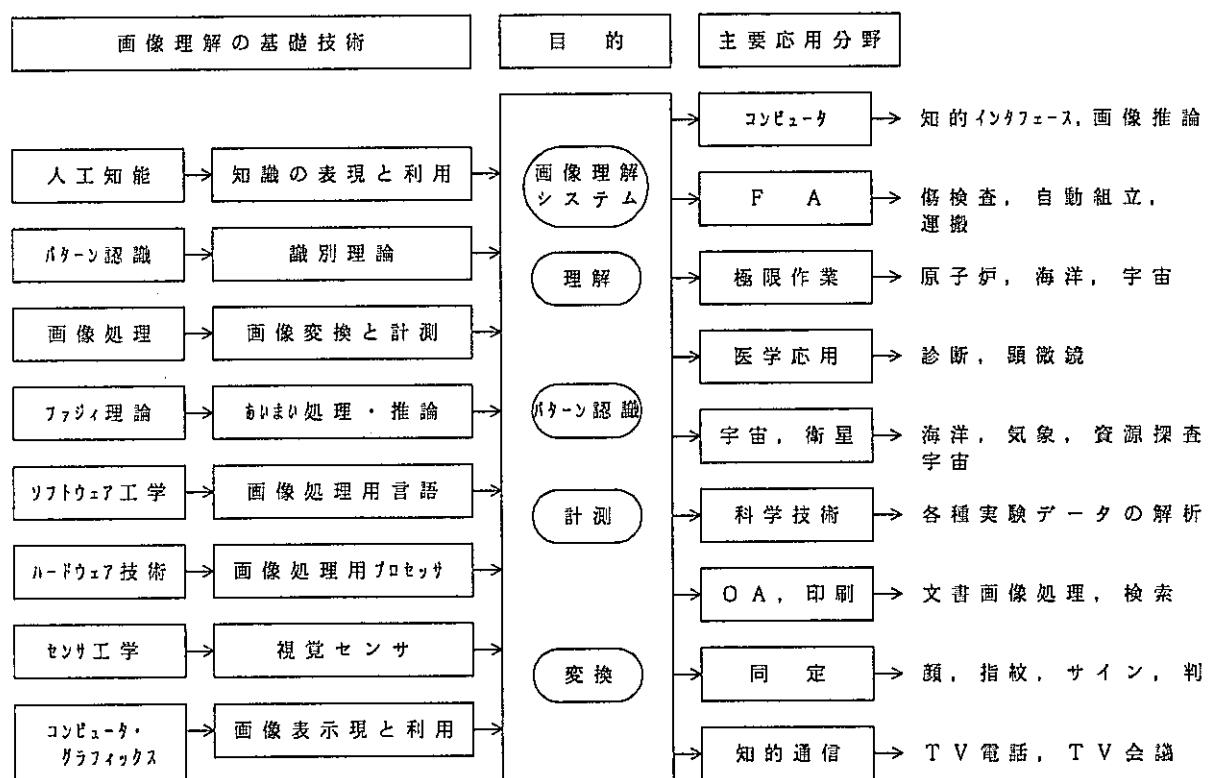


図-8 画像理解の基礎と応用 <sup>[6)</sup>

## (2) 音声理解

音声理解とは、音声情報を分析してその内容を理解するパターン理解システムであり、人間の日常会話のような連続した音声を認識し、音声で表現された文章全体の内容を理解するシステムである。

米国国防省D A R P A (Defence Advanced Research Agency) が1971年から5ヶ年計画で音声理解の研究を実施した。このプロジェクトにおいて最初に開発された音声理解システムがカーネギーメロン大学の HEARSAY I であり、チェス用の言語31語を認識し、理解度は79%であった。HEARSAY IIは HEARSAY I に理解能力を強化し、ニュース情報の音声検索ができるように改良したものでブラックボードモデルと呼ばれる。これは協調型問題解決システムで、1011語を認識し、理解度は90%に達している。

1987年に Sejnowski らにより、音声合成用に英文字を発音記号へ変換する NETtalk と称するニューラルネットワークが発表されてから、音声処理分野ではニューラルネットワークの応用研究が多く行われるようになった。

エイ・ティ・アール自動翻訳電話研究所では、日英音声言語翻訳実験システム（S L T R A N S）<sup>17)</sup>を開発している。このシステムでは、入力された日本語音声を認識し、英語へ翻訳し、英語の合成音声を出力する。このシステムの音声認識システムは、統計的な音韻モデルHMM (Hidden Marakov Model) と拡張LR構文解析アルゴリズム (Generalized LR Porsing Algorithm) を結合したもので、HMM-LRと呼ぶ。

実現されつつあるシステムとしては、電話自動応答システム、機械操作命令システム、音声ワードプロセッサなどがあり、ファジィやニューロ技術を取り入れた研究開発が進みつつある。

## (3) 自然言語理解

自然言語理解は、日常使用されている自然言語を構文的・意味的に理解するパターン理解システムである。自然言語理解システムの研究は、1970年代に本格的に着手された。代表的なシステムとして、マサチューセッツ工科大学のウィノブラーが開発したS H R D Lがある。これは、積み木の世界の意味を理解し、「それ」、「あれ」といった指示詞、「あるブロックをおくための、別のブロックの性質」を常識的に理解できる。

適用分野としては、文書校正、データベース検索、キーワード抽出、O C R データ

の読み取り、自然言語インタフェース、談話理解、文書自動要約などがある。

### 2.6.3 機械翻訳

コンピュータを用いて、ある自然言語で書かれた文章を他の自然言語に翻訳するパターン理解システムである。知識工学が出現して機械翻訳が実用化に達し、1985年頃から日本語と英語を相互に自動翻訳するシステムが開発され、超大型コンピュータで処理するものからパーソナル・コンピュータで処理するものまで、製品開発が盛んに行われている。翻訳方式は次の3つに大別される。<sup>18)</sup>

①直接変換方式：

もとの単語を目的の言語の単語に置き換えて、その順序を並べ替える方法

②ピボット方式：

もとの言語を言語の種類に依存しないで中間表現に変換し、その中間表現から目的とする言語を生成する方法

③トランスファー方式：

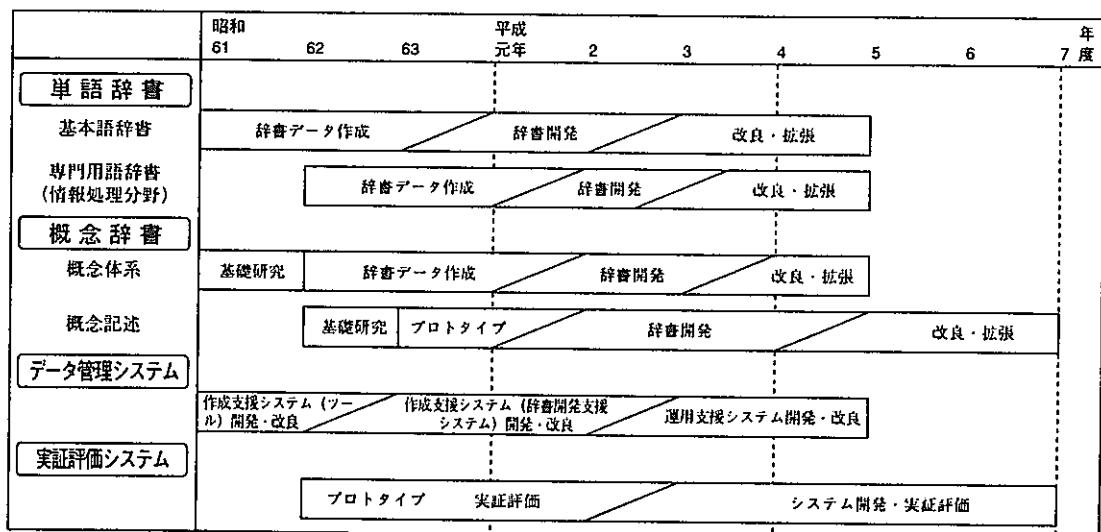
言語別の中間表現をもち、中間表現間での変換を行う方法

現在開発されている機械翻訳システムのほとんどはトランスファー方式であるが、中間表現のレベルは直接変換に近いものからピボット方式に近いものまで様々である。主にマニュアル、契約書等のビジネス文書、特許技術文献、カタログ等の翻訳に利用されている。

機械翻訳システムなどの自然言語処理では、言語現象の多様さを捕らえ込んだ、大規模で高品質のコンピュータ辞書の開発が重要である。そこで、日本電子化辞書研究所（EDR）では、1986年度から9年計画で電子化辞書プロジェクト<sup>19)</sup>を開始した。電子化辞書とは、コンピュータが処理可能な辞書で、コンピュータが自然言語を理解するために用いられる辞書であり、最新のコンピュータ技術や自然言語処理技術を用いて実現されるものである。研究開発スケジュールと開発を予定している電子化辞書の構成を図-9に示す。

機械翻訳技術は日本が最高レベルにあるとされており、米国では機械翻訳ニーズは大きくない。EC（欧州共同体）では1982年から多言語自動翻訳システムEUROTRAの開発を進めてきたが、成果が思わしくなく、現在はアカデミックなプロトタイプを開発するプロジェクトとして位置づけられている。

(a) 研究開発スケジュール



(b) 電子化辞書の構成

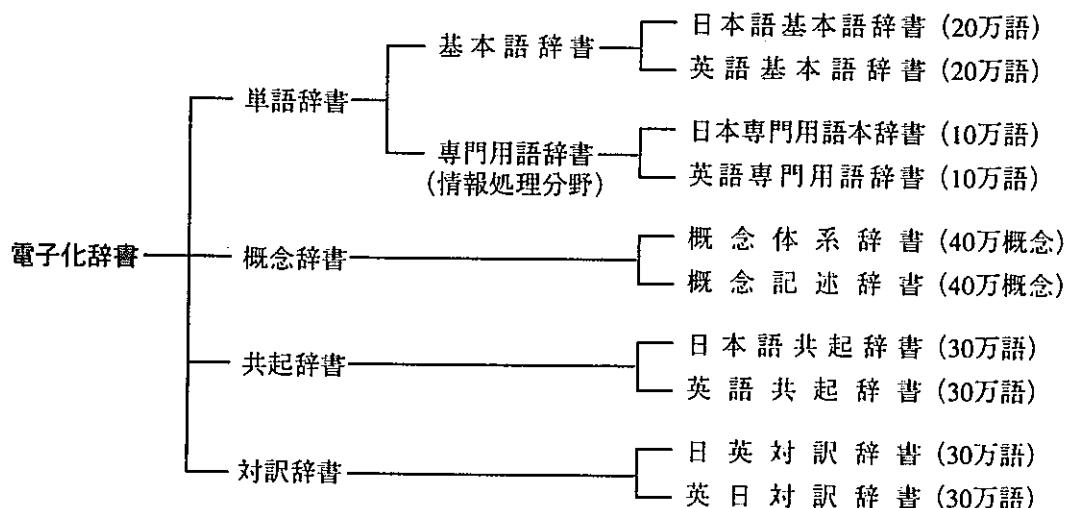


図-9 電子化辞書プロジェクトの開発スケジュールと電子化辞書の構成 ⑧

## 2.6.4 知能ロボット<sup>(20) (21) (22) (23)</sup>

知能ロボットは何らかのセンサーと判断能力をもつロボットで、学習機能や、ファジィシステム、ES等を備えたロボットの開発が進みつつある。日本の産業用ロボットの分類を表-22に、ロボットの世代分けとその特徴を図-10に、知能ロボットの構成を図-11に示す。

知能ロボットの主な技術的課題は次のとおりである。

### ①感覚・認識能力（立体認識、色認識、音声認識）

視覚や感覚など、センサーからの情報を処理する環境認識が必要。

### ②メカニズム・ハードウェア

小型・軽量・高出力アクチュエーター、高可搬重量の腕、装輪・装軸式移動機構、歩行式機構、強度・剛性が高い材料、等。

### ③制御・情報処理

各種の作業や処理に必要な知識としての知識ベース、自らの実行手順を計画する問題解決、学習機能、人間の命令を正確に受取るためのロボット言語、等。

これらの課題を解決するため、最近はロボットの制御にファジー制御やニューラルネットワークを用いた学習制御を導入して、より人間の働きに近いロボットの研究開発が行われている。

ファジー制御は、視覚情報処理や、ロボットアーム駆動、移動ロボットの情報処理や制御の様々な部分に対しての適用に期待されている。ニューラルネットワークの学習機能を採用すれば、ファジィシステムのメンバーシップ関数の調整が不要となる。マニピュレータの動特性の逆特性をニューラルネットワークに学習させ、それを制御性能の改善に反映させたり、二足歩行制御にニューラルネットワークの学習性能と高速性を利用したものなどが研究されている。

人間や生物のもつ知的で柔軟な諸機能をロボットとして実現するため、ロボット工学と認知科学、神経生理学、医学、ニューロコンピュータなどの分野を融合させた科学技術や学術を、ニューロボティクス(NeuroRobotics)と称している。

産業用ロボットの普及により、非製造分野へもロボットの導入が望まれている。非製造分野で期待される先端ロボットの役割は次のとおりである。

### ①厳しい環境下での作業からの解放：放射線、高水圧、高温、宇宙での作業ロボ

## ット

②重作業や単調作業からの解放：鉱業、農業用ロボット

③人の機能障害の代替による福祉社会の実現：医用、介添え用ロボット

これらのロボットの機能上の特徴は、

①格段に広い作業領域

②複雑で変化の激しい作業環境への対応

③作業箇所および作業場所を特定する高度な技術

④現場の状況変化に対する迅速、器用な対応

などである。このような第3世代ロボットを実現するため、通商産業省工業技術院は1983年度から1990年度まで国家プロジェクトとして「極限作業ロボット」の研究開発を行った。この研究で開発されたロボットは、実用原子力発電施設作業ロボット、海底石油生産支援ロボット、石油生産施設防災ロボットである。「極限作業ロボット」の研究項目を表-23に示す。

宇宙基地の建設や保守などを行う宇宙ロボットでは、人工知能技術が重要である。宇宙ロボットは次の3つの世代に分類される。

第一世代は、近接有人操作によるマニピュレータで、宇宙ステーション計画の中の日本モジュール（JEM）に搭載されるJEMマニピュレータJEM RMSがある。1995年には宇宙実験が行われる予定である。

第二世代は、地上からの遠隔操作により伝送時間遅れ、伝送容量の制限などの制約のもとで高機能の作業ができるマニピュレータである。コスマラボ構想の中で研究が進められている。

第三世代は、自立型ロボットで、地上からモニタ及び上位指令を与えるだけで目的を達成するロボットであり、日本では基礎技術が始まっている。

表-22 日本の産業用ロボットの分類<sup>20)</sup> (JIS B 0134-1986)

用語	意味
操縦ロボット	ロボットに行わせる作業の一部または、すべてを人間が直接操作することによって、作業が行えるロボット。
シーケンスロボット	あらかじめ設定された情報(順序・条件及び位置など)に従って動作の各段階を逐次進めていくロボット。
プレイバックロボット	人間がロボットを動かすことによって、順序・条件・位置及びその他の情報を教示し、その情報によって作業を行えるロボット。
数値制御ロボット	ロボットを動かすことなく、順序・条件・位置及びその他の情報を数値・言語などにより教示し、その情報に従って作業を行えるロボット。
知能ロボット	人工知能によって行動決定できるロボット。 備考 人工知能とは認識能力・学習能力・抽象的思考能力・環境適応能力などを人工的に実現したものである。
感覚制御ロボット	感覚情報を用いて、動作の制御をするロボット。
適応制御ロボット	適応制御機能をもつロボット。 備考 適応制御機能とは環境の変化などに応じて制御等の特性を所要の条件を満たすように変化させる制御機能をいう。
学習制御ロボット	学習制御機能をもつロボット。 備考 学習制御機能とは作業経験などを反省させ、適切な作業を行う制御機能をいう。

		第一世代 1970	第二世代 1980	第三世代 1990	第四世代 2000年
大脳機能	知能知識	先天的プレイバックデータ	適応・順応データベース	推論・問題解決知識ベース	後天的学习型知識ベース ニューラルネットワーク
作業機能	マニピュレーション 移動	静的位置制御 1次元・軌道	動的位置制御 2次元・無軌道	動的力制御 整った3次元	動的協調制御 3次元
応用範囲	第2次産業製造業 の一部 マテリアルハンドリング 塗装、スポット溶接	第2次産業製造業 アーティク溶接、組立て	第2次産業非製造業 第1次産業、第3次産業の一部	第2次産業非製造業 第1次産業 第3次産業	
技術の特徴	内界センサ +サーボ技術	外界センサ +マイクロプロセッサ システム技術	知識処理 +マン・マシン・インターフェース技術	学習+ 人工現実感技術	

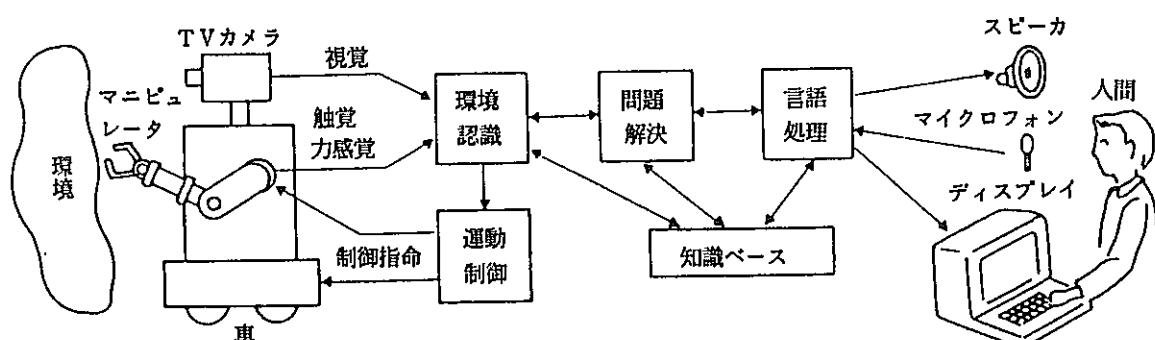
図-10 ロボットの世代分けとその特徴<sup>21)</sup>

図-11 知能ロボットの構成

表-23 極限作業ロボット研究項目<sup>20), 22)</sup>

項目	目標	コンセプト
実用原子力発電施設作業ロボット	原子力発電所等の原子力関連施設において作業環境内を移動し、遠隔のオペレータの支援を得ながら、原子力プラント機器設備等の点検、保守等高度な作業を行えるロボットを開発する。	作業環境： 温度 70°C 放射線量率 150R/hr 雰囲気 N <sub>2</sub> , 空気 移動 : 4脚歩行 視覚 : 3次元立体視センサ ステレオTV
海底石油生産支援ロボット	海洋石油開発関連施設において海中を3次元移動し、作業位置と姿勢を保ちつつ、遠隔のオペレータの支援を得ながら、保守、点検、首里等高度な作業を行えるロボットを開発する。	作業環境： 水深 50~20m 水温 -2~30°C 潮流 2ノット 移動 : バリアブルベクトルプロペラ 3台 視覚 : 音響映像、水中ステレオTV, 3次元位置検出
石油生産施設防災ロボット	石油生産施設等において生じた災害時に遠隔のオペレータの支援を得ながら災害現場に移動しつつ災害状況把握、災害の拡大防止、消火等高度な作業を行えるロボットを開発する。	作業環境： 温度 400°C (30分) 800°C (3分) 雰囲気 (有害、引火性、爆発性) ガス 移動 : 車輪付 6脚 視覚 : CO <sub>2</sub> レーザビジョン、超音波ジョン、ステレオTV
基盤技術	機構技術 脚、車輪等により階段、斜面等の不整地を効率的に移動する機構を開発する。 多間接・多指のマニピュレータにより柔軟かつ起用に作業する機構を開発する。 センサからの情報により的確に環境を認識する機構を開発する。	
	制御技術 ロボットの自律機能を開発するとともに、オペレータによる制御技術として、高度な実時間臨場感のもとに大局的な指示により正確かつ迅速に制御する方式を開発する。	
	支援技術 ロボットを効率よく利用するための技術として、複数台のロボットからなるシステム化手法、ロボット言語及び総合的評価手法を開発する。	

## 2.6.5 その他

### (1) 自動プログラミング

対象となる業務の手続きと使用するデータの内容を箇条書きにすると、コンピュータが自動的にプログラムを生成するシステムである。

自然言語で記述した仕様からCOBOLソースプログラムを生成するシステムや、指示にしたがって日本語や図表を入力すればCOBOLソースプログラムが自動的に生成されるツールなどが開発されている。

### (2) 知的CAD(Computer Aided Design)<sup>24)</sup>

CADはコンピュータを利用した設計支援システムであり、知的CADはエキスパートシステムの技術をCADの分野に取り込んだものである。

各種の設計知識を設計者に理解しやすい形で設計知識ベースに蓄え、システムが動作するときにこの知識ベースが参照され、人間の思考に沿った高度の設計能力を發揮するものである。

代表的な初期のころの海外の知的CADとしては以下のシステムがある。

#### ①MOLGENシステム（1981年）

遺伝子組み換え実験計画システム。

拘束条件に注目して、拘束条件の伝播、仮定生成と検証等の基本的な概念を用いて、設計過程のモデルを行っている。

#### ②SOCRATESシステム（1985年）

組み合わせ論理の最適化

その他、日本では富士通、日本電気においてLSI設計に使用されている。また、カメラのレンズ設計の例がある。

### (3) 知的CAI(Computer Assisted Instruction)<sup>24)</sup>

CAIはコンピュータを利用した教育システムであり、知的CAIはCAIに知的能力を持たせたシステムである。

システム内部に生徒のモデルを持つことにより、生徒の進度、理解に合わせた教育を行うことを目的としている。あらかじめ予想していない質問に答えたり、生徒の間

違えに対して間違えの原因まで指摘するものである。

初期のころの海外の代表的な知的C A Iとして以下のものがある。

①SCHOLAR システム（1970年代中頃）

地理の教材を題材とし、生徒の思い違いを診断し次に生徒自身が誤りを見つけられるように教材を提示する。

②SOPHIEシステム（1976年）

電子回路の故障診断を題材とし、生徒の自由な思いつきをよく調べることによって、生徒に問題解決の状況ないし仮説を見つけることを促すような学習環境を提供する。

③BUGGY システム（1978年）

基礎的な算数技能を対象とし、学生がなぜ算術の誤りを犯したのかを説明する機能を有している。また、教師に対しては、学生の誤りを示し、その診断方法を教師に教示する手助けもする。

## 2.7 実用化状況

### 2.7.1 概論

ICOT-JIPDEC AIセンター（下記参照）が1989年12月に実施したAI利用動向アンケート調査の結果<sup>25)</sup>（有効回答事業所数1,844）によると、最近の利用動向として、以下ののような特徴が挙げられており、AIは実質的業務への浸透が進んでいる。

①神話から脱却し実用化の段階へ

実用化事例の確実な増加

②開発事例の大半はES

ESの開発事例は診断と計画・設計が主流

③今後のニーズが高いのは画像理解

④ツールは汎用ツールの利用から専用指向、自社開発ツールへ

⑤利用マシンはAI専用機から汎用機へ

特にパソコン利用が増加

AIを導入している379事業所の導入システムの内訳及びAIシステム別の利用状況を図-12に示す。

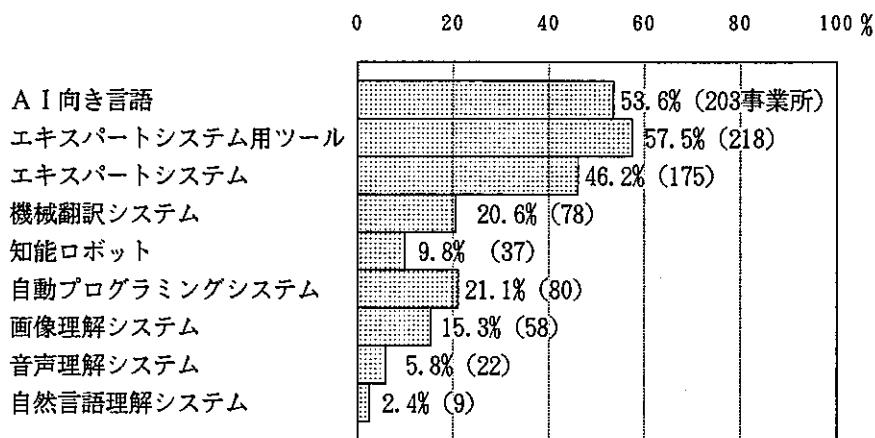
導入率の高いシステムはES用ツール(57.5%)、AI向き言語(53.6%)、ES(46.2%)でその次に多い自動プログラミングは21.1%となっており、圧倒的にES関連の導入が多い。

ESの実用化が進む一方、最近は、ファジィやニューロを応用したESも数多く実用化されるようになった。

制御システムへはファジィ技術はすでに多くの実績があるが、ニューロ技術の制御への応用も始まっている。

ファジィやニューロ技術は、AIの次の実用化テーマとして、音声処理や、画像処理、最適化計算などへの応用研究が進んでいる。

(注) ICOT-JIPDEC AIセンター：(財)新世代コンピュータ技術開発機構(ICOT)と  
(財)日本情報処理開発協会(JIPDEC)の共同組織。



(a) A I 導入事業所(379事業所) のシステム導入状況 (1989年調査)

利用システム	導入業所数	本格的に利用	試験的に利用	ほとんど使用せず	無回答
A I 向き言語	203	22.2%	53.7%	21.7%	3%
エキスパートシステム用ツール	218	26.6%	51.8%	17.9%	4%
エキスパートシステム	175	36.6%	52.0%	7.4%	4%
機械翻訳システム	78	25.5%	56.4%	15.4%	3%
知能ロボット	37	62.2%	27.0%	3.3%	8.1%
自動プログラミングシステム	80	33.8%	52.5%	7.5%	6.3%
画像理解システム	58	63.8%	25.9%	5.5%	5%
音声理解システム	22	54.5%	40.9%	5.5%	5%
自然言語理解システム	9	44.4%	55.6%		

(b) A I システム別利用状況 (1989年調査)

図-12 A I 導入事業所の導入システム利用状況 <sup>25)</sup>

## 2.7.2 エキスパートシステム

### (1) エキスパートシステムの利用動向

ESの利用動向について、ICOT-JIPDEC A Iセンターのアンケート調査結果<sup>25)</sup>から概要を述べる。図-13に集計結果を示す。

#### (a) 期待効果及び評価

ユーザーがESに期待する効果としては、

- ①専門家の仕事量の削減
- ②業務の質の向上
- ③業務の質の均質化

が多く挙げられており、この傾向は過去3年間変化ない。なお、そのほかの選択肢としては、専門家の数の削減、専門家の育成、知識の整理・体系化、ES技術の習得がある。

実用中システム123件のうち57%が、「非常に効果があった」と評価しており、「まあ効果あり」の34%を合計すると91%に達し、一応の良い効果が得られていると考えられる。

#### (b) 開発・利用段階(図-13(a))

ESの開発・利用段階は、実用中システムの比率が前々年から順次高くなっている、実用化が着実に進んでいる。

#### (c) 規模(図-13(b))

ESのルール数は、回答システム304件のうち100ルール以下が32%を占めており、これを含めた200ルール以下のシステムが55%と半数以上を占めている。1001ルール以上の大規模システムは17件となっている。

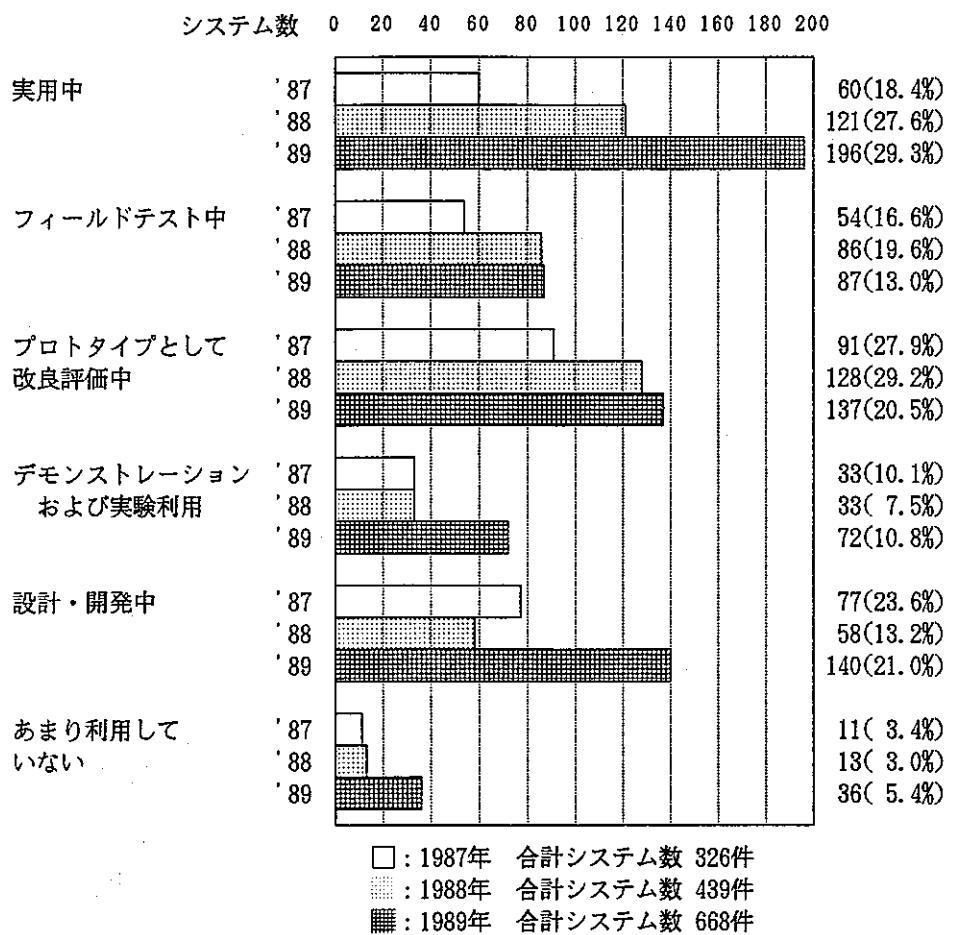
ESのフレーム数は、回答システム216件のうち100フレーム以下が58%と半数以上を占めている。これを含めた200フレーム以下のシステムは75%を占めており、フレーム数でみると、小規模のシステムが大半を占めている。1001フレーム以上の大規模システムは11件である。

(d) 使用言語 (図-13(c))

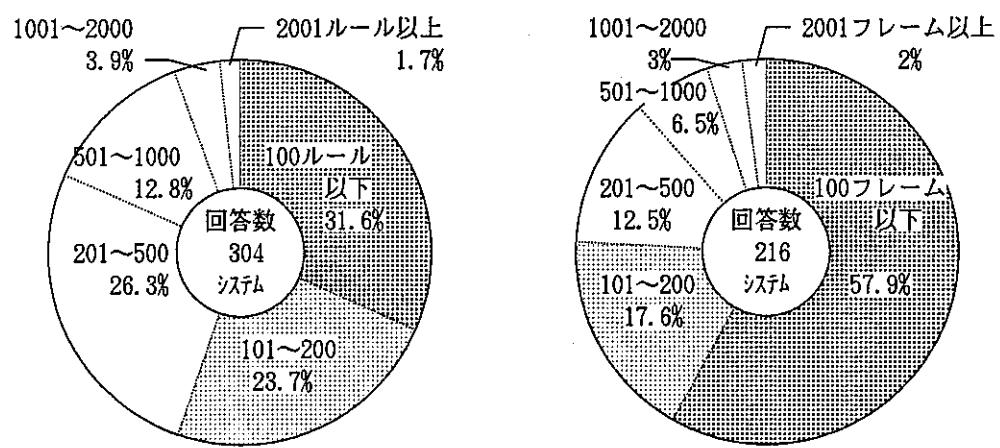
実稼働用のESの使用言語は、Lisp系(39%)とProlog系(8%)が半数弱を占める。C言語系も利用が高く、35%を占めている。

(e) マシン (図-13(d))

実働稼働用マシンは、パーソナルコンピュータが最も多く40%を占め、ワークステーションが31%，大型汎用機が12%，AIマシン及びミニコンピュータがそれぞれ8%となっている。パーソナルコンピュータ及びワークステーションの利用が伸び、汎用機、ミニコンピュータ及びAIマシンの利用が減少する傾向にある。

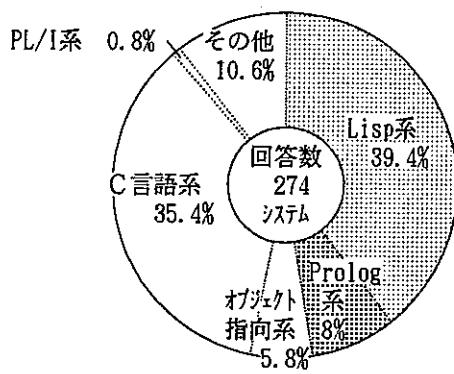


(a) エキスパートシステムの開発・利用段階別内訳

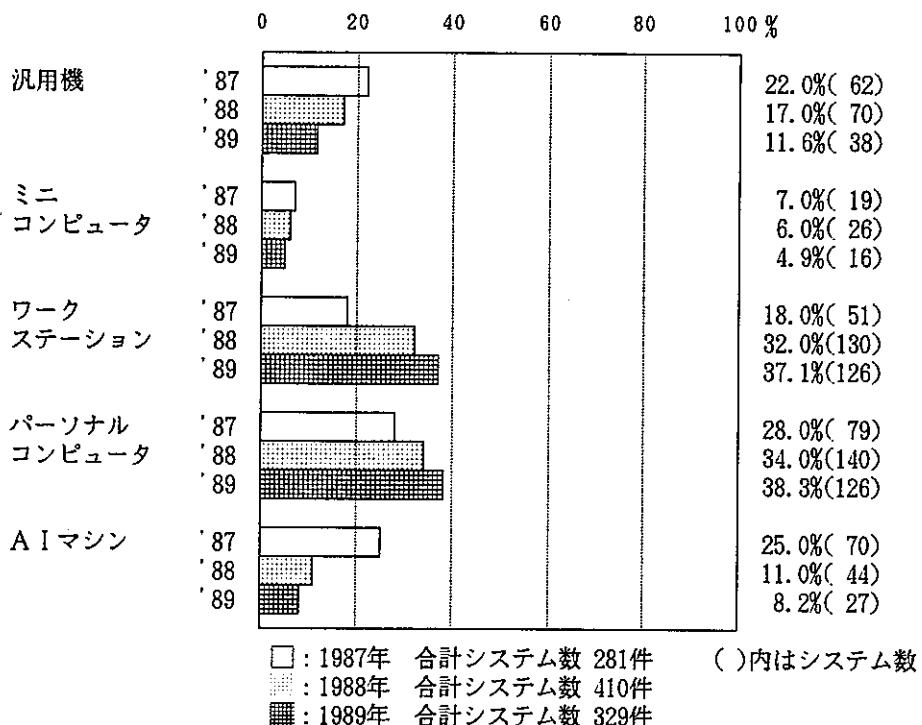


(b) エキスパートシステムの規模 (1989年)

図-13 エキスパートシステムの利用状況<sup>26)</sup>



(c) 実稼働エキスパートシステムの使用言語 (1989年)



(d) 実稼働エキスパートシステムの使用言語 (1989年)

解釈	診断	設計	計画	制御	その他	無回答	
12%	38%	12%	23%	8%	4%	23%	423 システム

(e) エキスパートシステムの対象領域 (1989年)

図-13 エキスパートシステムの利用状況<sup>25)</sup> (つづき)

(2) 産業分野別エキスパートシステム利用状況<sup>26), 27), 28), 29), 30)</sup>

産業分野別の E S の代表的な適用事例一覧を表- 2 4 に示す。

なお、表- 2 4 に示した事例は、日経 B P 社の1990年12月調査<sup>27)</sup> を基に、各種資料から補間して適用業務別に分類したものであり、国内の全ての適用事例ではない。次頁以降に次の産業分野別の E S 利用状況の概要を説明する。

- (a) 電力業
- (b) ガス業
- (c) 金融業
- (d) 保険業
- (e) 運輸業
- (f) 印刷・食品・流通・サービス業
- (g) 建設業
- (h) 機械・精密機器製造業
- (i) 電機関連業
- (j) 自動車製造、重工・造船業
- (k) 製紙・窯業土石業
- (l) 繊維・石油・化学プラント
- (m) 鉄鋼・金属製造業

### (a) 電力業における利用状況

電力業では、1989年頃から電力系統の事故判定・復旧支援システムを実用化し、発変電設備の運用支援システムなどの研究開発が活発に行われている。操作ミスが重大な事故や被害をもたらす危険性から、高い信頼性を必要とし、実用化には慎重であるが、年々実用化システムが増えてきている。

用途としては、発電設備関係、電力系統関係及び各種業務支援関係に分けられる。発電設備関係では、特に原子力発電所における高度な操作支援システムや監視診断システムがプラントメーカーで開発されているが、試作あるいは試用段階が多い。電力系統関係では事故復旧支援が中心であるが、実際の系統データのコンピュータによる体系的管理の実現が先決とされている。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①作業の運用手順や点検スケジュールなどの運用計画立案
- ②発電プラントや変電所の運転・操作支援
- ③送電線や変電所などの異常・故障診断、復旧・保守支援
- ④電力需要予測
- ⑤相談支援などの営業支援
- ⑥C A I

電力の需要予測、経済負荷配分問題、電力ケーブルの故障診断などにニューラルネットワークを、電圧制御や安定化制御、送電線故障区間評定などにファジィ推論を適用し始めている。

### (b) ガス業における利用状況

大手の2社を中心に研究開発が進められ、試作あるいは試用であったシステムの多くが1991年に実用化されている。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①各種計画支援
- ②各種設備の異常・故障診断

### (c) 金融業界（銀行・証券）における利用状況

金融業界におけるコンピュータ化は、預金や為替などの主要勘定業務及び勘定系

ネットワークの構築がほぼ完了している。現在、金融自由化の時代に入り、第3次オンラインとして情報系・証券系・国際系のシステムが稼働し始めている。近年、知識集約的業務に対してのコンピュータ処理のニーズが高まり、ESの適用に積極的である。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①相談・設計（年金、税金、ローン、資金運用（ポートフォリオ））
- ②起債支援
- ③相場分析
- ④金融商品開発
- ⑤融資審査
- ⑥コンピュータ関連支援

窓口業務には専門的知識を必要とする多種の業務があり、その支援としてコンサルテーション（相談）型のESが数多く適用され、税金相談などの事例が多い。最近では、監査・審査業務などの業務支援、さらに金融機関の利益に直結するディーリングなどの基幹業務の支援へと適用が拡大し、業務・サービスの優位化や顧客の獲得といった戦略的な業務への適用へと広がりつつある。監査・審査業務支援には、クレジット会員入会審査、営業店の予算審査、企業への融資審査などがあり、作業効率と質の向上を目的としている。

証券投資支援にファジィ推論が採用され、ディーリング支援としての相場予測では、ESの限界を開拓するため、ニューロ・システムが適用され始めている。また、金融業界においてはコンピュータ・ネットワークは事業の生命線であるため、コンピュータ運用関連の支援システムとして、夜間バッチ処理支援やコンピュータ・ネットワークの障害支援など、多くの適用事例がある。

#### (d) 保険業界における利用状況

保険業界では審査・査定などの診断型システムの実用化事例が多い。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①審査・査定（医務査定、融資審査、給付金計算など）
- ②相談・設計
- ③資産運用支援

- ④防災診断・危機管理
- ⑤経営分析
- ⑥コンピュータ関連支援

保険業界は金融業界と同様に、第3次オンラインが構築・稼働し、知識集約的業務へのESのニーズが高い。

保険入会審査や企業融資審査、給付金支払い査定などに多くの保険会社がESを適用している。また、生活設計のアドバイスにESを利用しサービス向上を図っている。損害保険会社では、建物のリスク管理支援にESを利用している。

コンピュータ関連の運用支援にもESが適用されている。

#### (e) 運輸業における利用状況

鉄道では車両故障支援システムに、航空会社では、パイロットの運航スケジュールやダイヤ編成システムに適用されつつある。

航空機のパイロット支援システムとしては、日本で現在研究開発中の以下のシステムがある。

- ①コックピットアドバイザリシステムの研究（航空宇宙技術研究所）  
分散配置されている操作器や表示器のユーティリティ系統をコンピュータでモニタし、運行上必要な数値や制約条件などを統合表示する。  
パイロット支援システムは、ユーティリティ系統の論理モデル及びマニュアルを知識ベースとしたESにより故障原因推定、対処方法の示唆を表示する。

#### ②パイロット支援システム（航空宇宙工業会）

飛行状態監視、故障診断、チェックリスト表示などの機能のほか、人間にメッセージを与えるインターフェース部に合成音声の活用が試みられている。

船舶の運行支援システムとしては、（社）日本造船研究協会の基で研究開発された最適自動運行システムがあり、その中の総合運行管理システムは、船内統合システム、データ通信システム及び陸上支援システムで構成され、船長の頭脳に代わるESに船内の統括管理機能を任せている。

(f) 印刷・食品・流通・サービス業における利用状況

これまであまり E S の適用はみられなかったが、ここ 1 ~ 2 年で需要計画や配送計画などの計画型システムの開発に着手する企業が現れ始めた。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①販売・営業支援
- ②計画支援（受発注や配送など）
- ③資金運用・予算配分支援
- ④異常・故障診断
- ⑤コンピュータ関連支援（情報サービス業など）

(g) 建設業における利用状況

建設業においては、熟練作業者や技術者の知識・経験・判断を必要とし、自動化において知能化のニーズが大きく、最も早くから A I を導入した業種のひとつである。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①工法選定  
施工条件の複雑化に伴う効果的な対策工法の選定
- ②設計・見積り支援  
設計計算、資材の積算や見積り計算、建築法規・法令相談、官庁申請書類の作成支援など
- ③工程管理・計画支援
- ④異常・故障診断  
コンクリートのひび割れ診断・対策支援、機器・設備の異常・故障診断など
- ⑤制御支援  
シールドマシンの制御支援など

先行企業における最近の E S 開発の特徴は、次のとおりである。

- ①A I がシステム開発の一手法として定着
- ②ファジィ応用が急増  
ことにシールド・マシンなどの制御関係や、見積り作業、工法選定、コ

ンクリートひび割れ診断システムなどへ応用

③設計を含めて工程全体をサポートするシステムの開発が本格化

(h) 機械・精密機器製造業における利用状況

適用業務としては異常・故障診断支援が多く、大手メーカーでは自社製品にE Sをオプションで提供しており、開発ツールを外販している企業もある。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①計画支援（生産計画支援など）
- ②設計支援（レンズ設計や元素同定支援など）
- ③生産・運転支援
- ④異常・故障診断

各種機械の異常・故障診断や、ケーブルや管の劣化診断など

(i) 電機関連業における利用状況

A I ツール・ベンダーである大手メーカーでは、自社内の多くの業務へE Sを適用しており、またソフトウェア開発の支援システムへの適用も多い。

重電メーカーでは、自社製品の運転・保守支援としてE Sを適用している。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①生産計画支援（各種生産ラインのスケジューリング）
- ②設計支援
- ③運転支援
- ④コンピュータシステム作成・稼働支援
- ⑤異常・故障診断支援

(j) 自動車製造、重工・造船業における利用状況

異常・故障診断支援がもっとも多いが、設計支援にも多くの適用事例がみられる。

主な適用分野として以下のものがある。

- ①計画支援
- ②設計支援
- ③生産・運転支援

#### ④異常・故障診断支援

各種プラントに搭載したシステムが多い

自動車製造業ではコンピュータ利用技術は進んでいるが、ESの実用化はあまり進んでいない。これは、自動車自身に故障診断システムを組み込むことがなく、現在の「カンバン方式」による生産では生産スケジュール支援システムはあまり必要ではないことが考えられる。

重工・造船各社は、船舶事業以外に、鉄構建設、原動機、原子力発電プラント、産業機械等各種機械、航空、冷熱など、広範囲に及び、対象とするESの種類も多い。

故障診断システムや運転支援システムが中心で、顧客に納品する設備や機械に製品の付加価値を高めることが目的となっており、製品組み込み型が多い。実用化されているシステムの中にファジィ推論を組み込んだものや、試作としてニューロを取り入れているシステムがあり、新しい技術の取り込みや、独自ツールの開発にも積極的である。

#### (k) 製紙・窯業土石業における利用状況

製紙業では截断計画支援が、窯業ではセメント原料の調合の自動化やセメント・キルンの監視・制御支援などの適用事例がある。

#### (l) 繊維・石油・化学プラントにおける利用状況

石油・化学プラントにおいては、生産計画支援への適用が多いが、まだ試作・試用段階のものが多い。プラントの異常・故障診断支援や、設計支援、運転支援への適用も、試作・試用段階のものが多い。

主な適用分野としては以下のものがある。

①生産計画支援

②設計支援

材料設計や材料配合支援にも適用されている。

③生産・運転支援

④異常・故障診断

オンライン・リアルタイム型が多い。

### (m) 鉄鋼・金属製造業における利用状況

鉄鋼業界は最も早くからESを開発した業種のひとつであり、合理化・省力化を目的とした計画型システムが多い。

主な適用分野としては以下のものがある。

#### ①計画支援

各種作業の日程計画、月次計画、輸送計画など

#### ②運転支援・制御

高炉関係の運転支援、制御支援や搬送制御など

#### ③材料選択・見積り支援

#### ④異常・故障診断（各種プラント）

鉄鋼製造プロセスは、多くの工程を抱え、多品種少量生産（厚板の場合最終製品が約30,000種類）への対応が求められており、極めて大規模な多目的組合せ最適化問題である。AIを導入することにより、品質の安定化と部門間の人員の機動的配置が可能となり、工場の省力化や無人化が実現するなどの利点がある。ファジィやニューラルネットワークとの統合利用も実施されており、自社開発ツールの開発も行われている。適用業務としては、原料ヤードの管理、高炉の操業支援、精錬工程の制御、連続鋳造作業の工程計画、全般的な生産計画、原料・操業・工程の各管理などである。

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 44)</sup> (1/38)  
(a) 電力業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/2)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①運用計画	原子燃料関係作業計画立案システム (燃料搬入／搬出等の年間計画の立案)	Lisp (Symbolics 3620)	試用 実用は 93年度	関西電力
	火力発電ユニットの定期検査計画自動立案システム (各種制約を加味した補修計画表を作成)	Super-BRAINS (3090)	実用	東京電力
	火力発電所の定期点検スケジューリングシステム (各種制約を満足するよう立案)	Viol(M-780)	試作	中部電力
	営業所のオンライン端末設備などのスケジューリング (リース期間等の経済性を考慮)	KEE3.1(KS-303)	試用	中部電力
	系統運用計画支援システム (電力系統設備の負荷状況をチェック)	KEE(Symbolics)	実用	九州電力
	原子燃料交換計画作成支援 (作業の合理化)	BSHELL	実用	動燃
②設計支援	地層断面図作成システム (汎用機上のデータベースからの転送データから不整合面や地質などを判断)	Lisp(PC-9801)	試用	東京電力
	厨房業務用電力機器の最適配置設計システム (機器相互の隣接条件や作業を考慮した配置設計)	DSP83,C (PS55)	実用	関西電力
	地盤状態からのり面勾配を決定する支援システム (知識処理よりは実務的な計算処理が中心)	OPS83(DN660)	試用	中部電力
	地盤解析プログラム利用支援システム (有限要素法解析プログラムが対象)	(4381)	実用	中部電力
③運転・操作支援	変電所操作手順自動編成システム (遮断機や開閉機等の設備の操作手順を自動作成)	KDL(VAX3500)	実作	東京電力
	500kV 変電所の運転支援システム (基幹系変電所の障害発生時に復旧業務を支援)	BUREKA II HIDIC ES-330	実用	関西電力
	オンライン型のダムゲート操作支援システム (貯水池や雨量等からダムの水位を予測・助言)	Personal Consultant Plus(PC-9801)	試用	関西電力
	火力プラント運転支援システム (異常検知や原因診断、復旧操作ガイド)	Lisp, Fortran (Xerox, ApolloDomain)	試作	東京電力
	変電所操作支援システム 「QUALTES」	KEE (KS-303)	試用	中部電力
	配電線自動運用システムの負荷融通計算システム (配電系統の自己復旧や切替手順を決定)	BUREKA,C (HIDIC ES-330)	実用	関西電力
	原子力発電所運転支援 (異常監視、異常事象の推移予測、運転操作ガイド)		実用	動燃

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (2/38)  
(a) 電力業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/2)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
④異常・故障診断、保守支援	送電線故障区間標定システム (送電線のセンサー情報で故障区間を判定、ファジィ利用)	Prolog, C (PC-9801)	実用	東京電力
	変電所設備監視システム (事故発生時や異常時の原因判定と対応措置などの判断を支援)	Super-BRAINS (MV-15000/120)	試用	東京電力
	ビル電気設備の緊急時保守支援システム (必要情報の収集、原因究明、対処の指示等) 地方給電所事故復旧ガイド表示システム (事故設備判定と復旧方針を立案)	Arity Prolog PC-9801)  OPS83(MN-4000)	試作  試用 実用は 92年度	東京電力  関西電力
	無人一次変電所における事故・障害発生時の復旧業務支援システム	OPS5, Fortran (VAX6310)	試用	関西電力
	系統事故判定復旧支援システム (電力系統の事故情報からの復旧支援、現在は学習用)	Prolog(DS-600)	実用	九州電力
	原子力発電所保守支援 (熟練した保守技術者的人手不足への対応)	ESHELL	実用	動燃
⑤予測	最大需要予測システム (予報気象データと最近の実績データより)	TDES-3(AS-3000)	実用	東京電力
⑥営業支援	相談員支援システム (一般からの電気関連の相談に対応、相談内容の関連情報を検索)	Lisp(M-680H)	実用	東京電力
	ホットライン・サービス・システム (配車指令を知識ベース化、配車の効率化・迅速化を実現)	OPS83(if800)	試作	東京電力
⑦C A I	電気工事士受験者向け知的学習システム (学習者の解答に対してAIで指導を行う)	OPS83(if800)	試作	東京電力
⑧その他	汎用機のJCL作成支援システム (業務別知識ベースから必要なJCLを作成) 核燃料サイクル総合評価 (核燃料サイクルに関わる解析・評価)	Super-BRAINS, Lisp(M-682M) ESHELL, UTILISP, Fortran	試作  実用	東京電力  動燃
	ウラン資源探査	(IRESS)		動燃

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) はく</sup> (3/38)  
(b) ガス業におけるエキスパート・システムの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	化学分析計画梱「ES-EPA」 (産業廃棄物等の分析手順立案と見積り作成)	KEE (Symbolics 3650)	実用	大阪ガス
	石炭ヤード運用計画支援システム (各種原料炭の輸送船から受入れや払出計画を立案)	OPS5(VAX-11)	実用	大阪ガス
	ガス導管工事手順書の自動作成システム (工事時にガスを遮断する必要がある最適なバルブを選定)	ART (Symbolics 3650)	実用	大阪ガス
	LNGタンク運用計画システム 「HOPE S」 (LNGタンクの効率的な運用計画を立案)	K-Prolog (NEWS)	実用	大阪ガス
	トレーニングセンターのスクショーリング支援システム 「MARI」 (時間割り作成等の支援)	KEE3.1 (Symbolics 3620)	実用	東京ガス
②設計支援	業務用厨房レイアウト自動設計システム 「NICE」 (厨房の形状や菜種、食数から暖房機器を配置)	ART(AS3260)	実用	東京ガス
③異常・故障診断	ガス製造プラント運転支援システム 「GOPOS」 (オンライン・リアルタイム型、ネットの監視・診断)	EUREKA II (HIDIC V90)	実用	東京ガス
	LNGポンプ設備診断システム (ポンプ毎の振動特性に応じて振動データから異常診断)	TELL(PC-9801)	実用	大阪ガス
	ガバナーの故障診断システム (検査項目を表示し、その結果を入力すると故障原因を推定)	C++ (J-3100GT)	実用	大阪ガス
	コジネレーション・システム診断システム (オンライン・リアルタイムでの異常診断)	大創玄(FC-9801)	実用	東京ガス
	ガス吸収式冷温水機の故障診断システム (携帯型パソコンに搭載、現場は教育用として利用)	創玄(PC-9801)	実用	東京ガス
	コークス炉消火車の故障診断システム (運転員が現場に携帯して異常診断を行う)	BRAINS(3090)	実用	東京ガス
④営業支援	支社カレンダ・エキスパート・システム (本社から支社への応援要員の割当)	大創玄(PC-9801)	実用	東邦ガス情報システム
⑤制御	知的プロセス制御システム「IPCS」 (リアルタイム型故障診断/監視システム構築用ツール)	C. 独自ツール (HP9000)	実用	大阪ガス
⑥CAI	電力系統操作支援用の知的CAIシステム 「PDTS」 (工場やビル受配電設備が対象)	Franz Lisp (MicroVAX II)	実用	大阪ガス

表-24 廣業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (4/38)  
(c) 銀行・証券分野におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①経営分析	支店予算査定エキスパートシステム (数週間かかっていた業務を一日に短縮)	ES/KERNEL (2050)	実用	第一勧業銀行
	決算書問題発見支援システム (バランス・シートなどのチェック、問題点の発見を支援)	KBMS (VAX)	製品化	日本長期信用銀行
②相談・設計 (年金、税金、ローン、資金運用等)	「ねんきん博士」 (厚生、国民年金相談用エキスパート・システム。年金相談の約90%をカバー)	ESHELL, Lisp (M-380S)	実用	第一勧業銀行
	年金相談システム	————	実用	富士銀行
	年金相談システム (国民年金、厚生年金のモデル計算、請求手続き方法などをコンサルテーション)	ES/KERNEL, C (2050)	実用	三和銀行
	退職者向け生活設計システム (質問に対する回答を基に、最適なプランを提案)	GURU (PC-9801, PS-55)	商品化 (一部開発中)	MMI
	相続相談サービス (顧客の財産概要を入力すると税対策のシミュレーションや節税方法をアドバイス)	ESHELL, Lisp (M-380S)	実用	第一勧業銀行
	相続税対策システム (資産内容から相続税額を計算し、節税対策をアドバイス)	Smalltalk (1121)	実用	日本長期信用銀行
	相続税相談 (特に有価証券の評価に重点を置いて相続税対策を推論、表示)	ESHELL/FM (FMR-70)	実用	コスモ証券経済研究所
	「ローン・エキスパート」 (顧客のローン計画作成を支援)	ESHELL, Lisp (M-380S)	実用	第一勧業銀行
	住宅ローン/資産運用相談システム (窓口相談支援として住宅資金計画、資産運用計画のプラン作成)	Arity Prolog (PS/55モデル)	実用	協和埼玉銀行
	「マネー・プラン・エキスパート」 (約30種類の金融商品から金利を反映した資金運用プランを作成)	ESHELL, Lisp (M-380S)	実用	第一勧業銀行
	資金運用相談システム (銀行の金融商品にこだわらず、金融商品全般を幅広くカバー)	Lisp (KS301)	実用	太陽神戸三井銀行
	相談業務・資金運用プラン (相続税、自社株評価計画などが可能。リテール強化の一環)	C (M-3305[パソコン])	実用	三菱銀行
	「BESTMIX」 (資金運用相談システム。現在、月間約1,000件を処理)	BRAINS, Lisp (3090, 5550)	実用	三和銀行
	高利回り運用プランパワー (利回り、換金性などをポイントに顧客の生活設計に合わせた計画を作成)	ES/KERNEL, Cなど (2050)	実用	東海銀行

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (5/38)  
(c) 銀行・証券分野におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
②相談・設計 (年金、税金、ローン、資金運用等)	資金運用相談 (顧客の家族、資産状況をシミュレーションし、それに基づいた資金運用プランを作成)	GURU, 5550 (PC-9801)	実用	三井信託銀行
	資産運用相談システム (顧客の条件や希望から利回りを検討していくつかの運用プランを提示)	BSHELL/X (G-150)	試作	山陰合同銀行
	「パーソナル・アイ」 (約80種の金融商品から顧客のポートフォリオを作成する営業支援システム)	Prolog, C (2050)	実用	野村証券
	「ベストプランナー」 (資金運用ポートフォリオ作成支援システム。商品説明機能を追加)	KnowledgeCraft, Lisp (Sun-3, FNR-50H)	製品化	日興証券
	投資相談システム「愛(AI)プラン」 (金融商品説明、顧客ニーズに応じたポートフォリオ作成など)	BS/KERNEL (2050)	実用	勧角証券
	資産運用相談 (各種金融商品を組み合わせて最適な資産運用計画を作成・提示)	BSHELL/FM (FMR-70)	実用	コスマ証券経済研究所
	「INTELLIGENT PLANNER」 (各種金利計算のシミュレーション、効率的なポートフォリオへの組替え、ライフイベントごとのプラン作成などを実行)	GURU (PC-9801, PS-55)	製品化	MMI
③起債支援	土地最適利用システム (土地の面積、所在位置などを選択入力すると、その土地の利用プランを立案)	BS/KERNEL, Cなど (2050)	実用	東海銀行
	私募債アドバイス・システム (企業のバランス・シートなどから私募債の発行可能性、施策を示す)	BS/KERNEL (M-680H)	実用	第一勧業銀行
	私募債アドバイス・システム (私募債の発行可否の判断、発行のための提案資料作成)	BS/KERNEL/W (2050)	実用	三和銀行
	企業起債サポート・システム (発行条件の審査、発行日程案やコスト計算。大企業向け)	ART, Lisp (VAXstation GPX 11)	実用	三菱銀行
④相場分析	PRESS-CB (引受における新規起債時の発行会社に対する提案書作成。大和総研が開発)	KEE (Symbolics)	実用	大和証券
	債券先物利回り予測システム (ユーロ利用)	NUEROSIM/L (FMR)	実用	第一勧業銀行
	相場分析エキスパート (債券の値動きより売買のタイミングを見つけ、表示)	Arity Prolog (PS/55)	実用	住友銀行
	債券ディーリング支援 (債券取引のノウハウを試行錯誤的に定義、適用、検証でき、意志決定を支援)	BS/KERNEL	実用	富士銀行

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 45)</sup> (6/38)  
(c) 銀行・証券分野におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
④相場分析	先物／オプション取引の意思決定支援システム	CS-Prolog (不明)	試作	東海銀行
	「AIチャート」 (債券先物の売買タイミングを判断しディーラーを支援)	OPS5 (VAX)	実用	野村証券
⑤金融商品開発	金融商品設計支援システム「天才くん」 (スワップ、オプションなどの金融技法を組み合わせて企業向けの金融商品を設計 ファジィ推論を利用)	ES/KERNEL, C (2050/32E)	実用	第一勵業銀行
	抵当証券セッティング処理システム (抵当証券を購入金額に応じて小口化(セッティング))	OPS5 (VAXStation8100)	実用	セントラル抵当証券
⑥融資審査	公庫代理貸し付け支援システム (代理貸し付け業務における審査支援、業務手順説明など)	ESHELL, Lisp (M-380S)	試作	第一勵業銀行
	マンション・ローン融資審査 (審査の収支面、保守面からの検討を支援。あまり利用されていない)	ES/KERNEL (2050)	実用	京都銀行
	クレジット・カード申込者の入会審査支援 (日立、野村総研と共同開発)	ES/KERNEL (2050)	実用	ジェーシーピー
	A I カード自動入会審査システム 「A C A S (オート・クレジット・アクセス)」 (カード申込者のデータを過去の統計データに基づいて信用度を5段階で評価)	— (AS4000)	実用	ジャックス
	クレジットカードの入会審査 (ファジィ推論を利用し、コード化に適さない情報を取り入れる)	— (AS4000)	開発中	ディーシーカード
⑦コンピュータ関連支援	「ESCORT」 (コンピュータおよびネットワークの障害時に影響範囲を分析し、適切な対策を助言)	EXPearls (AS3000)	実用	太陽神戸三井銀行
	「TEXPERT」 (テレックス電文を伝票フォーマットに変更)	Lisp, C, OPS5 (VAX 8350)	実用	住友銀行
	プログラム検証システム (ソース・プログラムを入力すると各種標準化項目をチェック)	XPT-II (不明)	試作	協和埼玉銀行
	ARMS配番システム (夜間バッチ処理のスケジューリング(1ヵ月分))	Nexpert Object (Macintosh II)	実用	日本長期信用銀行
	ホスト・システム故障診断	BRAINS (不明)	試用	日本債券信用銀行
	ホスト機の夜間バッチ処理支援 (バッチ異常終了時に再実行ポイントを発見、再実行)	KEE, Lisp (KS-301)	試作	共同コンピュータサービス
	CD, ATM 復旧支援システム (休日稼働におけるCD, ATM の故障復旧手順を担当行員にアドバイス)	EC/KERNEL (2050/32)	実用	山陰合同銀行

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) ほか</sup> (7/38)  
(c) 銀行・証券分野におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑦コンピュータ関連支援	開発予測システム (プロジェクト管理において工数見積もり、開発メンバー割り当てを支援)	ES/KERNEL (2050/32)	実用	山陰合同銀行
	端末機器構成管理システム (新規導入端末のパラメータ設定などをほぼ自動化)	ES/KERNEL (2050)	実用	野村証券
	障害運用管理システム (ディスク装置や回線異常時に、影響するアプリケーションの回復手順を提示)	Prolog (2050)	実用	野村証券
⑧その他	店舗レイアウト設計支援 (与えられた条件から店舗の初期レイアウトを作成し、C A D側に渡す)	Lisp, C (PC-9801)	実用	住友銀行

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup>(8/38)  
(d) 保険業界におけるエキスパート・システムの適用事例(1/3)

適用業務	システム名/概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①審査・査定	融資判断支援システム (財務諸表の分析、勘定科目の異常値抽出およびその具体的説明)	KEE (Xerox 1121)	実用	日本生命保険
	企業融資審査 (融資申込受付段階での初期チェック。当該案件に関する知識を帳票化)	SuperExpert Plus (5550)	実用	明治生命保険
	企業融資審査 (審査業務のサポート。基幹システムとのデータ交換を実施)	KEE (MicroVAX)	実用	明治生命保険
	融資審査支援システム (企業融資受付案内の分析や評価と次にとるべき行動を助言)	XPT-11 (3090)	試作	千代田生命保険
	生命保険契約の査定 (被保険者の告知や医者の審査に基づいて査定)	KEE (Xerox 1121)	実用	日本生命保険
	新契約査定 (医務扱いの契約に関し、疾病状況から契約条件などを判定。対象疾病数は150)	ES/KERNEL/W (2050)	実用	安田生命保険
	体況査定支援システム (顧客から取り寄せた告知書から疾患名をコード変換)	GURU (5550)	実用	三井生命保険
	医務査定 (生命保険の加入時に、被保険者の告知や医者の審査に基づいた医務査定を支援)	ESE/MVS (3000)	実用	第一生命保険
	医務査定 (保険加入申込時の医師の診断結果や過去の疾病歴などから医務査定業務を支援)	XPT-11 (3090)	試用	千代田生命保険
	医務査定システム (医師の診断・本人の告知書から保険契約時の医的査定を行う。11疾患に対応)	ES/KERNEL/W (2050/32B)	実用	大同生命保険
②給付金支払	入院・手術給付金支払 (入院など給付金判定)	ES/KERNEL/W (2050)	試作	安田生命保険
	給付金支払査定システム (入院・手術給付金の支払内容と金額を判定。約1500の病名を持つ)	Super-BRAINS (NEWS)	実用	明治生命保険
	給付金算定 (保険金、給付金の支払請求書に基づき申請の正誤及び支払い金額の算定を実行)	Prolog (5570)	試作	第一生命保険
	給付金支払判定 (保険金支払の一部である諸給付金支払時の妥当性判定、業務支援)	ES/KERNEL/W (2050/32)	実用	東邦生命保険
	逸失利益算定 (障害部位、障害等級、職業、年齢などから後遺障害における逸失利益を算定)	KBMS, Lisp (VAX 6310)	実用	大正海上火災保険
	自動車事故過失相殺割合認定支援	ES/KERNEL/W (2050/32)	試用	日動火災海上保険

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 付</sup> (9/38)  
(d) 保険業界におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
②給付金支払	貿易保健見積り作成支援	Platform, Interlisp (Xerox1121)	実用	三菱商事
③相談・設計	生活設計アドバイス (教育プラン、住宅取得計画、財テクプラン、相続・所得税の見直しなどを提案)	能力男, C (PC-9801)	実用	日本生命保険
	生活設計相談。「夢プラン」 (結婚、住宅、教育、老後、生活、日常生活に関する相談)	InterLisp/Platform (Xerox 1121)	実用	明治生命保険
	保険相談 (顧客の年齢、家族構成などから適した保険商品を選定。店頭に設置し、顧客自身が利用)	ESHELL/FM (FM-R-60)	実用	明治生命保険
	「パートナー愛」 (生活設計アドバイス、相続税対策、事業承継、生保型資産運用など)	Platform (Xerox1121)	実用	三井生命保険
	ローン相談 (ローン借入希望者向け。目的と条件に適したローンの選択を支援)	ESPARON (5550)	実用	第一生命保険
	ライフデザイン・システム (顧客データから顧客の生涯必要額を算出、それにあった商品を提案)	Prolog (2050/32)	実用	朝日生命保険
	相続税相談システム	Lisp (FM-R-70)	実用	朝日生命保険
④資産運用	資産運用管理 (リスクが許容範囲に收まり、収益が極大になるような資産配分案を作成)	Arity Prolog (5550)	実用	安田生命保険
	資金管理運用システム (増加資産予測/ 資金運用計画設定支援、資金繰り、資産増加検査など実行)	GURU (PC-9801RA)	実用	住友生命保険
	資産運用計画 (顧客の教育プランや家族構成などから保険金や不動産、ローンなどの資金運用計画を提案)	Knowledge Craft (Sun-3/280C)	実用	安田火災海上保険
⑤防災診断・危機管理	リスク管理 (火気管理、電気設備など防災に関する質問から、そのリスク管理を実行)	ESHELL/X (M-360)	実用	東京海上火災保険
	防災診断 (工場・ビルなどの概要データと火災リスクに関する調査結果から出火危険度と防災能力を診断、分析)	ES/KERNEL (2050/32)	実用	大正海上火災保険
	リスク相談 (暮らしの安全度を交通、健康度、防犯、火災、地震の5項目別に診断し、アドバイスを与える)	ツールは不明 (N5200)	実用	住友海上火災保険

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (10/38)  
(d) 保険業界におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑤防災診断・危材管理	安全運転管理支援 (企業の安全運転管理の状況を診断し、実態に即した改善点をアドバイス)	ツールは不明 (N5200, PC-9801)	実用	住友海上火災保険
	リスク相談 (家庭のリスクを交通、健康、居住、余暇、家計の5項目に分類して分析／評価)	CRI-X (5560)	実用	日本火災海上保険
	防災調査報告書作成支援 (工場・ビルなどの防災調査データを分類し、問題点や改善案などを報告書にまとめる作業を支援)	BX/KERNEL/W (2050)	実用	日産火災海上保険
⑥経営分析	支社経営分析	BS/KERNEL (2050)	試作	日産生命保険
	経営診断 (損保代理店の経営診断を支援)	OPS83, C (VAX6310)	試作	大正海上火災保険
	経営診断 (代理店経営上の質問に対する回答から経営内容を診断し、改善案を提案)	EXCORE, Utilisp (ACOS630)	実用	住友海上火災保険
⑦コンピュータ関連支援	自動スケジューリング (毎月3000以上に及ぶ非定型バッチ処理)	XPT-11 (3090)	実用	日本生命保険
	コンピュータ自動運用システム「YES」 (進捗状況の監視と、異常が発生した場合の自動的修復)	COBOL, PL/I, C (3090)	実用	安田生命保険
	自動スケジューリング (運用部門のバッチジョブのスケジューリングを実行)	XPT-11 (3090)	実用	朝日生命保険
	プログラム自動変換 (Fortran カーゴムを解析し、ファイルやコード形式の情報などから COBOL カーゴム変換)	Lisp (KS-300)	実用	第一生命保険
	高速ディジタル回線網設計支援システム (各通信拠点のデータ量に応じた最適回線網を選択)	Arity Prolog (5550)	試作	東京海上火災保険

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (11/38)  
(e) 運輸業におけるエキスパート・システムの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画、支援	乗務員スケジュール作成 (機長、副機長など運行乗務員の月刊スケジュールを作成。対象機種はB747, B767, DC-10)	EXCORE, Utilisp C, (BWS4800)	実用	日本航空
	機材運用計画システム (B747の各機をどのように運用するか、1週間分のスケジューリングを実行)	OPS5, (VAXstation)	実用	日本航空
	航空ダイヤ編成システム (運行スケジュールを自動作成。計画立案を支援するCADシステムと連動)	Lisp, VOBOL, C, (A-600)	実用	全日本空輸
	乗務員養成計画作成システム (中長期の養成計画作成をシミュレーションなどで実行)	—	実用	全日本空輸
	列車ダイヤ作成実績システム (複数の推論方式(パラダイム)を効率よく融合させたマルチパラダイムにより共同推論形計画立案を行う。1~2ヶ月要していたダイヤ作成が2~3日に短縮された)	—	実用	札幌市・日立製作所
②輸送・配送管理	コンテナ輸送管理システム (コンテナの流れを分析／管理し、輸送の全工程を把握する)	GURU, (IBM, PC AT)	実用	日本郵船
	運転整理サポートシステム (列車ダイヤ乱れ時のダイヤ変更案を提案する)	Lisp, 独自ツール, (VAX-11/750)	試作	近畿日本鉄道
	船舶運行管理 (船舶の運行管理、操船制御、異常事態への対処、他システムの統括管理を行うことを目的とする)	OPS5, C, (MicroVAX II)	試用	鉄道総合技術研究所
③異常・故障診断支援	車両故障処置支援システム (鉄道車両故障時に乗務員が行う応急処置を支援。Q&A方式)	創玄 (PC-9801)	試作	近畿日本鉄道
	動力車の応急処置支援システム (異常時に応急処置の手順を示し、処置後の注意事項を表示)	OPS5 (MicroVAX II)	実用	鉄道総合技術研究所
	電子回路網などに関する故障診断システム (回路入力・描画機能なども備える)	mulisp (PC-9801)	試作	鉄道総合技術研究所

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (12/38)  
(f) 印刷・食品・流通・サービス業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/3)

適用事例	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①販売・営業支援	「うれるん棚」 (酒販店の冷蔵ショーケースのビールの陳列レイアウトを作成)	ES/KERNEL (2050/32)	実用	サッポロビール
	A.Iソムリエ (質問にマウスで回答しながら、ワインの種類を絞っていく)	OPS5 (VAX)	製品化	サントリ一
	企業診断による販売支援 (ユーザーの財務分析から課題を設定し、改善に有効な製品を提案する)	ESPAGON (PS/55)	実用	システム総合開発
	警備機器選択配置システムESSPL (センサー、コントローラなどを客先別に構成して組み上げる)	TAO (BLIS)	試作	セコム
	問診システム (日常の健康管理や治療後のアフターケアを支援)	Lisp3.9 (PC-9801, PC-286)	試作	セコム
②生産支援	運動処方箋作成支援 (成人病予防のためのウォーキングの運動処方を提示。歩行数や既往歴、体脂肪率などを利用)	GURU (PC-9801)	製品化	ドゥ・スポーツ
	工程制御 (ビスケットなど焼物意造工程で、焼色などのセンサー情報を基に適切な制御ができるよう指示する)	MYEXPERT (J-3100)	試作	明治製菓
③計画支援	化粧品梱包作業計画支援システム	GURU (5560)	実用	資生堂
	ギフト商品詰合せ決定システム (商品の形態や価格から最適な詰合せを決める)	Fortran (MicroVAX II)	実用	大日本印刷
	売上計画策定システム	ESHELL/X (FMG-160 同150)	実用	アオキインターナショナル
	作業スケジュール (POSデータや天候などから売上を予測。必要な作業量から個人別の作業スケジュールを作成)	ES/KERNEL (2050)	実用	カスミ
	配送計画システム (近畿県内の店舗に配達する荷物を各トラック運行便に割り当てる)	ESHELL/FM, GCLisp (FMR-70HX)	試用	ニチイ
	商品の仕入れ／販売計画立案システム (POSデータを利用。25所の売り場を対象)	OPS5 (VAX 8250)	試用	伊勢丹
	計画支援 (系列学習塾での講師配置と採用計画作成を支援)	ESP, PSI-II	試作	教育総研
	計画型システム	Lisp, FMR-70 (Lispボード搭載)	試用	灘神戸生協
	通信販売向け商品の需要予測および発注計画作成システム	GCLisp, ESHELL, FM, FMR-70	試用	三越

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (13/38)  
(f) 印刷・食品・流通・サービス業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/3)

適用事例	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
③計画支援	テレビ・スポット広告計画作成システム 「PLANES2」 (テレビスポットの局配分プランニング)	BS/KERNEL/W (2050)	実用	大広
④設計支援	包装材料設計システム (要求される条件から適切な材料構成を推論。軟包装材料が対象)	Common Lisp (Sun-3)	実用	凸版印刷
	紙パッケージ設計支援システム (パッケージの部品単位を概念ユニットで表現。CMAと統合)	PL/I上のツール (3090, PS/55)	実用	凸版印刷
	プランニング・アドバイザー (住宅の間取りプラン自動設計システム)	(NEWS)	製品化	日本電子計算
⑤資金運用・予算配分	ファンド・コントロール・システム (銀行間の資金移動を支援。入出力項目、各種金利などを考慮)	BSPARON (PMR-70)	実用	システム総合開発
	資金運用システム (顧客情報を基に資金返済などのシミュレーションを実行し、最適物件を提供)	CRI/PROLOG (PMR-70)	試作	大京
	局選択／予算配分システム「PLANESI」 (投入予算と地域に基づいて処理)	BS/KERNEL/W (2050)	実用	大広
⑥運転支援	トータルエネルギー管理システム 「TEMS」 (工場の省エネルギーシステム)		実用	アサヒビール
	巻包直結機械調整支援システム (調整のための知識と説明画面を内蔵)	Super-BRAINS (Symbolics3600)	実用	日本たばこ産業
	射出成形機設定支援 (製品仕様、環境などの条件から圧力、温度、速度などの設定項目を提示)	BSPARON (PC-9801)	製品化	システム総合開発
	初期条件設定支援 (Z80 または8085の周辺LSIの初期設定用プログラムをユーザーの初期条件から推定し出力)	Knowledge Craft, Lisp (Sun-3)	試作	メイティック
⑦異常・故障診断	コンクリートのひび割れ診断 (マスコンクリート温度ひび割れ予防設計支援システム)	BSHELL (FACOM a, M-360)	製品化	システム総合開発
	コンクリート劣化診断 (劣化の原因推定、補修要否の判定、補修方法の提示など)	BSPARON (9450 Σ)	実用	システム総合開発
	工程異常診断 (パン生地のミキシング工程の監視・制御モニタと連動し、異常工程の発見とその際の対策を提示)	BSPARON (PM16 βなど)	実用	システム総合開発
	プロセス異常診断 (プロセス状態を監視し、非正常状態に陥ると知識ベースでその原因を分析し、適切な制御を施す)	BSPARON (SILTAC, PS/55)	実用	システム総合開発
	屋外電話回線故障位置推定エキスパートシステム	KBMS	試作	日本電信電話

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 付</sup> (14/38)  
(f) 印刷・食品・流通・サービス業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/3)

適用事例	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑦異常・故障診断	電話交換設備のモニター・システム (障害の自動発見と障害復旧作業を支援)	OPS83 (DECstation)	実用	国際電信電話
	問診型医療診断支援システム「DOCTORS」 (診断論理の異なるさまざまな領域の専門医の初診問診レベルの知識をもつ。頭痛に関しては正診率が約69%、患者へのアドバイスの適正さを表す許容率は約98%の評価が得られている)	—	試作	日本電信電話
⑧コンピュータ関連支援	オペレータ支援・電算機／回路網障害診断システム	BSE/MVS (3090)	試用	雪印乳業
	入力スケジューリング (コンピュータへの伝票入力、処理結果であるリストの出力のスケジューリング)	OPS5 (VAX8250)	試用	伊勢丹データセンター
	ネットワーク故障診断 (通信ネット・サービスのユーザーに対して、障害時にその原因/箇所を推定し、対策を指示)	GURU (PC-9801)	試用	インテック
	汎用機オペレーション支援 (ハチ・ショウのエラーに対処法などを助言)	創玄 (PC-9801)	試用	インテック
	エラー診断 (有限要素法ソフト「NASTRAN」のユーザーに対し、エラー発生時に具体的な対処方法を指示)	Knowledge Craft, Lisp (Sun-3)	試作	マイテック
⑨その他	検査着眼点システム「QUITE」 (ソフト開発の検査工程で注目すべき点をアドバイス)	C, ES/KERNEL/W (2050)	実用	日本ソフトウェア
	広告文作成支援システム「GENNAI」 (入力されたキーワードから連想される単語で文章を作成)	ESP, PSI	実用	電通
	技術力判定支援 (同社技術者の技術力を総合的に判定。業務に従事するに当たっての努力目標などを提示)	Basic, C, dBASE (PC-9801)	実用	マイテック
	福利厚生システム (被保険資格認定審査、申請書類作成など健康保険に関する諸手続きの実行をガイド)	ES/KERNEL/W (2050/32)	試用	日立情報システムズ
	債券管理支援システム「CLICKS」 (入力された企業情報をもとに信用分析を行う)	(PC-9801)	実用	東京商工リサーチ

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (15/38)  
(g) 建設業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①工法選定				
a 山留工法	土留壁の形成選定支援	BRAINS(3090)	実用	大林組
	土留設計全般支援 (柱状図、土質試験結果情報等を基に掘削から断面算定まで)	ART(Sun-4)	実用	大林組
	山留仕様選定 (仮説推論により切りばりの配置と最適断面の部材を選定)	KBE(Xerox 1121)	実用	鹿島建設
	山留壁の設計計画荷重設定 (地盤のボーリング柱状図データより)	ESHELL(M-780)	試作	大成建設
	山留計画、乗り入れ構台割付 (施工計画CAD の一部)	C(EWS4800)	試用	戸田建設
b 基礎工法	基礎坑形式選定 (10支店から通信で利用)	KBMS(AI VAXstation)	実用	鹿島建設
	基礎工法選定支援 (軟弱地盤対応)	Basic.PL/I, BRAINS (3090, PS55)	実用	清水建設
	基礎工選定システム	ESHELL(M-760)	試作	西松建設
c 地盤改良工法	地盤改良工法選定 (実務担当者の支援用)	BRAINS(3090)	実用	大林組
	軟弱地盤の改良工法及び建築物設計支援	ES/KERNEL(2050)	実用	不動産建設
d トンネル施工工法	トンネル切羽評価 (スチール・ドリル入力の切羽写真より)	ART-IM (PC-9801, 画像処理装置)	実用	大林組
	トンネル坑口施工計画支援 (地形や地質の情報から坑口部に現れる現象を予測、対策工法を呈示)	ES/KERNEL(2050)	実用	鹿島建設
	トンネル施工計画支援 (工法等の選定、主要機械の検索、工程計画を含む)	KBMS/PC(PC-98)	試用	大成建設
e 斜面安定工法	自然斜面を切り取った後の斜面保護工法の選定支援	Fortran(PS55)	製品化	エフ・ケー開発センター
f 都市トンネル工法	都市トンネルの工法選定支援システム (シールド、掘置、小口径●●、開削、NATMなどの47工法対象)	KBMS/PC(PC-9801)	試作	フジタ
g シールド工法	泥土圧式シールド工法施工計画支援 (シールド材の設計、施工管理基準や補助工法の検討)	ES/KERNEL(2050)	実用	奥村組
	シールド工法選定及び最適シールドマシン選定 (土質や現場周辺の状況より)	Personal Consultant Plus(PC-9801)	試用	間組
h その他	建物軸体構法選択支援 (工期検討・杭工法システムを含む)	XPT-II (3090)	試作	清水建設
	海洋土木工事選定システム	Nexpert Object (Macintosh)	製品化	日本工営

表-24 種業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup>(16/38)  
(g) 建設業におけるエキスパート・システムの適用事例(2/4)

適用業務	システム／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①工法選定				
h その他	護岸工法選定システム (発電所の上下流を対象、ファジイ採用)	Nexpert Object (Macintosh)	製品化	日本工営
	橋梁形成選定支援 (計画概要、地形、地質等から架橋可能な形式、金融、イメージ図を出力)	OPS5, Fortran (VAXstation, GPX II)	実用	建設技術研究所
	液状化可能性判定及び対策工法選定 (ボーリング調査データより)	TELL, Prolog-KABA (FM16 β)	試作	基礎地盤コンサルタンツ
	下水道管理施工法の選定支援 (土質や周辺環境等を考慮し経済性を含めて推論)	創玄(PS55)	試用	エフ・ケー開発センター
②設計支援				
a プラン作成	土地利用企画支援	COMEX(PC-9801)	実用	竹中工務店
	概略事業プラン作成 (土地の立地条件から最適業種を選定)	ES/KERNEL(2050)	試作	奥村組
b 見積り支援	オフィスピル工事費用見積り (ファジイ利用)	KEE(Xerox 1121)	実用	鹿島建設
c 設計支援	道路橋耐震設計支援 (道路橋示方書耐震設計編の内容に同社の解釈とノウハウを付加)	ESP(PS-II)	実用	鹿島建設
	PC橋横方向鋼材配置設計システム (ファジイ利用)	ES/KERNEL(2050)	実用	鹿島建設
	防震設計支援 (マンション対象)	TELL(PC-9801)	実用	鹿島建設
	屋外設備機器の騒音防止設計支援	創玄(PC-9801)	試用	大成建設
	R C造大梁の断面選定結果の最適断面リスト作成支援	Prolog, C, XPT-II (PC98)	試用	大成建設
	総合化知的設計支援システム (オブジェクト指向により建物モデルを中心)	KEE(Sun-4)	試作	熊谷組
	意匠設計支援システム	Concept Modeler	試作	東急建設
	有限要素法解析支援全般 (プログラム選択、データ・チェック、結果の評価など)	KEE, Fortran, Symbolics, VAX8530	試用	日本工営
d 部材選択	地下浸透施設の設計支援 (地盤の透水能係数を評価)	Smalltalk (Symbolics)	試作	日本工営
	河川空間ゾーニング支援システム	Fortran/KR(Sun)	実用	建設技術研究所
e 図形処理	手書き入力の文字、線分、曲線、円、橢円等を図形や活字に変換	C(PC-9801)	製品化	竹中工務店
f 分析・予測診断	ビル公益費の分析支援	Basic(PC-9801)	製品化	大林組
	ビル風1次診断システム (ビル風による障害の予測)	創玄(PC-9801)	実用	熊谷組

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (17/38)  
(g) 建設業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
②設計支援				
f 分析・予測・診断	地盤液状化判定 (ボーリングによる調査データより)	KEE(Xerox 1121)	実用	鹿島建設
	道路交通騒音予測システム (交通量の多い道路に面した集合住宅の室内における騒音)	創玄 (PC-9801)	実用	熊谷組
	結露原因推定 (オフィス・ビル対象)	創玄 (PC-9801)	試作	熊谷組
	洪水時のダムのゲート操作のシミュレート	Nexpert Object (VAXstation)	試作	日本工営
	ダム貯水池のり面の崩壊危険度診断	ESHELL/FM (FMR-60)	試用	建設技術研究所
	低水流出の解析支援システム (最適な流出定数を推定)	ESHELL/FM, Fortran (FMR-60)	試用	建設技術研究所
	洪水時の複数ダムの放流タイミング決定	OPS83(Sun-4)	試作	建設技術研究所
	河川の水質異常診断	ESHELL-FM(FMR-60)	試作	建設技術研究所
	土質試験結果の一覧からデータの善し悪しを判定	Basic(PC-9801)	試作	基礎地盤コンサルタンツ
	自然斜面の崩壊危険度評価 (斜面の形状から)		試作	エフ・ケー開発センター
③工程管理・計画	PC建方の工程に合わせたクレーン管理や部材発注	Basic 等 (PC-9801)	実用	フジタ工業
	シールド工事現場の掘削状況監視、異常判断・対策、工程・作業管理等	ES/KERNEL (2056)	試作	奥村組
	コンクリートダム建設のスケジューリング	KEE(Sun-3)	実用	三井建設
	工期、工数、要員数見積り	ES/KERNEL/W(2050)	試作	飛島建設
	建築現場で必要とする各種情報のコンサルテーション	C(PC-9801)	実用	長谷工コーポレーション
④異常・故障診断	コンクリートひび割れ診断と対策・補修方法提示	BRAINS(3090)	実用	大林組
	コンクリートひび割れ診断	BRAINS(3090)	実用	清水建設
	コンクリートひび割れ診断 (ファジィ利用)	Basic(pc-9801)	試用	間組
	コンクリートひび割れ診断	XPT-II(3081, PS55)	試用	三井建設
	ビル設備の異常診断	Basic(PC-9801)	製品化	大林組
	ビル管理システムの故障診断	独自ツール(PC-9801)	製品化	清水建設
	泥水シールド・マシンの自己診断と対処方法提示	AI-RNA.C(PC-9801)	実用	大林組
	泥水シールド掘削時の異常発生状況と原因対策を推論 (センサー入力データ監視による)	IF/Prolog, C (HP9000)	実用	戸田建設

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (18/38)  
(g) 建設業におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
④異常・故障診断	建築設備生涯管理サポートシステムの故障診断部	Basic (MS-DOS マシン)	製品化	清水建設
	自動倉庫制御システムの故障診断	独自ツール (PC-9801)	製品化	清水建設
	工場内帆走機器の故障診断と復旧対策提示	創玄(PC-9801)	試作	大成建設
	山留工事前に発生するトラブルの予測診断	ナレッジツール(3090)	試作	前田建設工業
	アスファルト合材プラント異常診断	OPS83(PC-9801)	試作	日本舗道
	トンネル老朽化診断 (トンネル内を走査して得たデータより)	KEE (Symbolics)	試作	日本工営
	橋梁劣化診断システム (橋梁床板の損傷程度から診断)	OPS5, Fortran, GKS AI (VAXstation)	試作	建設技術研究所
⑤制御	温水温度制御 (室内環境、外気温、蓄熱槽温度の推移等 より、ファイジィ利用)	TELL, C(PC-9801)	実用	大林組
	シールド・マシンの方向、キャブ選択等の制御 (レーザー計測による姿勢情報より、 ファイジィ利用)	AI-DNA, C(PC-9801)	実用	大林組
	シールド機の現在の姿勢、ピッチ、ヨーイグ、 土圧等からジャッキの推力パターン決定	C, CLIPS(Sun-4)	実用	フジタ工業
	東京ドーム空気膜維持・管理システム	ESHELL (AS50, SENTUM)	実用	竹中工務店
	砂杭施工機械の自動制御(砂排出機構)	アセンブラー, (6809, シーケンサ)	実用	不動産建設
	ディジタル交換機内のDIPスイッチやロータリスイッチの設定内容決定	GURU (PC-9801, Compaq)	実用	日本電気システム 建設
⑥その他	建築法規相談システム	ESHELL(M-760)	試作	東急建設
	建設・不動産関連法規コンサルテーション 及びマンション販売契約手順支援	OPS83(PC-9801)	実用	長谷工コーポレーション
	設備申請支援システム	COMEX(5550)	試作	竹中工務店
	建築申請支援システム	COMEX(5550)	試作	竹中工務店
	作業船を所定位置へ移動し固定する際に 各アンカーの巻出し、巻取り量を指示	Lattice-C (PC-9801V)	実用	不動産建設
	契約書類作成支援	OPS5(AI VAXstation)	試作	建設技術研究所

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (19/38)  
(h) 機械・精密機器製造業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	試薬配分スケジューリング (自動生化学分析装置CL-7300 の2系列の測定ユニットにおける試薬配分のスケジューリング)	源蔵II (VAXstation)	実用	島津製作所
	生産計画作成システム (自動車部品生産工場における部品加工ラインを対象)	EXCORE (BWS4800)	試用	椿本チエイン
	最適配置システム (コンテナへの荷物積載の最適配置を求める)	EXCORE (BWS4800)	試用	ダイキン工業
	樹脂成形生産計画立案システム (生産管理システムの生産計画を現場情報に合わせて詳細化する)	XIJ (NEWS)	実用	プラザー工業
②設計支援	倉庫自動設計 (保管品の大きさ、重量、設置場所を基に立体自動倉庫を自動設計。見積り仕様書などを出力)	Concept Modeler (MacIvory)	実用	村田機械
	工程設計支援 (シャフト形状部品の多段階加工工程の生産ラインを設置する際の工程設計を支援。非単調推論が可能)	Utilisp (M-780)	試作	豊田自動織機製作所
	カメラレンズ設計支援 (レンズ設計シミュレーション・プログラムと連携してカメラ・レンズの公差設計を支援)	TAO、独自ツール (BLIS-8150)	実用	オリンパス光学工業
	顕微鏡レンズ設計支援 (既存レンズと組み合わせた顕微鏡の対物レンズ設計支援システム)	TAO (BLIS-8150)	実用	オリンパス光学工業
	CADシステム支援「OPTEX」 (レンズ設計向けに開発したCADシステムの知的フロントエンド。過去の設計事例の知的検索機能など)	独自ツール (VAXstation)	実用	キヤノン
	NCデータ作成支援 (CADAMの図面データから、マシニング・センタで加工するためのNCデータを作成)	OPS5 (VAX-11)	実用	豊田工業
③分析支援	パラメータ調整支援 (紙幣識別のための分離関数のパラメータ調整作業を支援。データベース部と推論部をLANで接続)	Common Lisp (HP9000)	実用	グローリー工業
	元素同定支援 (電子ビームで励起された特性X線のスペクトルから試料中に含まれている元素の同定を行う)	源蔵I (PC-9801)	製品化	島津製作所
	分析支援 (顧客からの分析要求に対して、元素同定に必要なスペクトル線を選択し、分析条件を決める)	源蔵II (PC-9801)	実用	島津製作所

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (20/38)  
 (h) 機械・精密機器製造業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
③分析支援	傾斜機能材料パラメータ設計の逆問題解析システム (数理計画法などを組み込んでいる)	Prolog, fortran (VAXstation, BAX8650)	試用	ダイキン工業
④生産・運転支援	ゴミ焼却炉運転支援システム (自動焼却制御装置と併用し異常燃焼に対する運転方法を指示)	GCLispの独自ツール (PC-9801)	実用	久保田鉄工
	射出成形機の操作支援システム (形成品の不具合に対して温度・圧力などの条件の変更を指示)	KEE (Sun-3)	製品化	小松製作所
⑤保守支援	タンク保安検査支援 (タンクの保安検査(消防法、危険物、高圧ガス取締り法)の手順、総合判定の支援)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	汎用保守支援システム (製品などの保守業務において不具合情報を基に原因や復旧方法を推論する)	C (PC-9801)	実用	プラザ工業
	修理支援 (カメラ自体が持つ検査機能とパソコンで通信して修理支援を行う。図面表示や詳細説明機能がある)	Arty Prolog, アセンブラー (PC-9801)	実用	ニコン
⑥異常・故障診断	プラント異常診断 (プラント用送風機の振動を解析することで異常を診断し、その原因を推論)	ESHELL/FM (FM16β)	製品化	旭エンジニアリング
	不良診断 (樹脂射出成形時の不良について、原因と対策を指示。カルテおよびマニュアルによる入力が可能)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	ターボ冷凍機異常診断システム (異常の原因、対策を指示。報告書作成も可能)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	機器故障診断 (オンライン振動解析装置「LEONEX」の収集データから機器の故障を診断し、原因および対策を指示)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	高圧ケーブル劣化診断 (高圧ケーブルの絶縁診断結果に基づき、劣化の度合や残存寿命を判定)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	インバータの故障診断システム (専門家でない操作員でも一次処理、判断が可能)	ShiRyu (PC-9801)	製品化	旭エンジニアリング
	電解整流機のオンライン故障診断システム	ShiRyu (PC-9801)	実用	旭エンジニアリング
	大型冷凍機の運転異常診断システム (メンテナンスをユーザーが行えるようにした)	ShiRyu (PC-9801)	実用	旭エンジニアリング
	計装機器のオンライン異常診断システム (温度、圧力、流量センサーの異常を操作員に指示)	ShiRyu (PC-9801)	実用	旭エンジニアリング
	同社製作機器(CNC旋盤)用異常診断システム (教育用システムとして販売)	PAI-100 (PC-9801)	製品化	太平洋工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (21/38)  
(h) 機械・精密機器製造業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑥異常・故障診断	工作機械(スライス盤)用異常診断システム (教育用システムとして販売)	PAI-100 (PC-9801)	製品化	太平洋工業
	アパレル向け垂直搬送機ハイトロリーの故障診断システム (コンベヤ・システム教育にも利用)	MET(独自ツール) (PC-9801)	製品化	豊田工業
	NC工作機故障診断システム (オンライン及びユーザ入力のデータを基に推論)	Prolog (PC-9801)	試作	椿本チエイン
	劣化診断 (化学槽などで使用される石油精製用改質管の残存寿命を非破壊検査により診断)	Basic, Lispの独自ツール (PC-9801)	実用	久保田鉄工
	工作機械向け故障診断システム (ファジィ利用)		試用	小松製作所
	道路舗装機械故障診断システム (エンジン駆動系に装着された電子制御システムの故障箇所を早期に発見)	Super-BRAINS (Mシリーズ)	試用	新キャタピラー三菱
	油圧ショベル故障診断システム	Prolog (PC-9801)	試作	新キャタピラー三菱
	バッテリー・フォークリフト故障診断 (同社の計測装置からオンラインでデータを取り込む)	Personal Consultant Plus (PC-9801)	実用	東洋運搬機
	ポンプ・システム故障診断 (WS、ビデオ、光ディスクから構成される)	不明 (GX)	製品化	西島製作所
	加工工程診断 (加工の各工程における寸法管理が正常になされているかどうかを、計測データから判断)	OPS83 (PC-9801)	試作	不二越
⑦プログラム自動作成	LSIレイアウト検証システム異常診断 (LSIのレイアウト検証システムが異常終了した時、ログファイルを解析して原因を指摘)	Lisp, C (Symbolics, VAXstation)	実用	シチズン時計
	マテリアル・ハンドリング・システムにおけるタイミング・グラフの自動作成 (結果はPC-9801上のCADで表示する)	ART, Genera (Symbolics 3630)	試用	豊田工業
⑧その他	マテリアル・ハンドリング・システム用のシーケンサ・プログラム自動作成システム	ART, Genera (Symbolics 3630)	試作	椿本チエイン
	医療用報告書 (医療用画像管理装置PACSと連動し、医師の報告書作成業務を支援)	源蔵I (MV-15000)	試用	島津製作所
	血液型診断 (星座と血液型から男女の相性を判断)	PAI-100(創玄のOEM) (PC-9801)	製品化	太平洋工業
	新製品・新事業開発テーマ評価プログラム	PAI-100 (PC-9801)	製品化	太平洋工業
	相続税計算支援 (遺産配分時に、相続人別の相続税額を計算する。88年12月の相続税法に基づく)	PAI-100 (PC-9801)	製品化	太平洋工業
⑨その他	病名診断支援 (頭痛、発熱などの症状から考えられる病名を診断)	PAI-100 (PC-9801)	製品化	太平洋工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 4か</sup> (22/38)  
 (i) 電機関連業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①生産計画	プリント版組立スケジューリング (山梨工場伝送部門におけるプリント基版組立のスケジュールを作成)	OPS83 (PC-9801)	実用	日本電気
	生産計画 (テレビ・ビデオなどの生産ラインにおけるプリント基盤の製造工程の生産計画立案支援。ソニーなどで利用)	EWS4800	製品化	日本電気
	検査スケジューリング (PKG検査ショップへの投入順序のスケジューリング。生産リードタイムの短縮を図る)	C++ (EWS4800)	試用	日本電気
	加工ライン生産計画支援 (機械部品の種類、ロット数、納期を基に機械加工ラインの月間生産計画を作成)	IEX (AS4000)	試用	東芝
	ゴミ焼却用クレーンの運転スケジュール作成システム (シミュレーションと在庫予測機能がある)	独自ツール(OPD風) (PC-9801)	実用	安川電機製作所
	生産計画支援 (テレビの生産計画に基づき、必要な生産計画を立案し、材料手配のための注文書を発する)	Scheiker, PL/I (3090)	試作	三洋電気
	空調機器生産工程の自動作成及び最適化 (受注データを基にライン別にスケジューリングする)	ナレッジツール (3090)	実用	松下精工
②設計支援	発泡体製品生産計画 (人手は3日分が限度だったが、2~4週間分の立案が可能となった)	BS/KERNEL (2050)	実用	日東电工
	ゲートアレイ配線設計支援	Prolog, MS	実用	日本電気
	CAD支援 (機械部品のCADデータを入力し、その部品を切削加工するために必要なデータを生成)	EXCORE (EWS4800)	試用	日本電気
	カスタムLSIの論理合式 (機能構造記述言語の仕様書からゲート・レベル記述書と回路図を出力)	EX/CL (EWS4800)	試用	日本電気
	ハードウェア構成自動設計 (ユーザーの要求に基づいて、コンピュータ・ハードウェア構成を自動設計)	UNICORN(独自ツール) (EWS4800)	試用	日本電気
	ハードウェア構成決定支援 (アプリケーション規模、応答時間、マシン稼働時間などからメインフレームのハード構成を決める)	EXCORE, Utilisp (EWS4800)	試用	日本電気
	プリント版実装配置支援 (プログラマブル・コントローラの入出力点数、信号レベルを基にプリント版の実装配置を行う)	KDL (MicroVAX)	実用	明電舎

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 46)</sup> (23/38)  
 (i) 電機関連業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
②設計支援	実装設計支援 (ディジタル・リレー設計仕様から、最適なソフト・モジュールを求めROM上に実装設計を行う)	KDL (MicroVAX, PC-9801)	実用	明電舎
	マイクロ波機器設計支援 (マイクロ波機器の電気的仕様、機械的仕様を満たすような設計を行う。CAD装置と接続されている)	IREE (AS4000)	実用	東芝
	部品配置交換 (CADから得た部品情報と結線情報に基づき、プリント板内の部品配置および配線ルートを決定)	IREE (AS4000)	試用	東芝
	原子力プラント配管自動設計 (放射線被爆低域、保守性、安全分離などが制約条件)	ART (AS3260)	試作	東芝
	受注生産商品ビル用空調の設計支援 (設計時間短縮と製造リードタイムの短縮を目指す)	Prolog (3090)	実用	松下精工
	アナログ回路設計支援 (直流増幅機の仕様(12項目)に基づきアナログ回路を設計し、特性・部品表回路図を出力)	Quintus-prolog (VAXstation II)	試用	エヌエフ回路設計ブロック
③運転支援	運転支援 (一般需要家の受変電設備の受電停電、構内事故に対して、運転操作を指示)	rTKDL (VAXstation)	実用	明電舎
	ポンプ設備運転支援 (下水処理施設において、降雨など流量変化時における運転指示を与える)	rTKDL (VAX8530, VAXstation)	実用	明電舎
	ブレンド制御支援 (原料ブレンドラインを含むコンベヤ搬送設備に対し、ブレンド制御と効率よい機器運用を行う)	rTKDL (VAXstation)	試作	明電舎
	下水処理場運転支援 (活性汚泥法を用いた下水処理場において処理データや微生物出現個数から処理状況、生物相を診断)	KDL (VAXstation)	試作	明電舎
	切削加工条件設定 (部品の対象作業形成、要求寸法、精度について、切削加工時の条件を推論する。事例検索も可能)	Lisp, 独自ツール (3090)	実用	日本電装
	金型穴加工CAM用システム (CADで作成した図面データからNC工作機械制御用データを作成)	ESI (SX-9100)	実用	オムロン
④コンピュータ・システム作成・稼働支援	JCLによるジョブ作成支援 (JCLの記述を解析する)	Utilisp (ACOS-6系マシン)	製品化	日本電気

表-24 痕業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (24/38)  
 (i) 電機関連業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
④コンピュータ・システム作成・稼働支援	ソフトウェア開発(リバース・エンジニアリング支援)	Utilisp (ACOS-6, EWS4800)	実用	日本電気
	デバック支援 (交換機ソフトのデバックを支援するため、デバック手順、試験方法、修正法を指示)	C (EWS4800)	試用	日本電気
	デバック支援 (交換機ソフトのデバック工程を支援)	不明 (EWS4800)	試用	日本電気
	自然言語のインターフェース構築支援ツール (構文解析ライブラリと文法登録エディタからなる)	C (EWS4800)	試用	日本電気
	性能解析支援システム 「EXPERFORM」 (コンピュータシステムの性能を解析し、性能改善の対策と呈示対話型)	EXCORE (ACOS-4)	製品化	日本電気
	ソフトウェア自動生成 (与えられた動作仕様を満たすプログラマブル・コントローラのシーケンサ・ソフトを自動生成)	KDL, KCL (AS3000)	実用	東芝
	プログラム開発スケジューリング (プログラム開発の際、期限や個人の能力などに基づき決める)	OPS5, C (VAXstation)	試作	三洋電機
	人事システム月間ジョブ計画 (指定月のバッチ処理をスケジュールする)	EXCORE, Utilisp (ACOS-S750)	試用	日本電気経営情報 システム開発
	プログラム実行障害診断 (エラー・コード、プログラム機能、使用ファイルなどを基に原因を指示)	EXCORE, Utilisp (ACOS-S910)	実用	日本電気経営情報 システム開発
	多機能モデルパラメータ設定支援 (パソコンからオンラインで利用する)	KBMS, C (BLIS-8100, PC-9801)	試用	大倉電気
⑤異常・故障診断支援	コンピュータ・システムの保守・点検作業を支援	NKLAMShell(独自ツール) (Symbolics)	試用	山武ハネウエル
	エラーメッセージ解析 (パターン・レイアウト自動化プログラムのエラー・メッセージを解析)	EXSYS (PC-9801)	試作	ローム
	プログラマブル・コントローラのオンライン障害診断システム	Cの独自ツール (FMR-50)	実用	富士電気 エンジニアリング
	ネットワーク障害診断「EXNETS」 (各種通信機器から成る複合ネットワークの障害を解析し、復旧のための指示を与える)	EXCORE, Lisp, c (EWS4800)	製品化	日本電気
	システム性能診断 (ACOS-6系システムの性能を診断し、十分でない場合は対策を指示)	Utilisp (ACOS-6系マシン)	製品化	日本電気
	絶縁診断 (高圧電動機の絶縁関係の測定データから絶縁データを診断し、対策を指示)	KDL (VAX)	試用	明電舎

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 46)</sup> (25/38)  
 (i) 電機関連業におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑤異常・故障診断支援	電力系統事故判定・復旧支援 (事故時のリレーや遮断機の情報を用いて推論する)	KDL (VAX)	試作	明電舎
	オンライン故障診断システム (製造ラインに設置した電気品のオンライン故障診断システム。故障原因と復旧処置を助言する)	独自ツール(OPS風) (PC-9801)	実用	安川電機製作所
	産業ロボット故障診断システム (故障診断部と電子マニュアル部にわかっている)	Personal Consultant Plus (PC-9801)	試用	安川電機製作所
	磁気ディスク・サブシステム障害保守	EXCORE (EWS4800)	実用	日電フィールドサービス
	回転機械故障診断 (回転機械の異音や異常振動から故障を診断する。測定データおよび人間の五感データを用いる)	OPS5 (MicroVAX)	製品化	アンリツ
⑥C A I	P BX系交換機の人材育成システム (画面場でP BXを模擬操作できる。障害時の対応などを学習できる)	C (PC-9801)	試用	日本電気
⑦その他	福祉相談システム 「MINDCITY福祉相談」 (各自治体で実施される214種の福祉データを搭載。パソコン用)	(FMR)	製品化	富士通

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)ほか</sup> (26/38)  
(j) 自動車・重工・造船業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	油圧機器部品の加工工程計画立案システム 「KISS」 (2年の運用実績がある)	Lisp, Flavors, (Symbolics)	実用	カヤバ工業
	ロケット発射スケジュール改訂支援 (種子島でのロケット発射整備において 天候不良や部品不具合の際のスケジュー ル改訂を自動化)	ART-IM (3090)	試用	三菱重工業
	タンカーの荷役計画立案システム	BSHELL/FM, Fortran (FMR-50)	試作	石川島播磨重工
②輸送・配送管理	運行管理支援 (顧客の要望、燃料費の市況などから、商 船に搭載するエンジンや発電装置の選定 を行う)	BSHELL (M-380)	実用	石川島播磨重工
③設計支援	機械設計支援システム「COMDES」 (部品の材料選択・加工、熱処理などの 設計を一貫支援)	ART, Lisp, (Symbolics)	試用	カヤバ工業
	ハイパーシート・シェル (制約指向プログラミングが可能なES 構築ツール)	Lisp/Genera, (Symbolics XL400)	試作	カヤバ工業
	機械部品の熱処理工程設計支援 (使用目的に対応して適切な熱処理工程を設 計。COMDESと統合予定)	ART, Lisp, (Symbolics)	実用	カヤバ工業
	油圧回路設計支援システム「OHCS II」 (CAD機能を内蔵する。現在、ネットワー ーク対応など機能拡張中)	ART, Lisp/Genera, (Symbolics XL400)	実用	カヤバ工業
	自動車部品設計システム (工程設計を考慮。オブジェクト指向の 独自シェル)	VAX Lisp, (MicrVAX II)	試用	トヨタ自動車
	自動車室内レイアウト設計支援システム (制約指向プログラミングで開発)	Prolog-KABA, Basic, (PC-9801)	試用	日産自動車
	自動車排気系設計支援および設計最適化 支援システム	- (2050)	試用	カルソニック
	自動車のゴム製部品(ウェザーラストリッ プなど)設計シミュレーション	- (-)	実用	豊田合成
	汎用構造解析プログラム利用支援 (「NASTRAN」等の構造解析プログラムに 適用。パラメータ作成を支援)	Utilisa ベース・ツー ル, ESP (3090, PSI-II)	実用	三菱重工業
	ロボット制御系設計支援システム (原子力発電用ロボットの設計に必要な数 式処理を行い、制御用ソフトの開発を 支援)	RLISP, REDUCE (3090)	試用	三菱重工業
④生産・施工支援	引っ張り成形加工手順設計支援 (航空機のフレーム加工における製品の形 状や材質に応じた加工法、加工マラメー タをアドバイス)	ART-IM (3090)	試作	三菱重工業
	原子力プラント配管ライン自動設計 (A*アルゴリズムを利用)	ART (AS3260)	試作	石川島播磨重工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (27/38)  
(j) 自動車・重工・造船業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/4)

適用業務	システム名/概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
③設計支援	熱交換CAEシステム設計支援 (設計データを直接操作して最適設計を支援)	OPS83 (NEWS)	実用	三井造船
	化学プラントプロセス設計支援 (推算手順とその手法を助言)	Super-BRAINS (3081)	実用	三井造船
④生産・運転支援	組立車両投入指示システム (塗装工程から組立て工程への車両投入時の平順化作業を自動化)	- (マイコン)	実用	トヨタ自動車
	自家用発電プラント最適経済運用システム (燃料コストと電気料金などを考慮し、経済的な運用計画を立案)	Fortran (VAX)	製品化	三菱重工業
	火力プラント運転支援システム (状態予測、起動時の異常発見と対策指示燃焼操作の指示を行う)	PL/M, Fortran (MELSTER-700)	製品化	三菱重工業
	ボイラ・プラントの学習付温度制御システム (ニューラルネットを用い独自の高速学習アルゴリズムを採用)	C (ミニコン)	試作	三菱重工業
	原子力プラント・マンマシン・システム (通常運転時、異常発生時、保守時の際の支援。運転手順知識を独自の認知モデルで階層化、フレーム表現)	ESP, Lisp, Fortran, C (VAX, PSI II, PC-9801)	試作	三菱重工業
	都市ごみ焼却プラント燃焼炉用のファジイ制御システム (燃焼炉内のごみを通過する際の燃焼ガスの圧力減少、炉へのごみ供給機の動きなどから炉内のごみの層の厚さや質をファジイ推論し、ダンパー開閉等の制御を行う)	C (PC-9801)	製品化	三菱重工業
	排煙脱硫装置における運転支援システム (排煙脱硫接続「ASC-1000」からオンラインでプロセスデータを取り込み、異常発生時の原因と対応処置を表示、プラント起動・止し時の操作指示、最適運転ガイダンスを行う)	(ASC-1000に組み込む)	試用	三菱重工業
	射出成形AIシステム (射出成形機からのオンライン・データを基に成形状況を推論し、成形条件の自動変更を行う。DBソフト「dbXL」を組み込む。)	大創玄, C (PC-286LS)	製品化	三菱重工業
	ファジイ理論による空調制御システム (センサーで温度情報を取り込み、ファジイ演算で運転制御を行う)	「ビーバーエアコン」 やビル用「セゾンマルチKX」に搭載)	製品化	三菱重工業
	石炭部分焼却炉運転支援 (ファジイ推論及びシミュレーション機能を持つ)	Lisp, C, Fortran (SUN-3)	実用	川崎重工業
	ボイラー運転支援システム (異常の兆候を検出して警告を与え、原因提示、対応操作の助言を行う)	FTX(独自ツール), OPS83 (DN3000)	試用	石川島播磨重工業
	プラント運転支援 (プラントの定常状態の運転監視、及び非定常状態の操作を支援するAIツール・システム)	OPS83 (NEWS)	製品化	三井造船

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (28/38)  
(j) 自動車・重工・造船業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム名/概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑤異常・故障診断支援	A I 技術診断システム (最新情報提供に重点を置いた故障診断支援システム)	ESHELL (Mシリーズ)	試用	トヨタ自動車
	乗用車故障診断システム (電子制御のDOHCエンジン、自動変速機が対象)	APSHELL/DIAG (FMR-70)	試用	三菱重工業
	ボイラ・プラントの運転支援システム (構成機器の故障診断、及び対処方法のガイダンス)	Fortran, Lisp (VAXstation)	試作	三菱重工業
	梶包機のオンライン故障診断システム (故障状況と処置を画面及び音声で指示)	C, 独自ツール (PC-9801)	製品化	三菱重工業
	タンポン形成機のオンライン故障診断 (故障状況及び処置を音声と画面で提示)	AI PLAN TELL, Prolog (PC-9801)	製品化	三菱重工業
	雨水排水機場の機械設備故障診断システム (故障診断、運転支援、保守支援、監視制御などを行う。知識を診断用故障木で表現。)	独自ツール (PC-9801, SM1station)	製品化	三菱重工業
	ごみ焼却プラントの異常診断システム 「DIANA」 (プラントの全構成機器を対象。オンラインデータ入力。診断結果は音声、CRT表示。燃焼系統はファジィ制御により診断結果を出力し同時に対策処置を自動化)	C, Fortran, HyperTalk, SQL, Oracle (MicroVAX II, Macintosh)	製品化	三菱重工業
	化学プラント向け汎用運転支援システム 「P D I A S」 (プラントのオンライン異常診断システム。 国内で9システムの実績。)	Fortran (VAX)	製品化	三菱重工業
	発電プラント用オンライン保守支援システム (タービンの軸振動と各種プロセス・データをもとに、異常の発見及び対策指示)	独自ツール, Nexpert Object (HP9000)	製品化	三菱重工業
	船用ディーゼル機関故障診断システム 「Engine Doctor」 (故障前兆の発見及び保守の際の助言。 センサー・データを利用。)	Fortran, アセンブラー (IBM PC AT)	製品化	三菱重工業
⑥保守支援	自家発電用中型ディーゼル・エンジン故障診断システム (センサー入力データから運転異常及び故障発生を診断、復旧ガイダンスを提示)	Basic (PC-9801)	試用	三菱重工業
	ロボット、クレーンなどの故障診断 (診断マトリックスを用いて推論)	独自ツール (PC-9801)	試用	三菱重工業
	ロボットサーボ系の協調故障診断システム (不動作、暴走、経路ずれ、過渡応答の乱れの異常事態に大使、故障木による診断と観測データ波形とモデル波形の比較による診断を協調して行う)	独自ツール, ESHELL/SB (PC-9801, A-50)	試作	三菱重工業
	PWRプラント水質監視診断システム (1、2次冷却系の水質データを監視し、異常検出時にはその原因、対処方法を提示)	独自ツール, Lisp (VAXstation)	試作	三菱重工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (29/38)  
(j) 自動車・重工・造船業におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑥異常・故障診断支援	ディーゼルエンジンの故障予知システム (ニューヨーク) (排気ガス濃度を半導体センサーで測定し ニューラル・ネット(BP)に入力して故障 予知を行う。)	独自ツール (PC-9801)	試作	三菱重工業
	紙工作機械の故障診断システム (段ボール製函機械の故障原因及び対処方 法などを表示)	独自ツール (IBM 3090, IBM 5550)	試作	三菱重工業
	アビオニクス点検用エキスパートシステム (アビオニクス(航空機搭載電子機器)の地上整 備の際に用いる。飛行名記録されたデータを着陸あと読み取り、機器の異常を診 断し整備員に指示する)	独自ツール (IBM 3090)	試用	三菱重工業
	シールド掘削機故障診断 (C言語でLISP処理系をつくり、携帯型の ツールを開発)	Lisp, C, dBASE III (SPARC-LT, PC-9801)	製品化	川崎重工業
	ガスターイン故障診断システム (センサー入力によるリアルタイム処理)	Lisp, dBASE III (PC-9801)	製品化	川崎重工業
	電力プラント運転システム (ファジィ推論機能をもつ)	Lisp, C, Fortran (SPARC-LT)	試作	川崎重工業
	溶接欠陥判定 (X線フィルム像による非破壊検査の自動 化)	BRAINS, Fortran (VAXstation)	実用	川崎重工業
	ジェット・エンジン故障診断システム (エンジン自動運転システムのデータを もとに推論)	ART, Fortran (AS3260)	実用	石川島播磨重工業
	地上式円筒タンク健全性評価 (設計時及び解放点検時に利用)	BSHELL/FM (PMR)	試用	石川島播磨重工業
⑦CAI	ゴミ焼却設備故障診断システム (故障内容を推論式により確率的に判断し て処置内容を指示)	DPS83, C, Fortran (NEWS, PC-9801)	試用	石川島播磨重工業
	原子力プラント運転員知的教育システム (総合計画、評価、講義、訓練の各モジュ ールで構成)	C (PM TOWNS, PC-9801)	製品化	三菱重工業
	製品選択支援 (顧客の要望に最もよく合う車種やグレー ド、オプションを選択・指示)	ES/KERNEL (2050)	実用	富士重工業
⑧その他	車両番号認識装置 (車両のナンバー・プレートを1秒以内に 読み取り車両検地機等と連動して料金ゲ ートにおける車種判別を自動化する)	(三菱車種判別装置 として提供)	製品化	三菱重工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 45)</sup> (30/38)  
(k) 製紙・窯業土石業におけるエキスパート・システムの適用事例

適用事例	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	生産計画 (注文データを基に、11台の抄紙機でどのように生産すればよいかを計画)	IREX (AS3160)	実用	王子製紙
	地番決定エキスパートシステム (工場製品倉庫の置き場管理(最適地番決定))	UtiKusp (A-400)	実用	三菱製紙
	負荷積み納期回答システム	ES/KERNEL/W (2050)	実用	日本ガイシ
	工程スケジューリング (システムキッチンの塗装工程のスケジュール作成)	ES/KERNEL/W (2050-32B)	実用	東陶
	板ガラス採板計画支援 (製品の厚み別に6システムからなる。 現在は基本的な計画作成のみ)	C_EUREKA II HIDIC ES-330	実用	旭硝子
②設計支援	裁断計画支援システム (ロール紙の裁断計画の効率化)	ESTRIM/WS (2050/32)	実用	(日立製作所)
	衛生陶器割掛け予測 (衛生陶器の型の割掛け(収納などを考え実寸より大きくする割合)を予測)	ES/KERNEL/W (2050-32B)	試作	東陶
③運転支援	セメント原料調合自動化システム (セメント製造の原料調合工程における運転を支援。ナビの状態変化を常時推論。 ファジィ利用。)	ESHELL/SB (A-30)	実用	日本セメント
	NSPキルンエキスパート・システム (セメント・ローラー・キルンを監視、制御)	ESPARON (IBM9370)	実用	秩父セメント
④異常・故障診断	給湯機故障診断システム「KES」 (保守担当がユーザーや現場のサービス員からの問い合わせに対処)	ES/KERNEL/W (2050/32)	実用	東陶
⑤コンピュータ関連支援	ジョブスケジューリング (ホスト機のジョブの最適スケジューリングを実行)	ES/KERNEL (2050/32)	実用	イナックス

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27) 46)</sup> (31/38)  
(1) 繊維・石油・化学工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	石油製品の生産スケジュール作成支援 (現在はタンク、蒸留塔、脱硫装置が対象)	ESHELL (M-780)	試作	コスモ石油
	潤滑プラント生産計画作成システム (月次の計画を基に運転切り替えを含む 日次の運転計画を立てる)	ESHELL (M-760)	実用	東燃
	ポリエチレン樹脂の生産計画 (品質切り替えの難易度や納期を考慮に いれて製造順序を決める)	ESHELL/X (FMG-160)	実用	旭化成工業
	アクリルの生産スケジューリング	Nexpert Object (Macintosh)	実用	旭化成工業
	生産計画支援 (当月の生産・販売・在庫量および翌月の 販売計画量からプラント3系列の3ヶ月 分の生産計画を立案)	ESHELL/FM (FMR-70)	実用	真羽化学工業
	生産計画支援 (合成樹脂プラント生産計画を作成。 2ヶ月分の重合計画、樹脂加工計画、プ ラント運転計画を立案)	ESHELL/FM (FMR-70)	実用	真羽化学工業
	切断計画支援 (多種多様なサイズの金属版を、歩留ま り、作業条件などを考慮して減量から 切り出す計画を立てる)	Goldworks (FMR-70)	実用	三菱化成
	生産計画支援 (石油化学プラント群における稼働計画や 原燃料の消費配分などを決定する。 LPプログラムと接続)	ESHELL (M-380)	実用	三菱化成
	ポリマー樹脂のスケジューリング・システム	Voil (EWS4800)	実用	住友化学工業
	プラスティック押出工程の生産計画支援 (画面インターフェース部を外版)	C (PC-9801)	実用	積水化学工業
	マシン・ローディング・システム (複数の機械への多品種生産割り付けの スケジューリングを行う)	OPS5 (VAXstation)	試作	東レ
	生産計画支援 (ゴム製品の品名・包装別の月間生産計画 を立案するシステム)	ESHELL (M-760)	実用	日本ゼオン
	生産計画支援 (営業部の受注データをホストから受け取 って月次計画を立案)	BS/KERNEL (2050)	実用	東ソー
	合成樹脂プラント生産計画作成 (反応系と仕上げ系を対象。月次販売計 画、在庫を入力)	BS/KERNEL/W (2050/32)	実用	昭和電工
	生産計画支援 (販売・在庫データを既存システムから受 け取り、制約条件に基づき生産計画を立 案)	EXCORE (EWS4800)	実用	日本合成ゴム

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)</sup> (32/38)  
(1) 繊維・石油・化学工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/4)

適用業務	システム名/概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	不飽和ポリエステル樹脂の生産スケジュール作成システム	ES/KERNEL/W (2050)	実用	日本触媒化学工業・日立製作所
	スケジューリングシステム (受注及び工程の負荷状況に基づいて、生産工程のスケジューリングを行う)	ES/KERNEL (2050)	実用	日本石油
	計画支援 (新製品を導入する際に必要な業務のPER Tスケジューリングを行う)	BSP, (PSI-II)	試作	ライオン
	化学肥料出荷計画作成システム (銘柄、包装出荷形態の多岐にわたる製品の生産・出荷計画を立てる)	ESHELL (M-760)	実用	三菱化成
②設計支援	設計支援 (製油所オフサイド設備の各構成機器データベースから機器使用法、設備追加の際の影響範囲を推論)	Fortran (YEWCOM8000)	実用	コスモ石油
	パイプラインにおける天然ガスの最適化	Nexpert Object (Macintosh)	試作	帝国石油
	設計支援 (工場内の基礎工事の際、地盤支持層まで深さを推測し、杭の長さの余裕を最適化する)	Lattice-c (PC-9801)	実用	三菱化成
	住宅間取り作成システム「アペックス」 (敷地形状、道路条件、建築法規などから条件にあった間取りを作成)	K-Prolog, C (News)	実用	積水化学工業
	接着剤配合設計支援システム (ファジィ検索による品質選定と、要求に基づく配合の推定を行う)	Nexpert Object, C (News)	実用	積水化学工業
	樹脂材料設計システム (顧客の要求を満たすモノマネー組成と樹脂特性を求める)	OPS5, Fortran (VAX)	試用	東レ
	総合材料シミュレータ (フェライト材料の設計やトラブルシューティングを支援)	Utilisp, 独自ツール (FACOM a)	実用	富士電気化学
	染料選択支援 (光線を使用する生地から、どのような染料を混ぜ合わせれば、目的の色が出来るかの候補を見つける)	Super-BRAINS (4381)	試作	住友化学工業
	生ゴム配合計算支援		実用	東芝シリコン
③生産・運転支援	運転支援 (原油の2、3次回収において、油層や原油の性質を考慮した適切な手法を選択)	EXSYS (IBM PC AT)	試作	帝国石油
	運転支援 (石油化学製品のブタン反応塔における液層分離の際の運転操作を支援する)	ART (IBM PC AT)	試作	ゼネラル石油

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)ほか</sup> (33/38)  
(1) 繊維・石油・化学工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム名/概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
③生産・運転支援	発電タービンの監視・操作支援システム (低圧蒸気圧、タービン排気流量、大気放出などを監視)	EIXAX, Fortran (UPOS4000)	実用	東北石油
	運転支援システム (同社根岸製油所のガスタービン発電機とその廃熱・廃ガスを利用する原油加熱炉の運転支援)	PICON (Lambda Plus)	実用	日本石油精製
	純粋製造プラント運転支援システム (通水量や樹脂負荷、薬液、タンクなどの運転ガイダンスを作成)	ESHELL (M-780)	試用	住友化学工業
	運転支援 (被乾燥材料に対する好適な乾燥方式を選定し、同時にその乾燥条件を推定)	ESHELL/FM (FMR-60)	試用	ライオン
	運転支援 (液体クロマトグラフィにおけるカラム選定の支援、および分析条件の設定を支援)	Prolog (if1000)	試作	藤沢薬品工業
	印刷品質管理システム「プリントエキスパートネットワーク」 (オンライン・リアルタイムに管理)		製品化	デュポンジャパン
④運転制御	エチレンプラント制御システム (18基の炉の運転状況から原料供給量や分解温度などを制御)	Fortran (HIDIC-V90/50)	実用	三菱化成
	運転制御 (化学プラントに対してARモデル予測とファジィを組み合わせた制御を行う)	独自ツール (YEWMAC)	実用	住友化学工業
⑤異常・故障診断	原油蒸留装置の異常診断と特殊原油切り替え運転支援システム (オンライン・リアルタイム型)	BRAINS, C, Basic (M-780)	試作	コスモ石油
	オンライン異常診断システム (芳香族装置の蒸留塔を対象1分周期で100データを収集し推論)	Common, Lisp (TDCS3000)	実用	出光石油化学
	異常発生対応支援 (受電・配電・発電整備において、異常発生時に運転員の対応を指示)	BRAINS (M-380)	実用	出光石油化学
	流動接触分解装置(FCC)の異常診断システム (対応処置を表示すると同時に音声で知らせる)	BRAINS (M-780S)	試作	興亜石油
	キュメン・プラント異常診断システム (オンライン・データから計器故障、プロセス異常など診断)	XLAI (AIステーション)	実用	新大協和石油化学
	異常診断 (化学プラントのセンサー・データを受け取り、異常発見、原因推定、進展予測、処置操作指示を行う)	EUREKA II (HIDIC V90/25)	実用	住友化学工業

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27)付</sup> (34/38)  
(1) 繊維・石油・化学工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑤異常・故障診断	異常診断及び運転支援 (プロセス・プラントにおけるオンライン・リアルタイム異常診断および運転支援)	G2 (SUN-3)	実用	日揮
	ディーゼル・エンジン用オンライン異常診断システム	C, Basic (PC-9801)	試用	日揮
	異常診断 (プラントの緊急停止につながる兆候を検出して、その対策などを指示)	I-REX (AS3000)	実用	東亞合成化学工業・東洋エンジニアリング
	異常診断 (化学プロセスにおける異常を診断する)	BSHELL/X (A-30)	試作	ダイセル化学工業
	錠剤ビデオ検査装置故障診断システム (現場担当者が簡単なQ&A方式で故障の原因追求ができる)	PrologとTELL (PC-9801, PC-286L)	製品化	鐘紡
⑥コンピュータ関連支援	EDP運転計画作成支援システム (ホスト計算機のランニング・ジョブの月間スケジューリング)	BSHELL (M-760)	実用	日本ゼノン
⑦その他	人事情報の知的検索システム (将来は画像情報も扱えるようにして外販する計画)	K-Prolog (NEWS)	実用	積水化学工業
	法令助言システム (プロセス・プラント建設で適用される各種法令について助言。 大砲は高圧ガス取締法など)	BRAINS (M-380S)	実用	日揮

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27はか</sup> (35/38)  
(m) 鉄鋼・金属工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (1/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	小径シームレス圧延スケジューラ (現場作業効率を考慮してロットごとの圧延順序を決定)	独自ツール (NEWS)	実用	川崎製鉄
	計画支援 (原料炭の月次配合計画(ベッド作成計画)を立案。多種の鉱柄原料を品位が安定するように配合)	ESHELL/X (M-780)	実用	川崎製鉄
	鉄鋼工程のスケジューリング・システム 「Scheplan」 (強い制約とあいまいな制約に分けた)	ナレッジツール (3081)	実用	NKK
	計画支援 (PLP(プラスチック塗覆钢管)製造工場の月次計画の作成を支援)	Lisp/VM (3090)	実用	NKK
	熱延工場材料手配計画システム	SMI/MARKS-II・i (3090)	実用	住友金属工業
	工程割り付け支援 (管材製造工程で管材に孔をあけるためのボーリング工程の割り付けや順決め)	ES/KERNEL/W (2050)	実用	山陽特殊製鋼
	钢管圧伸計画システム (機種ごとに号のバランスをとり、順、割り付け、日程決めなどを行う)	ES/KERNEL/W (2050/32)	実用	山陽特殊製鋼
	連続熱処理炉生産計画システム (納期や炉内温度などに応じて炉内に投入する材料の順序を決める)	EXCORE (GWS4800)	実用	大同特殊鋼
	圧延順編成システム (圧延時に特定のサイズ内材料群の順序を決定)	EXCORE (GWS4800)	実用	大同特殊鋼
	圧延孔型計画システム (ロストタイムが最少になるように圧延孔型の取り替えを計画)	EXCORE (GWS4800)	試作	大同特殊鋼
②生産計画	日産計画立案システム (月産計画システムと連動する。入力／表示にMultiplanを利用するのが特徴)	ESHELL/X (G-160)	実用	東京製鉄
	月産計画立案システム (在庫管理データベースを参照して製鉄工程の月産計画を立案)	ESHELL/X (M-360)	実用	東京製鉄
	原料ヤード管理計画支援システム (管理上の制約条件を守りながら鋼材原料の積付や払出を管理)	Lisp (ELIS-8130)	実用	日新製鋼
	日程計画システム (製造所内の個々の設備の運用を考慮した生産計画の作成)	ナレッジツール, XPT-II (3090/400E)	実用	日新製鋼
③在庫管理	熱延命令編成システム (在庫スラブから熱延工程へ投入するロットを抽出して順番を決定)	GNOSIS-II (UNISYS1100/91)	実用	日新製鋼

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>274か</sup> (36/38)  
(m) 鉄鋼・金属工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (2/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①計画支援	生産計画システム (本社からの生産指示に基づき、工場の各工程の月産／日産計画を作成)	ESHELL/FM (FMR-70HD)	試作	淀川製鋼所
	計画支援 (製品出荷のためのトラック／トレーラの日間作業計画を立案、総合物流管理システムの一部)	ART (Symbolics 3620)	実用	川崎製鉄
	厚板鋼材出荷沿岸作業計画システム (進捗状況と船の動静からクレーンなどのスケジュールを作成)	ESHELL (M-780)	実用	川崎製鉄
	鋼材船積み計画立案システム (鋼材の梱包状態と倉庫形状から船積み配置を決定)	Fortran (M-780)	実用	川崎製鉄
	配船計画システム (国内向け製品出荷船舶の配船計画を最適化、物流の効率化を図る)	ナレッジツール (3090)	実用	NKK
②設計支援	大径管材質設計支援システム (注文仕様と製造コストを考慮して最適な製造仕様を設計)	ART (Symbolics 3640)	実用	住友金属工業
	コンクリート構造物ひび割れ予測 (コンクリート構造のひび割れに対する予測、原因推定、補修方法の提示)	C, OPS88 (NEWS)	実用	三菱マテリアル
③運転支援	高炉操業管理支援システム (操業者の思考過程を投影して炉況判定の精度を向上させる)	BUREKA II (HIDIC V90/25)	実用	川崎製鉄
	ゴミ焼却炉の運転支援システム (経験の浅いオペレータによる操作ミスを防止)	独自ツール (Xerox 1121)	実用	NKK
	原料ヤード・エキスパート・システム (製鉄原料バースやヤードの運用と原料搬送を効率化)	Lisp (A-500)	実用	NKK
	転炉吹鍊エキスパート・システム (転炉操業の省力化と安定化を支援)	BUREKA II, C (HIDIC V90/25)	実用	NKK
	製鋼工場鋳込溶製方案作成支援システム (製鋼溶製時の目標成分や温度など製造指示を作成)	ART (Symbolics)	実用	住友金属工業
	高炉操業管理システム (ルールにより適切な制御用数式モデルを選択。鹿島第一高炉で稼働中)	SMI/MARKS-II・RT (80386搭載ボード)	実用	住友金属工業
	高炉の炉頂圧発電設備の運転支援システム (ファジィを応用した故障診断など)	BS/KERNEL (2050)	実用	新日本製鉄
	高炉操業支援システム (高炉の操業診断や動作指示)	BUREKA (HIDIC V90/50)	実用	新日本製鉄

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>27注記</sup> (37/38)  
(m) 鉄鋼・金属工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (3/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
③運転支援	厚板圧延機順編成システム (圧延ロール・パターンに対して負荷調整など圧延順の微調整)	XPT-II (3090)	実用	神戸製鋼所
	箔圧延機形状制御装置用システム (アルミ箔を圧延する際の目標形状を設定)	Cベースの独自ツール (PC-9801)	製品化	神戸製鋼所
	運転支援 (技術標準、作業標準などの固有技術とともに、製品の製造方法を展開して製造条件を指定)	BS/KERNEL (2050/32)	試用	神戸製鋼所
④運転制御	厚板クーリングベッド入側テーブル制御 (鋼板の属性を考慮して規制条件を満たす運転制御)	Fortran上の独自ツール (MELCOM350)	製品化	川崎製鉄
	加熱炉制御システム (線形計画法による最適化パターン決定の制約条件式選択と炉温度設定値決定)	GUEST (HIDIC ES-310)	実用	川崎製鉄
	EGLヤード台車の運行制御 (ヤード内のコイル滞留状況を監視して、台車の運行を制御)	EUREKA (HIDIC V90/25)	実用	川崎製鉄
	物流制御 (ビレット精整ラインで、表面検査後の丸ビレットを3台のグラインダに流す時の物流を制御)	Fortran (HIDIC V90/50)	実用	川崎製鉄
	あいまい制御による焼結均一焼成制御 (パレット幅方向の焼成速度をファジィ制御で均一化)	Fortran (U-1500)	実用	川崎製鉄
	連続鋳造モールド湯面レベル制御システム (従来の自動調整手法に操作員の経験則を加味した)	SMI/MARKS-II・RT (80386搭載ボード)	実用	住友金属工業
⑤生産管理	薄板在庫余材引き当てシステム (新規受注に対して在庫余材を引き当てる。データベースと連動)	Super-BRAINS (3090)	実用	NKK
	余剰鋼片オーダー引き当て処理システム	EXCORE (EWS4800)	実用	住友金属工業
	仕様書チェック支援 (プラント用機器や配管設備を接続するための仕様書をチェックする。JISやASM、ASMEの各規格に対応)	ESHELL/FM (FMR-60)	製品化	神戸製鋼所
⑥材料選択・見積支援	溶材選定・作業見積支援 (ビルなどの鉄骨構造物の接合に際して、溶材の選定や累積条件の決定、作業見積などをを行う)	Cベースの独自ツール (MS-DOSマシン)	製品化	神戸製鋼所
	金型材料選択システム (要求される仕様から最も適した材料を選択。新規設計と改良設計が可能)	EXCORE (EWS4800)	実用	大同特殊鋼

表-24 産業分野別エキスパートシステム適用事例<sup>274か</sup> (38/38)  
(m) 鉄鋼・金属工業におけるエキスパート・システムの適用事例 (4/4)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
⑥材料選択・見積支援	橋梁選定システム (河川橋梁特有の法令知識をルール化、橋梁の選定と工費の算定)	KBC (KS-301)	実用	川田工業
⑦異常・故障診断	回転機器整備診断システム (診断に関する経験的知識を整理して点検員の判断を支援)	TELL (PC-9801)	製品化	川崎製鉄
	油圧圧下設備の故障診断システム (ダンデム仕上ミルの油圧圧下装置を診断する)	EUREKA (HIDIC ES-330)	実用	川崎製鉄
	高炉の炉熱制御および炉況診断システム (同社の福山製鉄所で運用中)	ESHELL (S-3500, FACOM α)	実用	NKK
	塗装欠陥診断システム「EXPAIN-SHIP」 (船舶などの海洋構造物の建設後の塗装状態を診断)	OPS83 (PC-9801)	実用	NKK
	冷延タンデムミル油圧圧下故障診断システム (オンラインで油圧信号を受け取り、異常状態を監視する)	SMI/MARKS-II・RT (80386搭載ボード)	実用	住友金属工業
	設備遠隔監視システム	SMI/MARKS-II・RT (80386搭載ボード)	実用	住友金属工業
	電気亜鉛メッキの品質診断システム (メッキのラインの出力側の品質から表面欠陥の原因を診断)	MYEXPERT (UX-700)	実用	新日本製鉄
	オンライン型クラッシャ故障診断システム (クラッシャと周辺装置を監視、異常時の診断を行う)	ESHELL/FM (FMR-70HD)	試作	コベルコシステム
⑧コンピュータ関連支援	圧延機用モーター電源の故障診断システム (オンラインのセンサー・データを監視、診断)	MYEXPERT (J-3100)	実用	トーア・スチール
	光LAN故障診断システム (SUMNET3300のトラブル状況を系統的に診断)	EXPERT-U (Ustation)	試用	住友電気工業
	パラメータ作成支援 (構造解析パッケージ「MARC」のパラメータ作成をガイドし、例題によるサンプルを提示)	ESHELL/X (M-780)	製品化	川崎製鉄
	データ作成支援 (有限要素法による構造解析ソフトウェア(NASTRANなど)のためのデータの作成を支援)	Super-BRAINS (3090)	実用	神戸製鋼所
	コンピュータ自動運転支援システム	ナレッジツール(3090)	実用	住友金属工業

### 2.7.3 ファジィシステム

ファジィ理論は産業機械や家電製品の制御への応用は定着しつつあり、ESへの利用も進んでいる。また、データベースのファジィ検索なども研究されている。

ファジィ理論の実用化事例として、以下の応用分野に分類して説明する。

- ① ファジィ・エキスパートシステム
- ② データ分析
- ③ 認識
- ④ プロセス・運転制御
- ⑤ 家電製品制御

以下に各応用分野の実用化の概要を説明し、適用事例の一覧を表-25に示す。なお、表-25に示した事例は国内のすべての事例ではない。

#### (1) ファジィ・エキスパートシステムシステム

景気の動向など、あいまいさを多く含んだ表現のデータを扱う投資問題や、故障診断システム、制御支援などにファジィ理論の適用事例が見られる。

#### (2) データ分析

血液検査データの分析に用いた事例がある。

#### (3) 認識

音声認識、画像処理、ロボット制御にファジィ理論が試みられている。

#### (4) プロセス・運転制御

ファジィ制御は多くの事例で、これまでのPID制御よりも改善された制御結果が得られている。

ファジィ制御は予見ファジィ制御方式と状態評価ファジィ制御方式とに大きく分類できる。<sup>31)</sup>

予見ファジィ制御方式は、列車自動運転、クレーン等の移動体制御などに用いられ、選択候補となる制御指令の実行を仮定し、その推論結果から制御指令を得る。

状態評価制御方式は、プラント制御や自動車速度制御に用いられ、システム状態量

の観測値がファジィ集合にどの程度適合しているかを評価し、これらのファジィ集合により定義された各制御則の評価値を求め、すべての制御則の現在の状況に対する評価値を総合的に評価し、制御指令を求める。

浄水場の薬品注入制御が日本におけるファジィ制御の実用化第1号である。その後地下鉄の自動運転などの交通システムのほか、鉄鋼、非鉄金属、化学、セメント、食品、建設の各分野の制御に広く適用されている。

#### (5) 家電製品制御

家電製品へのファジィ制御の適用は、1989年12月の全自動洗濯機の水量・水流の自動制御で脚光を浴び、この2～3年で、掃除機、冷蔵庫、エアコン、石油暖房機、電子レンジ、炊飯器、ビデオカメラ、テレビ、ステレオと、あらゆる製品にファジィ制御が導入されている。全国家庭電器製品公正取引協議会では「ファジィ」の用語の使用に関して消費者に過大な期待を抱かせて混乱を招かないよう、1991年に「ファジィの使用基準」を設定し、業界の自主規制を始めた。

全自動洗濯機やエアコンの中にはファジ制御に加え、ニューロ技術を付加した製品も登場している。

表-25 ファジィシステムの適用事例 (1/5)

適用分類	システム名	概要等 (( ))内は使用ツール、適用機種等)	開発段階	開発企業名
ファジィ・エキスパートシステム	送電線故障区間判定システム	送電線のセンサー情報で故障区間をファジィ推論で判定。 (Prolog, C, PC-9801)	実用	東京電力
	新金融商品開発支援「天才くん」	「景気の先行き見通しが良い」などの通常感覚的に試用することばを知識として扱える。 (ES/KERNEL, C, 2050)	実用	第一勧業銀行
	債券先物チャート分析支援システム	感覚的な予測ノウハウをファジィルールで表現し、また現時点での予測ノウハウの有効性を検証する	実用	富士銀行
	証券投資システム「IES(Integrative Expert System)」	トレーダー、ディーラーが行う投資機会の判定と投資対象の選定を支援、	実用	山一証券
	護岸工法選定システム	発電所の上下流を対象、ファジィ採用。 (NexpertObject, Macintosh)	製品化	日本工営
	オフィスビル工事費見積り	(KEE, Xerox1121)	実用	鹿島建設
	PC橋横方向鋼材配置設計システム	(ES/KERNEL, 2050)	実用	鹿島建設
	コンクリートひび割れ診断	(Basic, PC-9801)	試用	間組
	温水温度制御	室内環境、外気温、蓄熱槽温度の推移等より (TELL, C, PC-9801)	実用	大林組
	シールド・マシンの方向、ジャッキ選択等の制御	レーザー計測による姿勢情報より。 (AI-DNA, C, PC-9801)	実用	大林組
	工作機械向け故障診断システム	—	試作	小松製作所
	接着剤配合設計支援システム	ファジィ検索による品質選定と、要求に基づく配合の推定を行う。 (NexpertObject, C, News)	試用	積水化学工業
高炉の炉頂圧発電設備の運転支援システム	運転制御	A R モデル予測とファジィを組み合わせて化学プラントの制御を行う。 (独自ツール, YEWMAC)	実用	住友化学工業
	高炉の炉頂圧発電設備の運転支援システム	ファジィを応用した故障診断等。 (BS/KERNEL, 2050)	実用	新日本製鐵
	生地染料の調合／見積りシステム「孔雀王」	測色機器で色彩を数値化。 (創玄, OPS83, PC-9801)	製品化	春日染工所
	「売れるん棚」	リーチインショウケースでの品揃え、フェイス数（正面から見て同製品を何列並べるか）の決定をA I 化し、最適商品陳列を実現。 (C, ES/KERNEL, 2050)	実用	サッポロビール
検査工程・故障診断向け分散型ファジィエキスパートシステム	検査工程・故障診断向け分散型ファジィエキスパートシステム	ESだけでは処理速度が追いつかなかった作業にファジィ推論の「直感力」で対応。 知識データベースの構築では学習機能をもつ (ルナ-FA)	製品化	オムロン

表-25 ファジィシステムの適用事例 (2/5)

適用分類	システム名/適用例	概要等 (( )) 内は使用ツール、適用機種等)	開発段階	開発企業名
ファジィ・エキスパートシステム	都市ごみ焼却プラント燃焼炉用のファジィ制御システム	燃焼炉内のごみを通過する際の燃焼ガスの圧力減少、炉へのごみの供給機の動きなどから炉内のごみの層の厚さや質をファジィ推論しダンパー開閉等の制御を行う。 (C, PC-9801)	製品化	三菱重工業
	ごみ焼却プラントの異常診断システム「DIANA」	プラントの全構成機器を対象とし、データはオンライン入力。診断結果は音声、CRT表示。燃焼系統はファジィ制御により診断結果を出力し同時に対策処置を自動化。 (C, Fortran, HyperTalk, SQL, Oracle, MicroVAX II, Macintosh)	製品化	三菱重工業
	石炭部分焼却炉運転支援	ファジィ推論及びシミュレーション機能を持つ。 (Lisp, C, Fortran, SUN-3)	実用	川崎重工業
	電力プラント運転システム	(Lisp, C, Fortran, SPARC-LT)	試作	川崎重工業
	セメント原料調合自動化システム	キルンの運転状態判断にファジィ理論を採用し、原料調合を自動化。 (ESHELL/SB, A-30)	実用	日本セメント
データ分析	薬物血中濃度測定(TDM)業務支援システム	ファジィ推論により実際の処方箋とこのシステムが output するコメント(結果)とがほぼ一致することを確認。	開発	東京大学付属病院
	血糖検査診断システム	血糖検査の診断にファジィ理論を応用。	開発	川崎医科大学
	白血球検査技術	白血球の測定データをファジィ推論で処理する。	開発	オムロンライフサイエンス
音声認識	不特定話者音声認識ユニット RV100 I	ファジィパターンマッチングにより認識認識単語数 120。	製品化	リコー
	音声認識電話	名前と電話番号を蓄積しておき、名前を発すると電話番号を認識して自動的に発信する。	試作品	リコー
	音声認識ボード(パソコン用) PC-VOICE RECOGNIZER	音声を検出して分析する。 (PC-9801, IBM PC/AT)	製品化	リコー
画像認識	感性画像処理技術	人間が原画像よりも美しいと感じる色再現法をファジィ推論で実現。	開発	三洋電機
	視覚運動制御装置	ファジィ理論と、テレビカメラ、超高速画像補間プロセッサ、モータ制御インターフェースなどを組み合わせている。	開発	富士通研究所
	テレビ会議システム	より自然な動画像を実現した国際標準方式準拠のテレビ会議システム。	製品化	三菱電機
	苗良否自動判定装置	ファジィ推論を応用した画像処理で不定型物体をリアルタイムに識別する。	開発	日本たばこ
言語理解	家事ロボット	家事手伝いロボットを想定した言語理解システム。 人間の言葉による抽象的な命令をロボットが理解するもの。 取るべき行動の決定には事例推論法を、状況の認識にファジィ推論を採用。	試作	国際ファジィ工学研究所

表-25 ファジィシステムの適用事例 (3/5)

適用分類	システム名／適用例	概要等 ( )内は使用ツール、適用機種等)	開発段階	開発企業名
ロボット	レーザ切断作業ロボット	センサーにより検出された電圧(距離)とあらかじめ設定された電圧との差分と差分の変化量からファジィ推論により位置修正量が計算され、各軸制御を行う。	製品化	安川電機製作所
	研磨ロボット		製品化	安川電機製作所
	苗良否選別ロボット	ファジィ推論を応用した画像処理で園芸植物の苗の良否を判断し選別する。	試作	日本たばこ
プロセス制御	浄水場の凝集剤注入 (凝集反応プロセス)	注入率式値をファジィ推論で補正し、水質の安定化、薬品使用量削減を図る。(U-1500 II)	実用	富士電機
	セメントキルン燃焼制御 (化学反応、熱系プロセス)	最適制御とファジィ制御の協調により品質の安定化、燃費削減を図る。(PFU A)	実用	富士電機
	セメント原料粉碎用堅型ローラミル(長い無駄時間と長い時定数プロセス)	3要素操作出力ファジィ推論で補正を行い、粉碎効率の向上を図る。(L-300)	実用	富士電機
	自動販売機 (塩素発生電極への通電による塩素発生)	通電タイミングと通電時間の組合せの予測制御により水リザーバー内の残留塩素濃度の安定化を図る。(8bit 1チップAI(富士通製))	実用	富士電機
	原子炉停止操作のファジィ制御システム(原子炉反応プロセス)	制御棒操作をファジィ推論で制御し、原子炉出力燃料温度、冷却材温度を操作する。(VP50)	実用	富士電機
	原子力発電所「ふげん」給水制御	低流量調節弁の制御にファジィを採用。プロセスデータ処理部、ファジィ推論部、ワークステーションで構成され、必要な給水弁の開度がCRT画面に表示される。	試作	動力炉核燃料開発事業団
	仕上げ圧延機の圧延負荷配分割御		実用	新日本製鉄
	圧延プロセス板形状制御	制御偏差、長手方向の形状変化、幅方向の形状変化を考慮したファジィ制御システム。板厚、形状等寸法品質の精度が向上。	実用	古河アルミニウム工業・日立製作所
	鉄鋼プロセスにおける高炉制御		実用	日本钢管
	焼結均一焼成制御		実用	川崎製鉄
都市ごみ焼却炉の燃焼制御	転炉ガス供給プロセス	プロダクションルールとファジィ推論の組合せ制御により自動化、転炉ガスの安定を図る(G-500)	実用	富士電機
	下水ポンプ所制御 (流入水の制御、揚水プロセス)	流入状況に応じた協調制御。(PFU A)	実用	富士電機
	培養プロセス	状態認識とプロセス操作の階層構成(PFU A)	実用	富士電機
	醸造制御	日本酒の醸酵工程の温度や成分の管理にファジィ制御を応用	開発	月桂冠、中国醸造など

表-25 ファジィシステムの適用事例 (4/5)

適用分類	システム名/適用例	概要等 (()内は使用ツール、適用機種等)	開発段階	開発企業名
運転制御	列車自動運転システム 「Fuzzy-A T O (Automatic Train Control)」	乗り心地や運転精度をメンバーシップ関数で表現。 仙台市の地下鉄において1987年から実用化。	実用	日立製作所
	コンテナクレーン自動運転システム	トロリの位置、ロープの長さ、障害物の形状から先々の変化をコンピュータで予測し、目標速度、ブレーキ等について自動制御する。	実用	日立製作所
	道路トンネル換気制御システム	予見ファジィ制御でセンサ情報を得て、汚染度合いを許容範囲内に抑えながら動力費を低減化する運転を行う。	実用	日立製作所、東芝
	セメントキルン自動運転システム	ファジィ理論とAIにより熟練オペレータと動搖にキルンをコンピュータ制御するFAシステム。	実用	三菱マテリアル
	自動車の速度制御 「ASCD」	自己調整ファジィコントローラにより一定な目標速度を達成するように速度を制御する。学習ルールによりファジィコントローラを自動調整する。	実用	九州工業大学・日産自動車
	無段自動变速機 「ECVT-II」	運転時に要求される变速のスムーズさと变速のレスポンスの速さの両立が難しい要求に対し、どちらの要求が優先されるべきかを運転状況であるのかの判断にファジィ推論知識が用意されている。	開発	日産自動車
	自動車エンジン制御装置	自動車エンジンの燃料噴射量や点火磁気をファジィで最適制御する	開発	NOK
	ポンプ浚渫船自動浚渫制御		実用	三菱重工業
	しゅんせつ船のファジィ制御自動運転システム		実用	明電舎
	エレベータの群管理システム	ビルの需要に合わせて、自動的にチューニングされるファジィ制御を用いた高感度割当機能と、利用者に快適な動きをさせるエキスピートシステムを採用し、待ち時間を短縮。	実用	日立製作所、三菱電機、東芝
建設機械	ヘリコプターの知的操縦支援システム	円陣故障時のオートローテーション(自動回転非行)状態の操縦支援として、パイロットの指向・判断の一部にファジィ制御を採用。	試作	川崎重工業
	トンネル掘削装置のファジィ制御	・掘削土量の基準値を維持するため、掘進速度と掘削土壤の排土速度を調整することで土壤取り込みチャンバ内の圧力を制御。 ・掘削方向制御のため、シールドジャッキのパターンをジャッキ選択ルールとファジィ推論で求める。	実用	東京電力・熊谷組
	トンネル掘削の土圧式シールド機	ファジィ制御で自動運転する。	実用	奥村組
	シールド工事の自動制御・施工管理システム	掘進管理とファジィ理論を応用した線形制御 ・自己(故障)診断機能で構成、学習機能をもつ。	試作	大林組
その他の適用例	吸収冷温水機用制御ユニット	ファジィ推論で分析・予測制御	開発	三洋電機

表-25 ファジィシステムの適用事例 (5/5)

適用分類	システム名／適用例	概要等 ( )内は使用ツール、適用機種等)	開発段階	開発企業名
運転制御	治療用人工肺制御装置	治療用人工肺をファジィ理論により精密に制御	開発	東京女子医科大学・アイビジョン
家電製品制御	自動石油給湯機	ファジィ推論で温度調整を行う。	製品化	松下電器産業
	石油ファンヒーター	室温に応じて燃焼出力を自動的に切り替え、素早く部屋を温める。	製品化	三菱電機、松下電器産業、日立家電販売富士ゼネラルなど
	エアコン	室温に応じて温度調整を行う。	製品化	日立製作所
	全自動洗濯機	布量、布質、光センサーで検地される汚れの質、濁れの量及び洗剤の種類等から、最適な水量、水流、洗濯時間を選ぶ。	製品化	松下電器産業、日立製作所、三洋電機、三菱電機、東芝など
	乾燥機	布量、布質、ヒーターの発熱量から最適な感想時間を決定する。	製品化	三洋電機など
	掃除機	床面情報とごみの量から適切な吸込力を制御	製品化	松下電器産業、三洋電機、日立製作所など
	炊飯器	米と水の量から炊き方を決める。	製品化	三洋電機、三菱電機、東芝、日立家電販売タイガーマジック瓶、松下電器産業など
	電子レンジ	食品の量や初期温度を判定して火加減と加熱時間を制御。	製品化	シャープ、三菱電機、三洋電機、東芝、日立家電販売、松下電器産業など
	テレビ	画質調整を最適化する。	製品化	ソニー、三洋電機など
	ビデオカメラ	焦点と露出の最適化、あるいは手振れによる画面のゆれの最適化を図る。	製品化	三洋電機、松下電器産業など
	ステレオ	CDからカセット・テープへの録音時における適切な時間調整、あるいは、音量や音質を過去のデータから自動設定、あるいは、ステレオやVTRなどを1台のリモコンで制御など。	製品化	日本ピクター、ケンウッド、東芝、オニキューなど

出典 各種資料より作成

## 2.7.4 ニューラルシステム (15) 32) 33) 34)

ニューラルネットワークの性質を生かした応用分野としては次のように分類される。

- ① パターン認識
- ② 制御
- ③ 最適化問題
- ④ 知識情報処理

以下に各応用分野の実用化の概要を説明し、適用事例の一覧を表-26に示す。なお、表-26に示した事例は国内のすべての事例ではない。

### (1) パターン認識

ホップフィールドネットワーク、バックプロパゲーション法やその改良型などが画像認識や音声認識などを中心に適用、研究されている。

画像認識では、実用に近いレベルのシステムとして手書き文字認識がある。従来の統計的手法にニューラルネットワークを組み合わせて認識率の向上を図っている。画像認識の応用としては、鋼板などの表面品質検査装置などがある。

音声認識は、不特定話者の単語音声認識などへ適用されている。

### (2) 制御

ニューラルネットワークはその非線形性、学習能力、並列分散処理能力、汎化能力を生かし、高度なインテリジェントコントロールに適用できる可能性をもっている。

ニューラルネットワークの応用方法としては、従来のPID制御やファジィ制御の入出力関係をニューラルネットワークによって同定する方法が試みられている。

ロボット制御への応用としては、マニュピュレータの動特性の逆特性をニューラルネットワークに学習させ、制御性能を改善したり、学習性能と高速性能の利用や、外部環境に応じた行動学習への応用などが考えられている。

ファジィ制御は実用化が進んでいるが、ルールやメンバーシップ関数の作成にニューラルネットワークの学習機能を利用する方法が試みられ、ニューラルネットワークを取り入れたファジィルール自動生成ツールの開発も行われている。

### (3) 最適化

ニューラルネットワークの並列分散処理、学習、自己組織化能力を利用し、最適化問題への適用が試みられ、ホップフィールドモデルなどの相互結合型ニューラルネットワークが利用されている。

行動・動作などのプランニングにおいて最適性を必要とする問題は多く、パラメータが多くなれば計算量が膨大になる。組合せ最適化問題への代表的な事例としては、巡回セールスマン問題がある。発電機の出力調整の事例では、最適化評価関数を発電コストのみでなく、数量的に評価が困難な社会的制約要因を含めて総合的に解く問題にニューラルネットワークが適用されている。

投資問題ではポートフォリオ選択のためのシミュレーションに適用が試みられている。

#### (4) 知識情報処理

ニューラルネットワークの並列分散処理能力や学習、自己組織能力などを組み合わせてハイブリッド化することにより、「知識の獲得」、「知識の処理」が解決できる可能性をもっている。E Sの知識獲得や、ワープロのかな漢字変換方式に対し、ニューラルネットワークの連想機能の適用が研究されている。予測や診断などの問題への適用が多い。

高炉運転制御支援システムは、炉壁温度等の測定データの解析結果から分布パターンを推定し、その結果をE Sに移植して利用している。

表-26 ニューロシステムの適用事例 (1/5)  
(a) 電力・ガス分野におけるニューラル・ネットワークの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
予測	1日先電力需要予測 (予測精度の向上。 当日の午前6時の総需要や気温、天気のタイプなどが入力され、同日の午後12時の総需要を予測。 入力層17、中間層8、出力層1のニューロンから構成される3層構造。重回帰分析より精り精度良く比較できる。)		研究中	東芝
最適化	発電機の最適運用 (ニューラルネットはある状態の発電機群出力 {Pi} と系統負荷値 {Li} を入力すると、系統状態をより良い状態にするのに適した発電機群の出力変化 {Δpi} を出し、発電機の出力を制御する)		開発	東芝
診断	送電線故障区間標定 (自己学習機能により複雑な送電線故障区間標定ルールを自動的に作り出して正確な故障発生区間を把握する)		開発	日立電線
	原子力発電プラント過渡現象診断 (過渡状態にあるプラント主要信号のパターンをニューラルネットに入力し、原因究明を行う。BP法。)	BPS (Back-Propagation Simulator) (ミニコンG8090)	開発	東芝
	電力系統の状態評価 (電圧パターンの評価にニューラルネットを採用)		開発中	東芝
認識／分類	ガス管腐食検査システム (数学的手法(多変量解析)を知らないても検査できる。ガス管の状態に検査の条件を対応が可能)	(NEWS、実用には携帯型PC-9801)	実用	東京ガス
	温熱感覚快適センサー (BPおよび米Nestor社のRCEの改良版の学習モデル PENN(Probabilistic Energy Neural Network)を独自開発)	独自開発モデル PENN (Sun-3)	試作	大阪ガス

そのほか、以下の研究開発が行われている。<sup>32)</sup>

- ・長期電力需要予測(数年後の最大3日電力の予測。入力層、中間層、出力層の3層構造。  
入力としてGNPや人口の伸び率等のマクロ量を考慮。2、3年程度先であればかなりの高精度で予測可能。)
- ・発電機起動停止計画(高速近似計算)
- ・経済負荷配分(数分先の発電機の出力制御、発電機出力の上限と下限、需給バランスの制約条件下で火力発電所の燃料コストを最小化。)
- ・電力潮流計算(高速近似計算)
- ・最適潮流計算(高速近似計算)
- ・トポロジー可観測性問題(高速近似演算)
- ・状態推定(高速近似演算)
- ・過渡安定度判定(臨界故障除去時間や潮流多根相差角のオンライン判定)
- ・動態安定度推定(動態安定度指標のインライン計算)
- ・系統状態量評価(系統の電圧分布から系統状態を推定)
- ・二次系統の事故復旧(高速近似解法)
- ・配電系統負荷融通問題(高速近似解法)
- ・変電所故障区間標定(電流、リレー動作などによる判定)
- ・高調波負荷の推定(スペクトルによる高調波源の同定)
- ・高調波の監視(連続監視した高調波の分類)
- ・円筒形ボイド(部分放電からのボイド、故障の推定)
- ・電力ケーブル  
(特高圧ケーブルに発生する部分放電を検出し、線端破壊を防止。入力層50、中間層8、出力層2の3層構造。  
ケーブルの片端で測定された電圧波形を振幅の正規化の後、波形の立ち上がりから50点入力層に与える。  
出力は部分放電を起こしているか否かである。)

表-26 ニューロシステムの適用事例 (2/5)  
(b) 金融・証券業におけるニューラル・ネットワークの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
予測	債券先物利回り予測システム (国債の利回りに関し過去1年間のデータ学習後、 1~5日後の上げ下げ予測の正当率が75% (トレーダーの平均60%) )	NEUROSIM/L (PMD(ニューロ・ボードを 装着))	製品化	第一勧業銀行・ 富士通
	外債利回り予測システム (外債に関し債券利回り予測システムと同様)	NEUROSIM/L (PMD(ニューロ・ボードを 装着))	製品化	第一勧業銀行・ 富士通
	為替相場予測システム (円・ドルの翌日のオープニング・レート、上げ下げ の傾向、変動レンジなどを予測)	NEUROSIM/L (PMD(ニューロ・ボードを 装着))	製品化	第一勧業銀行
	株式売買システム 「NEURO-PORT」	Nestor製 (Sun-4)	実用	大和証券
	株価個別銘柄予測 (過去15年間のチャートパターンをスーパーコンピュータに学習させ、株価の先行きを予測)	(スーパーコンピュータ)	実用	大和総研・日本電気
認識／分類	社債格付け	(SPARCstation 1)	試用	日興証券・富士通
	債券格付け	-	試用	野村総研
	インデックスファンド作成	-	試用	野村総研

(c) サービス・建設業におけるニューラル・ネットワークの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
予測	建物内部の熱負荷予測		カタログ	ダイダン
診断	企業体质診断システム	NEURO-07	実用	矢矧コンサルト
その他	データベース管理システム (あいまいを許した検索機能。 スーパーコンのベクトル演算とBP学習との相性が よいことを立証)	(スーパーコンピュータ・クラス)	開発中	リクルート・ 米海軍大学院
	生活保障モデルのシミュレーション	(PC-9801)	試作	生命保険文化センター

(d) 製造業におけるニューラル・ネットワークの適用事例 (1/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
予測	ポートフォリオ (ホップフィールドモデル(相互結合型)を採用)	(スーパーコンピュータ)	実用	日立製作所
	株価予測		実用	日立製作所
認識／分類	超音波による3次元物体認識装置 (画像の補正にニューラルのパターン判定機能が有効)	(PC-9801, 超音波カメラ)	実用	リコー

表-26 ニューロシステムの適用事例 (3/5)  
(d) 製造業におけるニューラル・ネットワークの適用事例 (2/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
認識／分類	形状識別装置 (超音波による3次元物体認識装置をプラスチックレンズの多品種少量生産ラインの製品の仕分け用に搭載、識別率はほぼ100%)	(PC-9801, 超音波カメラ)	実用	リコー
	手書き文字認識		試作	リコー
	OCR手書き文字認識		試作	東芝
	手書き数字認識 (自社開発のニューラルネット構築手法 SOMA (Self-Organization to Modules by Activity propagation) を採用。BP法に比べ、学習時間が1/10になる)		試作	東芝
	手書き文字認識		試作	日本電気
	印刷漢字認識 (超高速印刷漢字OCR。約3500種類の印刷文字を400字/秒認識。既存OCRに比べ約10倍のスピード)		試作	三菱電機
	印刷漢字認識		実用	シャープ
	不特定話者単語認識ボード (固有ベクトル(K-L展開係数)を埋め込んだニューラルネットによりBP法を採用)		試作	東芝
	不特定話者大語彙単語認識方式 「SMQ-HMM」 (ニューラルネットにより音声を識別した後、入力音素系列と各単語の音素系列(モデル)との対応づけをHMM(隠れマルコフモデル)により行う)		試作	東芝
	大語彙音声認識 (不特定話者の数字認識が99.8%, 特定話者の大語彙(5,000単語)を97.6%認識可能)		試作	日本電気
	音声認識システム		試作	シャープ
	音声認識システム (あいまいな発音でも人間並みに聞き取れる。ファジィとニューロを組合せ、特定話者の単語は95%認識可能)		試作	日立製作所
	アナライザ波形同定	DNS1000	製品化	小野測器
	音声・モデム信号識別「DCME」(高能率終端装置)		製品化	日本電気
	ワードプロセッサのかな漢字変換 (ニューラルネットによる連想能力を付加し文脈に沿った変換を行う)		実用	東芝
	音声ワープロ		実用	シャープ
	サイン照合		試作	日立製作所
	顔照合		試作	日本電気

表-26 ニューロシステムの適用事例 (4/5)  
(d) 製造業におけるニューラル・ネットワークの適用事例 (3/3)

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
認識／分類	フェルト設計・製造支援 (データベースの分析システム (step1) 設計と製造に関する各要因関連の解明、約79個の因子を40個に集約、設計者の気づかない現実を見出す効果。 抄紙機で発生する振動の解析システム (step2))	SkillTran (Macintosh+25MIPSのRISCボード)	開発	日本フェルト・千代田化工建設
	原子力発電プラント過度現象診断	BPS (Back-Propagation Simulator) (G8090)	試作	東芝
制御	圧延機形状制御 (形状検出記号をニューラルネットワークによりあらかじめ学習させてある複数の基準パターンに分類し、その成分量を認識させる。その認識結果を定性的な操作を実現するファジィルールにあてはめ、良い形状をもたらす指令を出力する。)		試作	日立製作所
	ロボットのアームの位置決め		試作	日本電気
	ロボットアームの学習制御 (小脳ネットワークモデルを学習装置として適用し、多間接アームの学習制御に適用。 ペーセプトロン・モデル)		試作	富士通
	エアコン制御 (設定温度、外気温度、吸い込み温度などをニューラルネットに入力し、PMVを算出する)		製品化	松下電器／松下技研
	全自動洗濯機 (光センサの出力パターンと布量検出データからニューラルネットにより洗濯に関する要因(洗剤の種類、溶けやすさ、汚れ指数)を検出し、ファジィ制御の結果に補正を加えて最適な洗濯工程を実現する(BP法))		製品化	東芝
	オーブングリルレンジ (気体センサの検出電圧パターンからニューラルネットを通して調理対象の保存状態や分量の検出を行い、ファジィ推論で最適調理時間と火力を調整する(BP法))		製品化	東芝
	ブラウン管調整装置制御		開発	松下技研
	回収ボイラインテリジェント制御 (ニューロ(BP法)とファジィ技術を応用。 チャーベット形状認識をニューラルネットにより、経験則による運転をファジィ推論で制御する。)	(画像認識:J-3300, ファジイコントローラ:G8020)	検討中	東芝

(e) 造船業におけるニューラル・ネットワークの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
①認識／分類	車種判別用画像処理システム		試作	三菱重工業

表-26 ニューロシステムの適用事例 (5/5)  
(f) 鉄鋼業におけるニューラル・ネットワークの適用事例

適用業務	システム名／概要	開発ツール (マシン)	開発段階	開発企業名
認識／分類	鋼板表面疵検査システム (小さな疵の場合、それが疵なのかもともとの凸凹な のかを区別するためにパターン判定機能を利用)	Professional II (PC-9801+ 専用プロ セサ装置)	実用	新日本製鉄 (君津、名古屋 製鉄所)
	冷延鋼板疵検査システム	独自開発ツール (パソコン/NEWS)	試作	住友金属工業
	ブレークアウト(破断)予知・診断システム		試用	新日本製鉄 (八幡製鉄所)
	加熱炉の診断	独自開発ツール (パソコン/NEWS)	開発中	住友金属工業
制御	高炉運転制御支援システム (日本におけるニューロ実用化の第1号)	NEUROSIM/L (PC-9801+ 専用プロ セサ・ボード)	実用	新日本製鉄 (大分製鉄所)
	プロセス制御におけるパラメータの初期チューニング	独自開発ツール (パソコン/NEWS)	開発中	住友金属工業

出典 各種資料より作成

## 2.7.5 その他

### (1) 機械翻訳システム

表-27に現在販売されている主な機械翻訳システムを掲げる。現在販売されているシステムは、二言語間の翻訳であるが、ピボット方式による多言語間機械翻訳システムの研究開発もコンピュータ・メーカーなどで進められている。機械翻訳システムの中にはOCRで原文を入力できるシステムもある。

近年、企業の活動や研究開発において国際化が急速に進んでおり、また日本語が他の外国語と比べて特殊であることから、機械翻訳システムのニーズは高く、より精度の高いシステムが求められる。

機械翻訳システムの利用例を以下に示す。

- ①第一勧業銀行では富士通の機械翻訳システムATLAS-Gを導入して海外支店向け事務手続き書類やマニュアルなどの日英機械翻訳システムを実用化した。金融専門用語辞書約4300語、金融一般用語辞書約2万語を独自に整備している。日本語の前編集と金融専門／一般用語辞書の利用を行った場合の翻訳率は平均88%であったとしている。
- ②特許庁は富士通の機械翻訳システムATLAS-Gを導入し、庁内の翻訳作業に使用するほか、特許文書検索用として特許庁が整備しているキーワード体系「F ターム」の解説書の英訳に使用する。
- ③通商産業研究所はシャープのDUET-E/Jを導入し、「国際協定等英文情報システム」開発に利用する。

表-27 主な機械翻訳システム

開発／販売会社	システム名	対象言語	対象機種、方式等
富士通	ATLAS-I ATLAS-II ATLAS-G	英→日 日→英 日→英, 英→日	Mシリーズ, トランスマッチ方式 Mシリーズ, ピボット方式 FMG, ピボット方式
アイ・ビー・エス ／日本電気	PIVOT	日→英, 英→日	EWS4800
シャープ	DUET-E/J II DUET-J/E	英→日 日→英	OCRあり OCRなし
沖電気工業	パンセ	英→日, 日→英	パソコン
三洋電機	HEAVEN JE/EJ	英→日, 日→英	32ビットパソコン
ノヴァ	Transfer/EJ Transfer/JE	英→日 日→英	
カテナ・リソース 研究所	Star The Translator	英→日 英→日	UNIX WS用 Macintosh用
米Globalink Lan- guage Services/ イリス・インター- ナショナル	GTS	独・仏・ スペイン語 ↔英	IBM PC AT, PS/2 トランスマッチ方式

出典 各種資料より作成

## (2) 知能ロボット

日本における産業用ロボットの発展は、FA化が進む1980年から本格的に普及し、現在、世界（共産圏を除く）の産業用ロボットの稼働台数の6割強が日本で稼働している。<sup>20)</sup> 近年の多種少量生産ニーズに対応するため、高度なインテリジェント機能を備えた産業用ロボットの役割が重要となっており、ESや、ファジィ制御、ニューラルネットワークによる学習機能・高速化機能などを搭載したロボットの研究開発が進められており、一部は実用化されている。

知能ロボットと称される代表的な実用化例としては、

- ①コンクリート床直仕上げロボット
- ②外壁検査ロボット
- ③外壁塗装ロボット
- ④シールド自動制御装置

などがある。

## (3) 自動プログラミング

自動プログラミングは、自然言語で記述された仕様からソースプログラムを生成するシステムや、プラント制御用プログラムの自動生成システムなどが実用化されている。

## (4) 知的CAI

知的CAIシステムは、電力系統操作訓練用など、高度の知識と熟練を要する作業訓練に適用されており、知的CAIシステムの開発支援システムも開発されている。最近開発された支援システムとして以下のものがある。

- ①NTTラーニングシステムズ開発
  - a)知的CAI開発支援システム Cairney-Author
  - b)知的CAI実行用システム Cairney-Tutor

Cairney-Authorで作成した教材をNTT開発のAIツールKBMS/PC上に構築されているCairney-Tutorで実行する。

- ②ランドコンピュータ開発
  - a)知的CAI開発支援システム IROSAO-III

意味ネットワークの形式で教材中の知識を表現する。

- ・学習モデルを設定して学習の流れを柔軟に設定
- ・プロトタイピングによる教材作成
- ・教えたいたい事柄の定義や関係の指定を画面上で視覚的に行う

## 2.8 課題と展望

### 2.8.1 課題<sup>35)</sup>ほか

人工知能の代表的応用分野である E S は、1980年代後半より実用化が始まり、現在ほとんどの産業分野に普及している。

人工知能技術の今後の課題として指摘されている主なものの概要は以下のとおりである。

#### (1) 知識獲得問題

E S の最大の問題点は、領域専門家からの知識獲得問題にある。

知識を領域専門家から引き出し、それをルール化するには多大の時間と試行錯誤を必要とし、システム開発工数の大半を知識の獲得・整理・体系化に要しているとされている。

専門家の持っている知識は、直観的や断片的でしかもあいまいな表現しかできない場合が多く、ルール化できない経験を事例として保持している場合が多い。また、ルールは経験を一般化したものであるが、適切に汎化されていない場合は誤った推論結果をもたらす危険性を有している。

これらの問題を解決するには、領域専門家からの知識獲得を効率的に支援する知識獲得支援ツールの開発や、高次推論技術の導入、学習技術の導入などが必要とされる。ルールベース推論以外の推論方法としては、モデルベース推論、仮説推論、事例ベース推論などが考えられている。モデルベース推論は定性推論など、問題解決の対象であるシステムの構造や構成要素の特性及びシステムの挙動を支配する原理・原則（深い知識）を直接利用して問題解決を行う方式である。仮説推論は、計画や設計における人間の試行錯誤的な問題過程をシミュレートし、仮説の生成、無矛盾性の検証、矛盾が生じた場合の後戻りなどを一貫して制御する方式である。モデルベース推論も仮説推論も組合せ爆発を起こす危険性を持っている。ルールベース推論を補間する推論技術としては、現在、事例ベース推論が注目されている。

あいまいな表現の処理に関しては、ファジィ理論の適用が試みられている。

学習方法は、機械学習や生物学的学习であるニューラルネットワーク、遺伝アルゴリズムなどが研究されている。

## (2) システムの信頼性

A I システムを利用する上では、そのシステムの性能が充分で信頼性のあるものでなければならぬ。しかし、その評価法は確立されておらず、研究が緒についた段階である。

## (3) ヒューマンインターフェース

A I システムの適用が広がるに従い、「人にやさしい」システムを実現するためのヒューマンインターフェースが求められる。グラフィックインターフェースが一部実現しているが、日常会話に近い言語でシステムを操作するための自然語インターフェースや、より人間に近く自動的に稼働するためのセンサ技術、パターン認識技術などが必要となる。これらの技術の実現のためには、認知科学的なプローチが必要とされ、ニューラルネットワークの研究や心理学、言語学などの研究が今後、必要である。

## (4) 高速化

A I にファジィ理論やニューラルネットワークが用いられるようになったが、制御や知能ロボットなどのリアルタイム処理においては計算処理の高速化が要求され、ファジィやニューロ専用のハードウェアの開発が今後、必要である。

### 2.8.2 今後の展望

A I は、高度情報化社会を実現するための基盤技術として期待されているものである。人工知能の代表的応用分野である E S は、まだ多くの研究・開発課題を抱えているが、広く多方面で応用され、実用化が進んでいる。

A I に関する最近の研究テーマは、「柔らかな情報処理」や、「人にやさしい」システムの実現である。国家プロジェクトもいくつか計画・実施されており、A I 技術の新たな展開が期待される。

「第五世代コンピュータプロジェクト」における、並列推論マシン P I M と関連ソフトウェアの開発は1991年度で終了し、1992年度からは P I M を利用して遺伝子の解析や法律判断などへの応用研究の継続を予定している。

ポスト第五世代プロジェクトとしては1992年度から10~12年計画で「新情報処理技術

開発プロジェクト（N I P T プロジェクト：New Information Processing Technology）」が開始される予定となっている。このプロジェクトの方針は、「第五世代」のように予め目標を設定するのではなく、「柔らかな情報処理」をめざして、並列処理、認知化学、ニューロコンピュータ、光コンピュータなどの要素技術を個別に研究するものである。応用研究としては、

- ①柔らかな認識／理解：画像理解、音声認識、自然言語理解など
- ②柔らかな問題解決：制約充足型問題解決、自己組織データベースなど
- ③ヒューマンインタフェース：人にやさしいインタフェース
- ④シミュレーション：人工現実感、大規模シミュレーション
- ⑤柔らかな制御：知能ロボット

を考えられている。

自然言語処理技術に対しては、(株)日本電子化辞書研究所（E D R : JAPAN Electronic Dictionary Research Institute）で高品質な自然言語処理用データベースである電子化辞書の研究開発が1986年度から1994年度までの予定で行われている。

国際ファジィ工学研究所（L I F E : Laboratory for International Fuzzy Engineering research）では、1991年3月から6年計画でヒューマンフレンドリーシステムをメインテーマとして、次の研究開発を進めている。

- ①意思決定支援

意思決定支援システム、プラント運転支援、プロセスのファジィ制御

- ②知能ロボット

言語指示の理解、視覚情報の理解、知的行動意思決定

- ③ファジィコンピュータ

ファジィ連想記憶システム、ファジィエキスパートシステム構築支援ツール、  
ファジィコンピュータ

以上のような大規模な要素技術の研究開発プロジェクトのほか、人工知能学会や日本認知学会、日本ファジィ学会、神経回路学会などの人工知能関連の学会が近年設立され、また、他の科学分野の多くの学会でもA I 関連の研究活動が行われている。産業界では、コンピュータ・メーカーがハード・ソフトの研究開発を行っているほか、独自に応用研究を行っている大手ユーザー企業もある。これからのA I 技術の進展のためには、これ

まのコンピュータ関連技術の研究開発に加え、心理学、医学、言語学などの研究が必要であり、多方面からのアプローチとお互いの連携研究が望まれる。

### 3. 地層中での物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討

核種の地中移行は、核種の溶解・化学種生成と吸着という2つの大きな要因によって支配されるが、このような現象は移行経路での地下水と岩との間の化学反応により起こる。これらの現象は、温度、pH、岩石鉱物、および地下水組成等に大きく依存しているとともに、これらの因子は時間とともに変化する。したがって、この様な現象を予測するためには、地中の鉱物と地下水の組成イオンとの間の化学反応の十分な理解と調査が重要である。放射性廃棄物の地層処分においても、様々な局面においてこのような現象を検討・評価することが重要となる。

したがって本調査では、上述のような、地下水中に存在する化学種が地盤を構成する鉱物と様々な化学反応を起こし、沈殿、溶解等の現象を引き起こす過程に関して調査検討を行った。なお以下では、このような過程を「地球化学プロセス」と呼ぶ。

#### 3.1 概論

地球化学プロセスに関する研究は、地熱分野で多くの研究成果があり、その成果を引用しての土壤物理の分野での研究成果例もある。一般に、地球化学プロセスのシミュレーションに関する研究では、まず地下水中の化学種組成を計算し、次に地盤構成鉱物との化学反応、すなわち、水—岩相互作用のシミュレーションが行なわれる。CBC MIRAGEプロジェクトの一環として行なわれた、放射性廃棄物に関する地球化学モデルに関する国際共同研究であるCHEMVAL の結論では、現在の地球化学シミュレーションコードは、同じデータベースを用いると大体同じ結果が得られ、その活用に当たって最も注意を要する点は、不正確なデータ、地下水及び固相中の重要な要素の見落とし、そして実験的に求められたデータからパラメータ値を導く際の過程の間違いなどである<sup>1)</sup>、と指摘している。したがって、解析モデルに関する調査のほか、Key となる核種および固相の熱力学的データが重要な検討項目と言え、処分システムに関する地球化学モデルの確証は、モデルに含まれている過程と、モデルに用いられるデータの両方が妥当であるかどうかに対して行なわれるべきであると思われる。

現状の地球化学シミュレーションコードの放射性廃棄物処分への適用に関する研究では、原位置や実験室で行われている実際の処分状況を模擬した実験の結果を、詳細な地球化学モデルと熱力学データで説明することが大きな目標となっている。このような検討により、

基本的な熱力学データ・地球化学プロセスモデルと実際の問題との差が明らかになり、また、実験における測定誤差あるいは、実際の処分場では入ってこないような実験における人為的な影響も明らかにすることが可能になる。そして、このようなコードを用いて、サイトの検討、廃棄物パッケージ（キャニスター、オーバーパック、緩衝材など）の設計、性能評価が行われるものと思われる。<sup>2)</sup>

図一14は、Sandia国立研究所で行なわれた性能評価計算のフロー図である。同図で網かけの部分が地球化学プロセスが考慮される箇所である<sup>3)</sup>。同図に示されるように、地球化学プロセスは、亀裂および岩体マトリックスでの核種の移行を評価する際に検討され、この検討結果が直接に生物圏への核種漏洩量の予測結果に影響を与えるものであり、性能評価上極めて重要な役割を担っている。また、廃棄物パッケージの設計では、いわゆるニアフィールドで起こる地球化学プロセスの把握が重要となる。特に、キャニスター近傍では温度変化の影響、及び人工的な構築物との反応も考慮する必要がある。

本章は、放射性核種の地層中での移行予測手法における地球化学プロセスシミュレーション技術の導入の可能性を検討するものであり、以下の項目について調査検討した。

- ①地球化学プロセス研究の現状
- ②地球化学データベースの現状と動向
- ③連成モデル研究の現状と動向

ここで、連成モデルとは、地球化学プロセスシミュレーションと地下水あるいは物質移行シミュレーションの連成解析手法に関するものである。

### 3.2 地球化学プロセス研究の現状

#### 3.2.1 地熱分野での現状

先述のように、地球化学プロセスに関する研究は地熱分野で多くの成果が出ている。

地熱分野では対象となる地下水の温度が150 ~300 °Cであるので、多くの場合、平衡状態を仮定しても問題は無いと考えられている<sup>4)</sup>。

現在、最も多くの成果を収めている地下水一岩相互間のシミュレーションでは、図一15に示すように各地点における平衡（部分平衡）を仮定して、地下水成分の変化、物質の移行を考える。

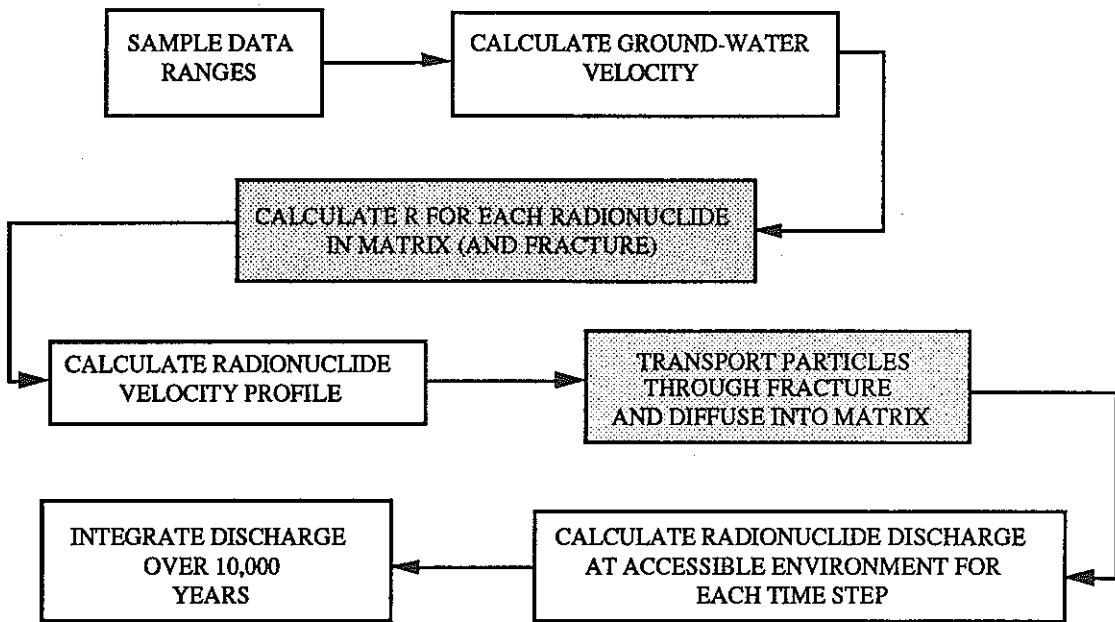
このような研究は、鉱床で計測される地下水成分の組成、および生成鉱物とシミュレーション結果を比較することにより検証がなされており、地上の地熱では、平衡論を用いた解析で十分現象が表現されると考えられている。したがって、このような地下水一岩相互間のシミュレーションに関しては余り課題は多くない。しかし、厳密な議論するまでにはまだ至っておらず、大まかな傾向を矛盾無く説明できるという程度である。つまり、細かい鉱物の違いなどは考慮できないのが現状と言える。

日本の地熱層では、200 °C以上であれば化学平衡が成り立つことが確認されているが、150 °C以下であると反応速度により平衡か成り立つかどうかは不明である。したがって、化学平衡の成立は、周囲の温度条件に大きく影響される。なお、化学平衡が成り立つと仮定し、温度と塩素濃度などの陽イオン濃度がわかると、周りの岩による地下水のpHと塩濃度を決めることが可能となる。

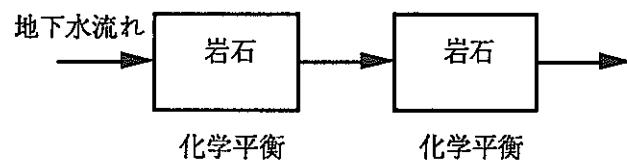
地熱分野の研究の特色としては、地表で採取される地下水（温泉水）の温度と地中での温度が異なるために、温度変化による化学種組成の計算が必要なことである。まず、採取された地下水のpHを用いて、そのpH測定温度で熱水の化学分析値をそれぞれの化学種に振り分ける計算を行ない（図一16），次に、pH測定温度におけるpHに関する保存量一定という制約を付け加えて、高温における化学種組成の計算を行なう（図一17）のが一般的である<sup>5)</sup>。

地下水一岩相互間のシミュレーションでは、玄武岩などの構成鉱物との反応をシミュレートすることにより变成岩の生成過程を検討することもなされている<sup>16)</sup>。

堆積岩に関する研究は、日本では少ないが、海底の堆積岩と海水の反応、あるいは地熱系での堆積岩と蒸発水との反応などに関する研究例は外国、特にニュージーランドに



図—1 4 性能評価計算の概略図<sup>3)</sup>



図—1 5 部分平衡モデル

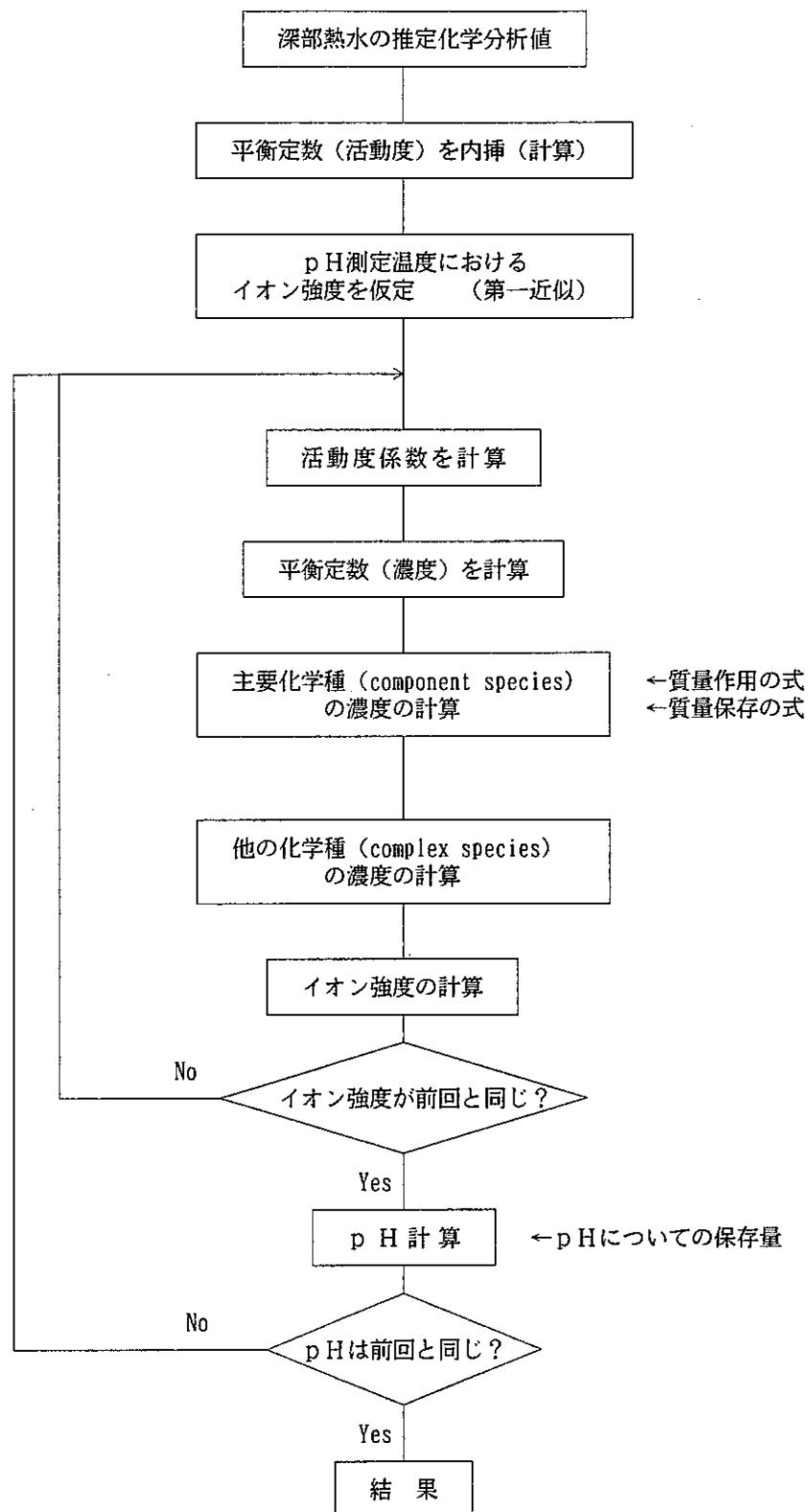


図-16 pH測定温度における化学種組成の計算フロー<sup>5)</sup>

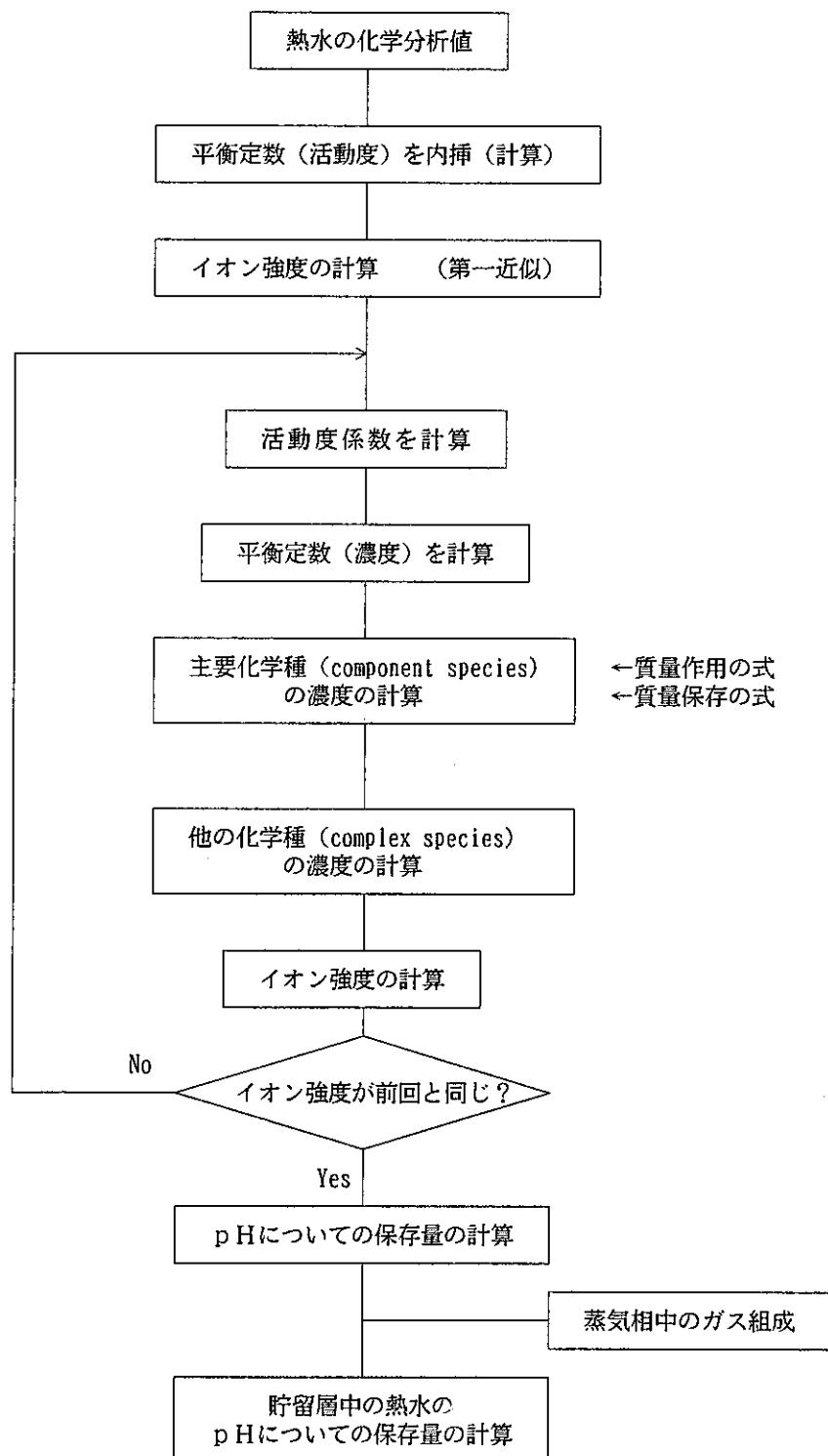


図-17 貯留層温度における热水の化学種組成の計算フロー<sup>5)</sup>

多い。また、日本の地熱では、地下でのboiling は起こっていないので、蒸気相内の反応は少なく、一相だけの評価で十分と考えられていれる。外国では、boiling のprocess に関するモデリングもなされている。

一方、亀裂などの不連続面を通って熱水が上昇し、海底熱水鉱床が生成する場合などは流速が速く化学平衡が仮定できない。そのような場合には、水の流れと化学速度論を連成させて考える必要がある。このような研究も最近の5 ~6 年でかなり進んできた研究である。この場合の化学反応としては、沈殿（他の種類の水と接する、ガスが抜けるなどの現象により生じる）と溶解があり、結晶が生じる時の反応である。溶解では、結晶表面の状態が影響を持ち、近年よく研究されている。このような研究では、準安定（metastable）な物質が生成するので、それがどういものか、その生成速度はどれくらいかを研究する必要がある。しかし、このような化学速度論と地下水流れを連成させたシミュレーションはまだなされていない。

### 3.2.2 地球化学シミュレーションコードの現状

まず、主な化学種計算コードおよび地下水一岩相互作用シミュレーションコードの概略を以下に述べる。

#### ①SOLVEQ :

沖縄トラフの計算で用いられたコードで、地熱流体の地表分析地を直接入力することで貯留層内における化学種組成を計算することができる。

#### ②EQ3/6 :

EQ3 が化学種組成を計算するコードで、EQ6 が岩石との反応を計算するコードである。EQ3 の新しいバージョンはEQ3NR という名称になっている。このコードは、廃棄物関係でも使用されている。

#### ③PHREEQUE :

100 °C以下の状況での化学種組成と岩石との化学反応を計算するコードである。

これらが、現在使用されている代表的な化学種計算コードであるが、これらも含め計算される化学種の数、言語等をまとめたものが表-28 である。化学種組成計算コードは、従来はミニ・コンピュータや汎用大型計算機で使用されていたが、小規模な化学種計算であれば、パーソナルコンピュータでも可能になってきている。

化学種組成計算コードで、放射性廃棄物処分関連でよく使用されるのは、PHREEQE, MINQUEL, EQ3/6である。後述するデータベースでも、これらのコードのフォーマットに合ったデータの取り出しが可能になっているものが多い。このうち、EQ3/6は複数のプログラムからなる総合地球化学シミュレーションコードとも言えるもので、水一岩相互作用の計算のほかデータベースも持つており、その充実のために、熱力学データを求める実験も行われている。このEQ3/6は、米国の放射性廃棄物処分プロジェクトのユカマウンテン、岩塩サイト、ハンフォードサイトの検討にも用いられており、ローレンス・リバモア国立研究所が中心となってコードの整備を行っている<sup>2)</sup>。表—29に、EQ3/6の構成を示す。

EQ3/6を用いての放射性廃棄物処分の地球化学プロセスの評価では、非平衡な現象は除外されている<sup>2)</sup>。また、溶解速度の式を導入してkineticな現象を表現しようとは試みられているが、その検証はなされていない。したがって、EQ3/6を用いた検討でも、地熱分野の研究と同様に部分平衡の考え方方が導入されており、現状では、化学平衡が成り立つものと考えられている。一般には、水溶液中の均一反応あるいは二次鉱物の沈殿反応の速度は、主要鉱物の非可逆的な溶解反応速度よりもかなり早いので、多くの水一岩相互作用反応を部分平衡であると考えても問題は少ないようである。このような状況では、物質移行速度と反応経路を主要鉱物の溶解速度を陽な形式で考慮することにより計算することができる。しかし、複数の鉱物の反応が起こる系では、鉱物の溶解の相対的な反応速度の変化を考慮できないので、部分平衡モデルでは誤った予測をする可能性もある<sup>6)</sup>。

また、現状の放射性廃棄物処分プロジェクトに関連した、上記のようなコードを用いた地球化学的検討では、浸透流解析コード等との連成がなされることはない。これは、連成解析の検証や結果の確認が非常に難しいのが現状であり、定性的な解析の域を出ないからである。それよりも現状の地球化学プロセスシミュレーションに関連する研究は、より信頼の置ける地球化学モデリング手法を確立し、それを実用レベルまで持っていくことに、精力が費やされている<sup>2)</sup>。

このような目標に対して残された問題としては、以下のような項目を挙げることができる。

- ①鉱物表面への吸着のような、現状レベルではメカニズムの同定が困難な現象のモデルの構築。

表一28

化学種組成計算プログラム<sup>5)</sup>

プログラム名	著者	計算させる化学種の数	言語・その他
SOLMNEQ	Kharka and Barnes (1973)	181	PL/1
WATEQ	Truesdell and Jones (1974)	105	PL/1,FORTRAN
ENTHALP	Truesdell and Singers (1971)	39	PL/1
EQ3/6	Wolery (1979)	140	FORTRAN new version あり
WATCH	Arnorsson et al. (1982)	69	FORTRAN
SOLVEQ	Read and Spycher	142	FORTRAN
GEOCAL	(1984)		
DELTA	Glover (1982)	15	HP calculate language
SIMPLE	Chiba (1985)	46	BASIC

表一29

EQ3/6 の構成<sup>2)</sup>

コード名	内 容
EQ3NR	Spaciation-solubility code (Wolery, 1983)
EQ6	Reaction-path code (Wolery, 1978; Wolery, 1987)
MCRT	Thermodynamic data processing code (Wolery et al, 1987)
EQLIB	Supporting code library
DATA0	the EQ3/6 main data file
MDAS	the MCRT master data file
	Special data bases to support the use of Pitzer's equations
	Various data base manipulation codes and preprocessors

②想定されるような条件全てに対して、適用が可能となるような活量係数のモデルの構築。

③データベースの充実、特に処分に関して検討が必要と思われる条件でのデータの充実。

### 3.2.3 放射性廃棄物処分での地球化学プロセス研究の現状

現在の放射性廃棄物処分に関する地球化学プロセスの評価では、溶解限度、熱力学データ、吸着／遅延データ、コロイド・有機物・バクテリアの影響、塩分および高イオン強度の影響について多く研究されている。いずれについても安全評価上、重要な化学種の同定がまず必要である。特に、準安定な物質については、あまり多くの研究例がないのが現状であり、データの蓄積が重要な課題と言える。

以下、各項目について述べる。

#### (1) 溶解限度

処分場から漏洩する核種の量とその地中での移行は、その核種の溶解性に制限されるが、これらの溶解性は、熱力学的データと地下水の化学的条件によって予測される。特に、酸化還元反応、Eh、塩分濃度、pHや地下水の水質を明確にすることが必要である。また、溶解度に関しては、実験によってかなり値がバラつくことがあるが、これは異なる固相を用いたりするために起こることもある（実験で用いられた鉱物の状況を詳細に調べると、かなり異なる場合がある）。また、異なるpHでの測定途中で、固相の状態が変化することもあり、そのためには溶解の仕方が著しく変化する場合もある。したがって、溶解限度の測定にあたっては、その固相の状況を良く把握して検討することが重要と言える<sup>11)</sup>。

U, Np, Pu, Th, Tcに関する溶解性のモデルとデータベースに関する総括的なレポートが、Lamire and Garisto<sup>12)</sup>によって発刊されたが、当該地点に対するさらなる重点的な調査が、その適用にあたっては必要である。

#### (2) 熱力学データ

熱力学データに関しては、核種に関するデータが最も重要であり、その誤差は、岩盤を構成する鉱物のデータベースの誤差よりも、処分施設の安全評価上大きな影響を

持っている。しかし、Key となる核種に関するデータベースで、衆目が認めるものは少ないので現状である。また、化学反応の過程で生成される化学種を無視したものが多いので、その適用に当たっては、どのプロセスでの現象であるかの判断も重要である。

熱力学データは通常、Gibbs 生成エネルギー、生成エンタルピー、エントロピーおよび熱容量の値が、金属の炭酸塩及び水酸錯体などの固体や液体物質別に整理される。これらのデータは、平衡状態を仮定したものであり、反応速度論的な取り扱い（非平衡モデル）に必要な反応速度定数に関するデータを収集した例は少ない。また、データの偏差に関しても整理されることも多いが、これは厳密な数学的なものではなく、保守的な予測のためになされるものである。

### (3) 吸着／遅延係数データ

$K_d$  値に関する研究は非常に多いが、簡単なバッチ試験は、平衡を意識した試験であり、かつ粉状材料で試験したものである。よって、粉状の試験であることから、実際と異なる比表面積の状態の試験となっており、これは補正することも難しい。また、試験条件により、かなり幅のある値となるので、同一条件で試験して値を検証することが必要である。

表一30は、ロスアラモス国立研究所が凝灰岩吸着データベースシステムを作成したときの変数リストである。このように、試験条件、サンプル条件を明確にすることが、その利用にあたっては重要となる。したがって、バッチ試験結果の適用性を確かめるために、あるいは微小空隙からなる岩体中の吸着特性を確かめるためにもdynamicな手法が必要である。これは、長期のバッチ試験結果と一致するものである。さらに、実験は処分場からの距離に伴う、地質構造の不均一性、化学的パラメータ（pH、酸化還元電位、核種濃度）の変化に対しても行なう必要がある。そして、最終的な性能評価のために、全体的な吸着パラメータを統合する必要があるが、そのためには、実験室での研究と原位置での研究を総括して、吸着データと核種移行経路の化学的不均一性をモデル化することが必要である。

吸着に関する地球化学プロセスのモデルでは、鉱物表面に関する研究はあまり進んでおらず、陽イオン交換反応モデルでも、交換反応を表す様々な化学反応に関してのモデル化は行なわずに、交換反応の分配のみで固相と液相のイオン濃度をモデル化し

表—3 0 収着データの変数<sup>3)</sup>

- 
1. Sample Number (e.g., GI-1294)
  2. Element
  3. Batch sorption average
  4. Number of replications for sorption average
  5. Standard deviation of average
  6. Contact time for sorption experiment
  7. Highest pH measured in experiment
  8. Temperature
  9. Batch desorption average
  10. Number of replications
  11. Standard deviation of average
  12. Contact time for desorption experiment
  13. Tracer feed concentration (molar)
  14. Upper particle mesh size
  15. Lower particle mesh size
  16. Lowest pH measured in experiment
  17. Ground-water type (e.g., J-13, G-1, etc.)
  18. Atmospheric conditions (anoxic, oxic, or other)
  19. Solution to solid ratio (volume:mass)
  20. Shaking position (horizontal or vertical)
  21. Rock formation name
  22. Rock formation symbol (e.g., Tpt)
  23. Drill hole number (e.g., J-13)
  24. Sorption category (defined by internal documentation)
  25. Depth interval (ft)
  26. Sorption interval (defined for transport modeling purposes)
  27. Saturation (unsaturated or saturated zone)
  28. Cation exchange capacity of sample (3 methods)
  29. Surface area of sample
  30. Surface site densities
  31. Site-binding constant (calculated value)
  - 32-34. Sources for all data included database
-

て計算しているのが現状である<sup>8)</sup>。

#### (4) コロイド・有機物・バクテリア

自然有機物による核種の錯体に関しては、二三の明確なものに対してモデル化がなされている。また、自然有機物に加えて、処分場中で新たな有機物が生成する可能性もある。これは、特に低レベル放射性廃棄物に多量の有機物が含まれている場合に問題とされる。しかし、一般には、コロイドの成長速度に関するkineticな情報が少なく、反応化学種自体もよくわかっていない。

このような、コロイドと錯体に関しては、通称COCO clubと呼ばれるCECのワーキンググループが、自然のコロイドと有機炭素の特性を種々の面から調査している。COCO clubでは、コロイドに関する二つの原位置（英国とスイス）でのサンプリングの比較を行うとともに、二つの地下水中の有機物の特性の比較を実験室レベルで行なっている。また、NAGRAやSKBが中心となったmicrobiology in nuclear waste disposal (MIND)に関する研究グループもある<sup>9)</sup>。

一般にコロイド放出シナリオは図一18の様に考えられている<sup>3)</sup>。

- ①溶解した放射性核種は、廃棄物から放出され、埋め戻し材を通じて周囲に拡散する。
- ②自然コロイドが流れしており、放射性核種を吸着できる状態にある。
- ③放射性核種は自然コロイドに吸着し、疑似コロイドを形成する。
- ④過飽和が原因で、埋め戻し材の外部に放射性核種が沈殿する。
- ⑤コロイド粒子の一部は割れ目壁に保持される。または
- ⑥コロイド粒子が流体の流れにより、割れ目を通じてアクセス可能な環境にある岩石へと移行する。

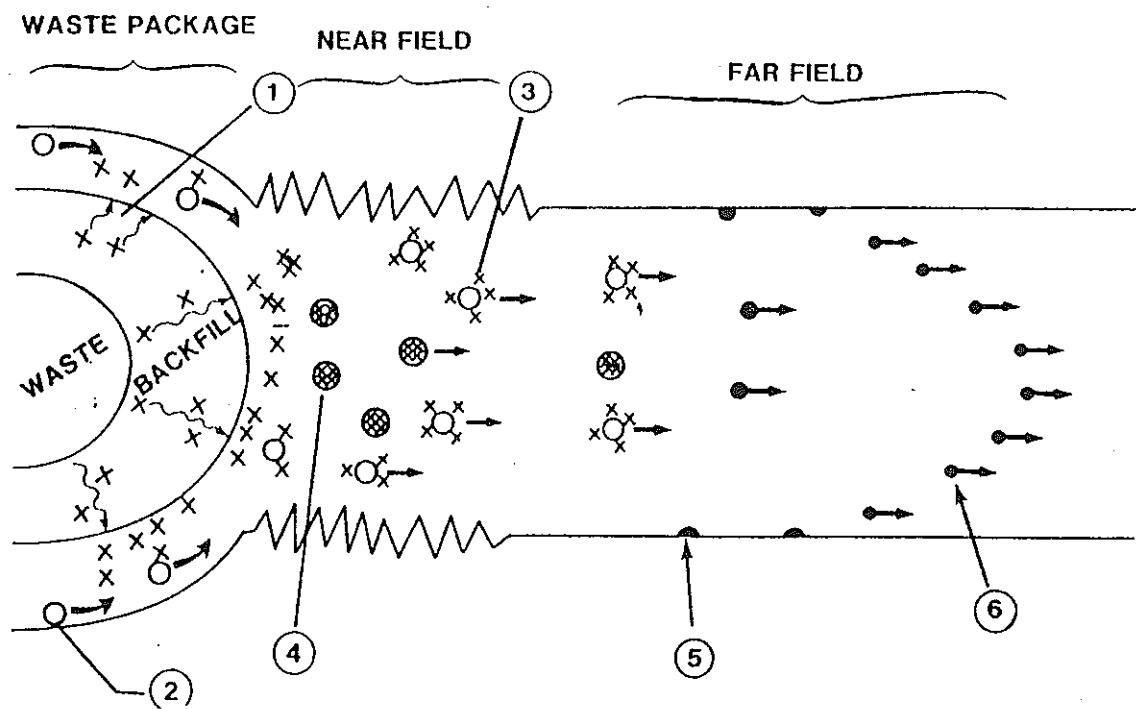
以上のようなシナリオに関して、次の3つの課題が重点的に研究されている。

##### a) 単一割れ目中のコロイドと粒子の移行及び保持

コロイド粒子の捕獲は、壁面に垂直な流速と割れ目内の平均的な流速によって決まる。壁面に垂直な流速は、コロイド半径とそれにかかる外力（重力、London-Van der Waals力、電気二重層力）の総計によって定まる。

##### b) 地下水中の自然コロイドによる放射性核種の吸着

放射性核種に対する単分散疑似コロイド浮遊物の吸着能力の計算には、単



図一18 コロイド放出シナリオ<sup>3)</sup>

純な外部表面吸着計算と粘土鉱物の陽イオン交換能 (CEC) の検討によってなされる。

c) 均一核形成による放射性核種の生成

流出率、温度または流体組成の変化により、放射性核種の含んだ土壤層で地下水が局部的な過飽和を起こした場合に、沈殿によるコロイド生成が生じる。

(5) 塩分および高イオン強度の影響<sup>9)</sup>

この問題に関しては、カナダ、ヨーロッパそしてスカンジナビアの結晶質岩中に高濃度の塩水が発見されてから、その化学的モデル及びデータの取得が行なわれるようになった。種々の研究結果によると、イオン強度の増加が  $\text{UO}_2$  の溶解性に与える影響は25°Cでは大きくないことがわかっているが、この結果をより高い温度の場合に補間するには非常に多くの不確実性がある。これは、25°C以外の温度でのデータが少ないと、核種生成に関するデータが少ないためである。もし、高濃度の塩分が吸着現象を著しく減少させるのであれば、核種の移行量にも大きな影響を与えることになる。

### 3.2.4 CHEMBALプロジェクト<sup>10)</sup>

同プロジェクトは、CEC MIRAGE2 プログラムの一環として行なわれたもので、一応、90年4月にその3年間の活動を終了している。このプロジェクトは、地球化学モデルの検証と確証に関するものであり、モデリングと熱力学データベースのレビューの二つの項目に対して次の4つのステージから構成されている。

①ステージ1：化学平衡モデルの検証

②ステージ2：実験室及び原位置試験データの比較による化学種組成計算モデルの確証の試み

③ステージ3：連成解析モデルの検証

④ステージ4：連成解析モデルの確証

以下に各ステージの内容について概説する。

#### (1) ステージ1、2

ステージ 1 では、現実的ではあるが架空のケースの問題を、 5 つの異なるモデルシステムに基づき、全部で 28 のテストケースについて参加者が各自のコードを用いて解析を行なった。その結果、個々のモデルの機能については欠点はあるものの、重大なバグは見いだされなかった。

一方、ステージ 2 では 4 つの実際の原位置試験や実験室での結果を基に、19 のケースについてシミュレートが行なわれた。選択された 4 つのテストサイトは、Mol , Gorleben, Maxey Flats , Oman である。ステージ 2 では確証の定義を以下のように定めた。「モデルが実験室あるいは原位置試験での観察結果を正確に反映していることを、定量的あるいは定性的に証明すること (qualitative or quantitative evidence that the models accurately reflect laboratory or field observation)」。このような定義のもとに、4 つのサイトのうち 3 つについて次のような項目について確証がなされた。

- ①Mol : 合成した粘土中の水におけるアクチノイドの溶解性
- ②Gorleben : アメリシウムの溶解性と EDTA とクエン酸塩によるアクチノイドの錯体形成
- ③MaxeyFlates : 鉄の溶解性と制御された酸化状態での pH の変化

しかし、これらの確証は全て実験室での研究に対するものであり、原位置試験の状態までは確証できなかった。

## (2) ステージ 3 , 4

6 つのプログラムがステージ 3 では用いられた。そのうち、3 つは直接連成モデルであり、反応項が移行方程式中に組み込まれている。残りの 3 つは、順次繰り返しモデルであり、化学種組成計算と移行問題との間で繰り返し計算が行なわれる。検討にあたっては、まず、化学平衡と水理学的な移行問題に分けてテストが行なわれた。それに引き続いて、連成問題が取り上げられた。連成問題は、セメント溶解、ベントナイト粘土の変質、珪土質滯水層中への水酸化ナトリウムの注入の 3 つである。いずれのケースにおいても大体満足できる検証がなされた。

ステージ 4 では、

- ①海緑石質の Mol 砂を通るネプトニウムの移行
- ②Fontainebleau 砂の加熱と酸性化

の 2 つのカラム試験が対象となった。あまり多くの結果は得られなかつたが、3 つの組織がこの連成問題をうまく再現することができた。

### 3.3 地球化学データベースの現状と動向

熱力学データは、地球化学プロセスシミュレーションにおいて必要なものであり、先述のように、そのデータがシミュレーション結果に最も重要な影響を与える。したがって、熱力学データに関するデータベースの構築は、地球化学プロセスシミュレーションにとって非常に重要な意味を持っている。現存するデータベースに関するレビューがNEAとIAEAによってなされているが、これらのレビューは、既往あるいは非常に古いデータに関するものである。これは、新しい有用な熱力学データを提供する実験が余り行なわれていないことを示している。その原因是、地下水中のある核種に対する直接測定が難しいために、不確実性が多くなることがあると考えられる。これに関しては、CECがMIRAGEプロジェクトを通して引き続き、熱力学的データの作成を行なっている<sup>9)</sup>。

一般的に熱力学データの収集は、ギブスの自由エネルギー、標準エンタルピー、標準エントロピー、定圧比熱に対して各化学種について行われる。このようなデータは、通常、限られた条件での値が収集される。例えば、NEAが作成したデータベース、CODATAでは298.15K, 105Pa そしてゼロイオン強度のものについて収集されている<sup>10)</sup>。近年の傾向としては、これらのデータの収集をSI単位で行うことが多い。しかし、これらの値は、温度とともに変化するので、温度の関数の経験式もその適用温度範囲と共に記載することもCODATAでは行われている。また、EQ3/6 関連のプロジェクトでは、温度のみならず、処分で予想されるイオン及び酸化状態でのデータの変化も実験されている<sup>11)</sup>。熱力学データは温度が低い(200 °C以下)ほど正確であるが、温度が低い場合には、その地点において平衡が成り立つかどうかは分からないので、精度の高いデータを用いても平衡を仮定した地球化学プロセスシミュレーションの有効性が低くなる可能性もある。

データベースでは、イオン強度ゼロの情報が収集される場合が多く、その場合には、あるイオン強度で測定された実験結果を補正する必要がある。その際に、活量係数が用いられるのであるが、活量係数自体の推定にも不確定な要素がある。さらに、固相の溶解のデータベースでは、表-3-1に示すように理想的なモル混合が仮定されていることが多い。しかし、低い温度(300 °C以下)では、鉱物が平衡に到達する時間は非常に遅いので、通常は準安定な状態であり厳密な意味では、データベースの使用及び平衡を仮定したシミュレーションは妥当ではない。EQ3/6 関連のプロジェクトでは、このような状況を打破するために、kinetic な水一岩相互作用のモデルへの拡張も試みられている<sup>2)</sup>。

熱力学データで重要なことは、エントロピー、自由エネルギーなどの測定結果に矛盾がな

いことである。このためには、多くのデータを集めて矛盾のないように最小二乗法などを用いて求めることが必要である。また、同一条件での実験でもその結果がかなり異なることがあるのは、化学種の計測手法の差にもあるようである。ある実験では、分光分析器で測定したが、ある実験では、データから推定した場合もある。しかし、現存するデータベースで、内部矛盾および測定誤差を全て削除したようなものはないのが現状である。

表—32は、アメリシウム(III)のformation constantを、種々の実験から内部矛盾のないように同定した結果である<sup>7)</sup>。このように、結局は特定の核種に対して、研究者が独自で再吟味しているのが現状とも言える。また、SUPCRTと言うコードは、鉱物のデータベースで、溶解度や熱力学データを計算するものであるが、そのデータベースに収録されている鉱物は当然限定さており、それ以外は実験例などから引用するしかない。日本では、そのような鉱物に関する基本的データを収集するような実験をしている研究者は少ない。これは、日本においては、分析化学から地球化学に入った人がほとんどで、地質の鉱物学から入った人が少ないと想される。

以上のように、他の機関が作成した地球化学データベースの使用にあたっては、極めて慎重を要するのが現状のように思われる。また、地球化学モデルの確証という面から考えても、他の条件、他の固相、液相での実験結果から作成されたデータベースの使用は、結果の定性的傾向の妥当性の検討には役立つであろうが、定量的な検討は難しいものと思われる。

ところで、データベースのもう一つの機能として、データベースから各地球化学プロセスシミュレーションコードへのフォーマット変換をする機能もかなり充実されている。近年では、温度と圧力の関数、温度と溶液成分、圧力と溶液成分、温度と酸素フガシテー、圧力とある成分の活量、温度とある成分の活量、異なる二つの成分の活量などの関係を計算し、それをダイアグラムに表示するソフトの開発も進められており<sup>12)</sup>、データを理解しやすく整理する工夫もなされている。

表—3 1 EQ 3 / 6 の固相溶解モデル<sup>13)</sup>

Name	ENDMEMBER	SOLUTION MODEL	
(Na,K)-sanidine	sanidine high	albite high	Ideal
biotite	phlogopite	annite	ideal
	pd-oxyabute		
saponitite-tri ( trioctahedral)	saponite-Ca	saponite-H	ideal
	saponite-K	saponite-Na	
	saponite-Mg		
smectite-di	beidellit-Ca	beidellit-K	ideal
	beidellit-Mg	beidellit-Na	
	nontronit-Ca	nontronit-K	
	nontronit-Mg	nontronit-Na	
	montmor-Ca	montmor-K	
	montmor-Mg	montmor-Na	
olivine	fayalite	forsterite	regular
orthopyroxene	ferrosilite	enstatite	ideal
plagioclase	albite high	anorthite	ideal
carbonate-calcite	calcite	magnesite	ideal
	rhodochrosite	siderite	
	smithsonite	SrCO <sub>3</sub> -cal	
epidote-ss	epidote	clinozoisite	ideal
mordenite-ss	mordenite-Na	mordenite-K	ideal
	mordenite-Ca		
phillipsite-ss	phillipsite-K	phillipsite-Ca	ideal
	phillipsite-Na		
stilbite-ss	stilbite-Ca	stilbite-K	ideal
	stilbite-Na		
garnet-ss	andradite	grossular	ideal site-mixing
chlorite-ss	clinochl-14a	daphnite-14a	ideal
dachiardite-ss	dachiardite-K	dachiardite-Ca	ideal
	dachiardite-Na		

表—3 2 ゼロイオン強度におけるアリシウム(III) の Formation Constants<sup>7)</sup>

Reaction	log K
Am <sup>3+</sup> + OH <sup>-</sup> = AmOH <sup>2+</sup>	7.41
Am <sup>3+</sup> + 2OH <sup>-</sup> = Am(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	≤ 12.00
Am <sup>3+</sup> + 3OH <sup>-</sup> = Am(OH) <sub>3</sub> <sup>°</sup>	18.20
Am <sup>3+</sup> + 3OH <sup>-</sup> = Am(OH) <sub>3</sub> <sup>(c)</sup>	26.60
Am <sup>3+</sup> + 3OH <sup>-</sup> = Am(OH) <sub>3</sub> <sup>(am)</sup>	25.10
Am <sup>3+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> = AmCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	8.26
Am <sup>3+</sup> + 2CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> = Am(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	13.30
Am <sup>3+</sup> + 3CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> = Am(CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> <sup>3-</sup>	14.95
Am <sup>3+</sup> + OH <sup>-</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> = AmOHCO <sub>3</sub> <sup>(c)</sup>	22.60

### 3.4 連成モデル研究の現状と動向

化学反応と物質移行の連成問題は、化学的平衡条件あるいは反応速度論および移流拡散方程式で表される質量保存則で表される。

物質移行問題における化学反応を分類すると、図-19のようになる<sup>15)</sup>。

レベルAでは、反応速度が他の濃度を変化させる過程よりもはるかに速く、可逆的な変化を示すものと、反応速度が余り速くなく局所的な平衡条件が成り立たないものに分けられている。反応速度が速く可逆的であるものは、考えている系ではいつでも局所的な化学平衡が成り立っていると仮定できる。レベルBでは、均一反応（一つの相での反応）と不均一反応（複数の相での反応）に分けられる。そしてレベルCでは、表面反応（吸着やイオン交換反応）と古典的な化学反応（沈殿、溶解、酸化還元、錯体形成）に分けることができる。このような分類によって分けられた6つのクラスは、それぞれ数学的な定式化が可能であり、解くことができる。

レベルAの局所的な平衡が成り立つカテゴリで、従来より多く用いられているモデルは、closed systemと呼ばれるものである。これは、固相から溶解沈殿した物質が各反応段階で、系内で再び平衡状態になることを仮定し、系外からの物質の出入りがない。一方、地熱の問題で多く用いられている部分平衡の仮定では、各反応段階で固相から溶解沈殿した物質のある量が系内から取り除かれ、流体とは再び反応しないというモデルで検討されることがある。このような系は、open systemと呼ばれる。レベルAで非平衡状態に分類され、速度論を用いた取り扱いは現状では難しいので、このようなopen systemと呼ばれるモデルでより現実に近い反応経路モデルを検討している。EQ3/6関連のプロジェクトでは、より現実的なシミュレーションを行なうために、固相からの溶解・沈殿反応のモデルで、理想的な反応ではなく、固相の成分の変化を考慮したモデルを用いての検討までできるようコードを拡張することがなされている<sup>13)</sup>。

このようなopen systemを流体、物質、熱の移行のオイラー的な記述と連成させて、解く手法が現状では最も現実に近いモデルと思われる。このような取り扱いでは、流体、物質、熱の質量保存則の内、空隙率を次のように書く。

$$\theta = \frac{V^{\text{rev}} - \sum_i V_i n_i}{V^{\text{rev}}} \quad (3-1)$$

ここで、 $n_i$  は  $i$  番目の固相鉱物のモル数である。 $V_i$  と  $V^{\text{rev}}$  は、 $i$  番目の相とREV（代表的要素体積）の体積である。これを時間に関して微分すると次のように書ける。

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\sum_i V_i n_i}{(V^{\text{rev}})^2} \left[ \frac{\partial V^{\text{rev}} \partial P}{\partial V_i \partial P} + \frac{\partial V^{\text{rev}} \partial T}{\partial V_i \partial T} + \dots \right] - \sum_i \frac{n_i}{V^{\text{rev}}} \left[ \frac{\partial P \partial \tau}{\partial V_i \partial \tau} + \frac{\partial T \partial \tau}{\partial V_i \partial \tau} + \dots \right] - \sum_i \frac{V_i \partial n_i}{V^{\text{rev}} \partial \tau} \quad (3-2)$$

ここで、右辺の第一項は、REV 自身の変化をあらわし、第二項は、各相の体積変化をあらわしている。そして、第三項が鉱物のモル数の変化をあらわしている。この式は、多くの場合、最終項のみに簡略化されて用いられる。このようにして、鉱物のモル数の変化を考慮した連続式と、各相の質量作用式と質量保存則を連立して解く<sup>14)</sup>。ここでの大きな仮定は、流体や物質、熱の移行を時間差分で解く時間間隔の間に、反応が平衡に到達することである。

これについては、間隙率0.2 の多孔質媒体で温度100 °Cでのマイクロクリンと石英の反応を流速1m/year, 分散係数 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{sec}$  の場で計算したところ、約 $5 \times 10^5 \text{ sec}$ で平衡状態に達した。また、ギブサイトや白雲母などの二次鉱物の反応もしばらくの時間の後、平衡状態に到達したという報告<sup>8)</sup>がある。また、時間が十分経過した場合には、鉱物の体積が、空隙率や透水性および反応鉱物の表面積に影響を与えるほど変化する場合がある。表面積が減少し、したがって、鉱物の溶解速度が減少する場合には、そこには既に二次鉱物が沈殿しており、新たな流れのパス上で鉱物の溶解が開始される。このような二次鉱物との反応も考慮して、複数の反応経路の発生を時間と共にシミュレーションする手法も考えられている<sup>8)</sup>。しかし、これらの計算はコストが高価であり、また基本的な熱化学データの不足、収着に関するデータの不足から、性能評価に用いることは現状では考慮されていない<sup>3)</sup>。

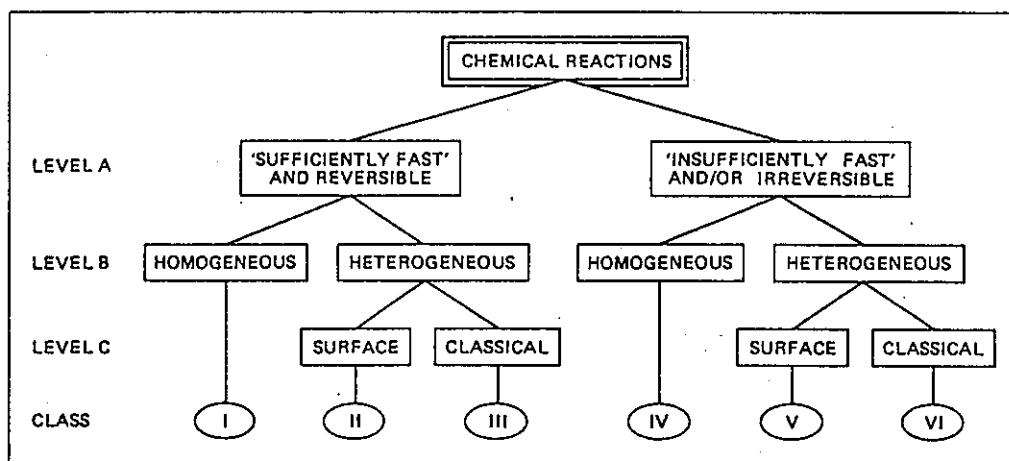
なお、不安定な収着性物質Aが移行中に収着しにくい物質Bに変化する場合（図-21 参照）などは、収着性物質Aが放出されるとして予測した場合よりも、多くの核種が移行することは確実であり、そのような場合にはそのような種生成の変換、沈殿、コロイド形成などの反応による生成を考慮した移行問題を検討することが重要となる。

図-19のレベルAで区分される化学平衡が成り立つ条件での解析は、closedあるいはopen system でも計算することができるが、反応によっては、処分の検討対象期間中では平衡に達しない可能性もある。中には、平衡で議論できるのは100 万年後ぐらいの現象もあるので、そのような地球化学モデルと物質移行問題のカップリングは、物質移行で議論

する時間帯と地球化学モデルで議論する時間帯が全く異なるのが現状であり、その解釈は難しく感度解析ぐらいにしか利用できない可能性もある（図-21参照）。したがって、化学平衡が成り立たない条件での地下水流れとの連成モデルが重要となってくるが、現状ではそのような研究は非常に少ない。その理由としては、

- ①データが無い。
- ②モデルの選択が難しい（多成分からなり、それぞれが影響を持っている）。
- ③Validationが難しい（反応それぞれのprocessを同定することが難しい）。
- ④数値計算の精度では、微妙な現象を捉えられない可能性もある。

が考えられる。よって現状では、拡散、流動、反応速度の3つを組み合わせることは難しいのが現状である。また、validationが難しいために、平衡論との差異も明らかにすることも難しい。しかし、conservativeと言った意味では、平衡状態の方が反応が進んだ状態であり、非平衡の方が危険側になる。もし、非平衡解析を行なうのであれば化学種を影響の大きいものに絞り、その数を減らしてから行なうべきであろう。



図一 9

物質移行問題での化学反応の分類<sup>[15]</sup>

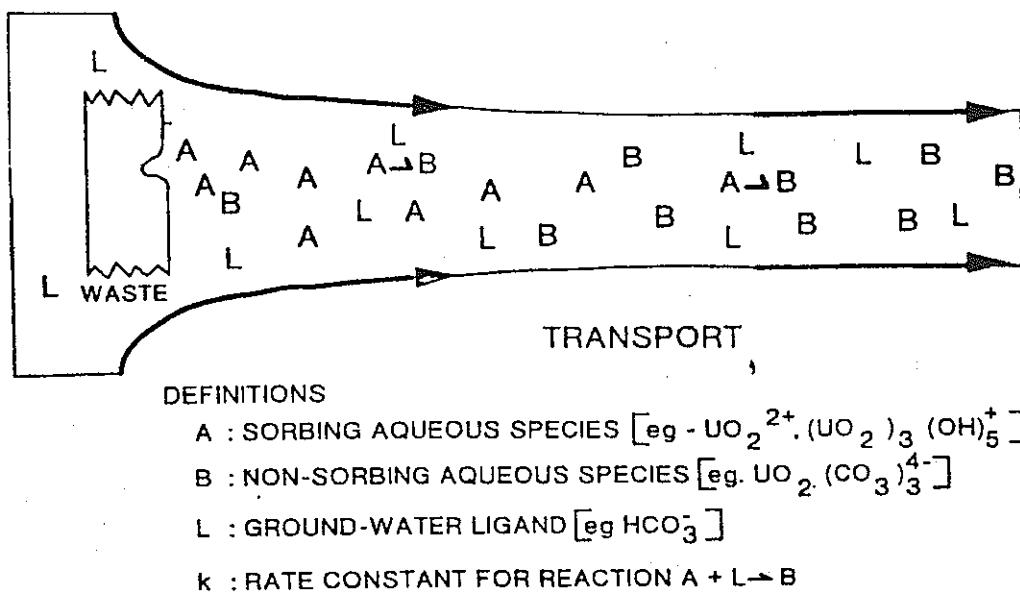


図-20

地球化学感度解析のシナリオ<sup>3)</sup>

(\*) Aは収着実験で研究された仮想的な収着種。

他の種Bの生成に対する放射性核種の放出の感度が検討される。

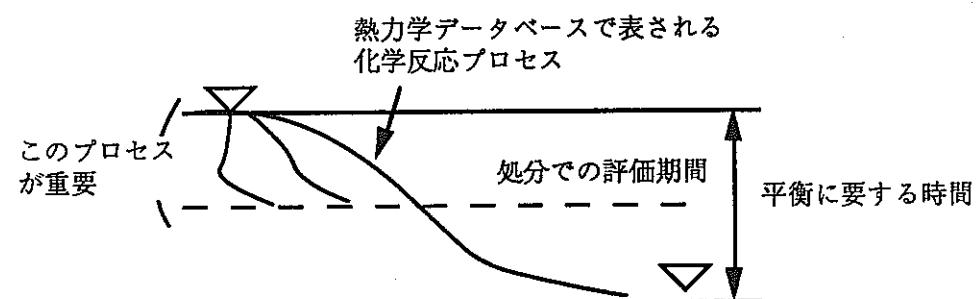


図-21

平衡を仮定した熱力学データベースで表される化学反応プロセスと  
処分の安全評価の期間

### 3.5 まとめ

本章では、放射性核種の地層中での移行予測手法における、地球化学プロセスシミュレーション技術の導入の可能性を検討するために、関連研究の現状や動向について調査検討を行った。

この結果によれば、地球化学プロセス研究の多くの成果は、地熱分野、地質分野からのものが多く、それらの分野では、鉱物間、鉱物一流体間、流体内の化学反応の熱力学的取り扱い、鉱物の結晶化学、各成分の物理化学状態など、個々の研究ではかなり詳細なレベルまで進んでいることがわかった。しかしながら、放射性廃棄物処分の分野にその成果を応用しようとする場合には、基本的に不足しているデータや検討項目が多数あるのが現状である。これは、対象とする現象や物質が異なるので無理のないところもあるが、放射性廃棄物処分に関する現象の解明や予測等に、地熱や地質の分野にてとられた研究経過と同様あるいは類似の経過が取られれば、多大な成果を収めることが期待出来る。

その場合、化学平衡や部分平衡の仮定を設けるかどうかは、検討対象とその目的に大きく依存しており、経済性や信頼性などの面からバランスの取れた判断を行うことが重要となる。また、地球化学的アプローチが放射性廃棄物処分の分野において、重要な評価手法として確立するには、関連データの蓄積と実績の積み重ね重要なとなる。

## あとがき

本調査研究の最終年度にあたる本年度は、高度基盤技術に関する技術や研究のうち、昨年度までの成果を踏まえて次にあげる技術や研究を選び、その現状や将来性などについて調査検討を行った。

- ①化学的シミュレーションに関する研究や技術
- ②人工知能に関する研究や技術
- ③地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する研究や技術

調査検討の結果は本編に記したとおりであるが、それぞれの結果の要点をまとめると次のようにになる。

- ①化学的シミュレーションに関しては、その基礎となるデータベースの整備が重要である。また手法については、理論的な手法に基づくものと、データを利用するものの、2つに大別されるが、そのいずれもコンピュータ能力の向上とともにさらに進展することが期待される。
- ②人工知能に関しては、従来からの推論や制御などに関連した理論の他にファジィ理論を加味したシステムや、脳の神経回路を模擬したニューロ技術を盛り込んだシステムなどが開発されるようになった。その応用システムについては、幅広い分野において多いに利用されている。
- ③地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路については、地球化学プロセス研究と位置付けて関連研究や技術について調査検討した。その結果、地熱や地質分野において研究が進んではいるものの、放射性廃棄物の分野に適用するには、熱力学データの不足が課題であるとの示唆を得た。

昨年度までの調査にて明らかかなように、高度基盤技術と位置付けられる技術は多種多様であり、その進展具合もまた多種多様である。したがって、放射性廃棄物の処分を考える上でも、これらの技術の進展度合いなどを常に注視しつつ、より安全性が高く、より経済性の高い処分方式などを開発する姿勢は重要であろう。

## 謝　　辞

本調査研究は、(株)三菱総合研究所、並びに(株)間組殿のご協力により遂行することが出来ました。ここに、あらためて御礼申し上げます。

また、本調査研究の進め方、成果のまとめ方について貴重な御助言、ご指導を頂いた、動力炉・核燃料開発事業団環境技術推進本部処分研究グループ大沢正秀副主幹、並びに棚井憲治殿に感謝の意を表します。

## 参考文献

### 1. 化学的シミュレーションの調査

- 1) 山本良一(編), マテリアルデザイン:丸善(1988)
- 2) 日本物理学会(編), 計算物理学:培風館(1991)
- 3) 平野徹, 人工知能による材料設計:材料科学, vol. 26, No. 5, p. 216 (1989)
- 4) 福村晃夫, 人工知能の現状と展望:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 398 (1988)
- 5) 堀内敬之, 人工知能のための推論エンジン:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 408 (1988)
- 6) 大須賀節雄, 推論エンジンは化学にどう使われるか:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 406 (1988)
- 7) 根岸正光, データベースの人工知能的アクセス:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 410 (1988)
- 8) 吉田元二・高橋由雅, 分子設計は人工知能化できるか?:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 412 (1988)
- 9) 田辺和俊・船津公人, 合成設計は人工知能化できるか?:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 416 (1988)
- 10) 大沢英二・尾崎茂, 分子計算と人工知能:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 420 (1988)
- 11) 塙島亮男, ガラスの材料設計とエキスパートシステム:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 424 (1988)
- 12) 鬼頭繁治・服部忠, 触媒設計とエキスパートシステム:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 426 (1988)
- 13) 郷信広, タンパク質立体構造予測への人工知能的アプローチ:化学と工業,  
vol. 41, No. 5, p. 428 (1988)
- 14) 斎藤正男, 人工知能と脳:化学と工業, vol. 41, No. 5, p. 431 (1988)
- 15) 鈴木涉, 化学研究分野におけるコンピューターおよびソフトウェアの状況:  
化学と工業, vol. 41, No. 5, p. 435 (1988)

- 16) 山崎聡, 化学系データベース—現状と将来ー：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 690 (1989)
- 17) 江里口恭子, JOISとJOIS-Fで化学関連情報を探す：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 695 (1989)
- 18) 遠竹俊郎, 参照文献の検索—Science Citation Index の利用ー：  
化学と工業, vol. 42, No. 4, p. 699 (1989)
- 19) 工藤喜弘, 化合物構造検索の新しいアプローチ：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 703 (1989)
- 20) 早水紀久子, スペクトルデータベースと利用法：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 707 (1989)
- 21) 藤原謙, 高分子材料物性データベースとその利用法：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 709 (1989)
- 22) 久保勝司・佐藤輝幸, ファインセラミックス材料物性データベースとその利用法：  
化学と工業, vol. 42, No. 4, p. 712 (1989)
- 23) 八尾徹, タンパク工学研究におけるデータベース・知識ベース：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 715 (1989)
- 24) 川末豊・酒井満, 医薬関連データベースとその利用法：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 718 (1989)
- 25) 明田耕一, 農薬データベースとその利用法：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 721 (1989)
- 26) 相川進, 化学系主要データベース一覧：化学と工業,  
vol. 42, No. 4, p. 729 (1989)
- 27) 吉田元二・善甫康成, コンピュータ支援 分子・材料設計の現状と展望：  
化学と工業, vol. 44, No. 5, p. 774 (1991)
- 28) 石黒正路, コンピュータ支援による医薬品設計：化学と工業,  
vol. 44, No. 5, p. 780 (1991)
- 29) 藤田稔夫・西村勁一郎, 農薬の分子設計研究におけるコンピュータ支援技術の  
応用：化学と工業, vol. 44, No. 5, p. 786
- 30) 中澄博行, 色素の分子設計：化学と工業, vol. 44, No. 5, p. 792
- 31) 中村春木・八尾徹, コンピュータ支援による人工タンパク質設計：

- 化学と工業, vol. 44, No. 5, p. 797 (1991)
- 32) 安部明廣・木村悟隆, 高分子の分子設計: 化学と工業,  
vol. 44, No. 5, p. 803 (1991)
- 33) 宮本明・乾智行, 固体触媒の視覚化と設計: 化学と工業,  
vol. 44, No. 5, p. 809 (1991)
- 34) 石田嘉明, 将来展望: デルファイ法アンケート調査から: 化学と工業,  
vol. 44, No. 5, p. 815 (1991)
- 35) 中西浩一郎, 計算機シミュレーションでみた水と水溶液の構造: 化学と工業,  
vol. 43, No. 9, p. 1451 (1990)
- 36) 河野武博, 化学プロセスの安全性評価: 化学と工業,  
vol. 44, No. 3, p. 354 (1991)
- 37) 平井純, 化学プラントの安全対策—プロセスの安全性評価について—:  
化学と工業, vol. 44, No. 3, p. 359 (1991)
- 38) 田中秀樹, 分子動力学による水の構造と集団運動の研究: 化学と工業,  
vol. 43, No. 2, p. 161 (1990)
- 39) 船津公人, 有機化学研究における高次情報処理と設計—合成設計システムの  
開発: 化学と工業, vol. 43, No. 2, p. 201 (1990)
- 40) 小関史朗, 有機ケイ素化合物の分子軌道計算: 化学と工業,  
vol. 43, No. 4, p. 619 (1990)
- 41) (社) 日本機械工業連合会・(財) 金属系材料研究開発センター, 金属系新素材  
開発における電算機支援システムに関する調査研究: (1990)
- 42) (社) 日本ファインセラミックス協会, 平成2年度無機新素材産業対策調査(材料  
別問題別調査研究) 委託調査研究報告書—ファインセラミックス(F C)の材料  
科学に関する調査—: (1991)
- 43) 上村洸, 計算理学とは: 数理科学, OCTOBER, No. 268, 5 (1985)
- 44) 佐藤勝彦・須藤靖, コンピューターで宇宙を創る: 数理科学,  
OCTOBER, No. 268, 7 (1985)
- 45) 中沢清, 計算機の中の『太陽系形成の歴史』: 数理科学,  
OCTOBER, No. 268, 13 (1985) (数理科学 No. 268 OCTOBER 1985)
- 46) 吉村宏和, 太陽のなかのグローバル対流と地場の中の数値シミュレーション:

数理科学, OCTOBER, No. 268, 19

- 47) 松野太郎, コンピューター・シミュレーションと現代気象学:  
数理科学, OCTOBER, No. 268, 31 (1985)
- 48) 塚田捷, 計算理学と物性物理: 数理科学, OCT, No. 268, 38 (1985)
- 49) 磯野克己, 遺伝学とコンピューター: 数理科学, OCT, No. 268, 45 (1985)
- 50) 和田昭充, コンピュータ分子生物物理: 数理科学, OCT, No. 268, 50 (1985)
- 51) 柏木浩・諸熊奎治, コンピュータで分子の世界を探る:  
数理科学, OCT, No. 268, 51 (1985)
- 52) 鈴木増雄・宮下精二・高須昌子, 量子系のモンテカルロ法:  
数理科学, OCT, No. 268, 70 (1985)
- 53) 唐木幸比古, 計算物理とは: 数理科学, MAY, No. 251, 5 (1984)
- 54) 有馬朗人, 第三の物理学: 数理科学, MAY, No. 251, 10 (1984)
- 55) 小柳義夫, 格子ゲージ理論: 数理科学, MAY, No. 251, 18 (1984)
- 56) 上村正康, 原子核物理と数値計算: 数理科学, MAY, No. 251, 24 (1984)
- 57) 内藤豊昭, 分子動力学による剛体球形のシミュレーション:  
数理科学, MAY, No. 251, 57 (1984)
- 58) 吉野さやか, 数値固体物理: 数理科学, MAY, No. 251, 41 (1984)
- 59) 中村卓史, 数値的相対論: 数理科学, MAY, No. 251, 49 (1984)
- 60) 西森秀穂, ランダム・ спин系における数値計算:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 2 (1989)
- 61) 宮下精二, 相転移のモンテカルロ法による研究—連続スピン系と動的性質を中心にして—: 固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 10 (1989)
- 62) 岡部豊, 準結晶上のスピン系の統計力学:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 17 (1989) (固体物理 Vol. 24 No. 3 1989)
- 63) 今田正俊, 量子系での計算物理的アプローチ: 固体物理,  
Vol. 24, No. 3, p. 21 (1989)
- 64) 高橋實,  $4\text{He}$ に関する量子モンテカルロ法: 固体物理,  
Vol. 24, No. 3, p. 37 (1989)
- 65) 金森順次郎・坂本好史, 格子ガス・モデルと表面:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 41

- 66) 大辻清太・垣谷公徳・吉森昭夫, 表面物理への計算機実験:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 45
- 67) 能勢修一, 分子動力学シミュレーションの新しい方法論について:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 98 (1989)
- 68) 横渡保秋, 非晶質の分子動力学: 固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 108 (1989)
- 69) 川勝年洋・上田顯, 化学反応系の分子動力学: 固体物理,  
Vol. 24, No. 3, p. 121 (1989)
- 70) 塚田捷, 電子状態の計算と分子動力学: 固体物理,  
Vol. 24, No. 3, p. 128 (1989)
- 71) 石田浩, アルカリ吸着と仕事関数: 固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 138 (1989)
- 72) 吉田博・寺倉清之, 電子状態計算と物質設計システム:  
固体物理, Vol. 24, No. 3, p. 143 (1989)
- 73) 山口兆・山本茂義・那須奎一郎, A b initio計算による銅酸化物クラスターの  
電子状態: 固体物理, Vol. 24, No. 4, p. 54 (1989)
- 74) 中村貴義・川端康治郎, 電気を通す单分子膜・LB膜:  
固体物理, Vol. 24, No. 4, p. 63 (1989)
- 75) 宮崎剛英・岡崎誠・青木秀夫, 格子非整合エピタキシーのシミュレーション:  
固体物理, Vol. 24, No. 1, p. 37 (1989)
- 76) 能勢修一・米沢富美子, アモルファス固体の計算機実験:  
固体物理, Vol. 23, No. 1, p. 22 (1988)
- 77) 斎藤幸夫・植田毅, 格子気体模型による結晶成長のシミュレーション:  
固体物理, Vol. 24, No. 8, p. 49 (1989)
- 78) 宮下精二・寺倉清之・米沢富美子・長谷田泰一郎, 特集: 物性における計算物理  
まえがき: 日本物理学会誌, vol. 40, No. 11, p. 831 (1985)
- 79) 豊沢豊, 計算機によって物性科学はどう変わるか:  
日本物理学会誌, vol. 40, No. 11, p. 833 (1985)
- 80) 浜田典昭・大西桧平, 固体の電子状態: 日本物理学会誌,  
vol. 40, No. 11, p. 834 (1985)
- 81) 斎藤幸夫・宮下精二, モンテカルロ法による相転移の研究:  
日本物理学会誌, vol. 40, No. 11, p. 843 (1985)

- 82) 能勢修一・米沢富美子, 分子動力学法による融解・結晶化・ガラス転移の実験：  
日本物理学会誌, vol. 40, No. 11, p. 856 (1985)
- 83) 上田顕・金子豊, 超イオン導電体—格子の安定性と動的性質—：  
日本物理学会誌, vol. 40, No. 11, p. 866 (1985)
- 84) 桑原邦郎, 乱流のシミュレーション：日本物理学会誌,  
vol. 40 , No. 11, p. 877 (1985)
- 85) M. DOYAMA • T. SUZUKI • J. KIHARA • R. YAMAMOTO, Computer Aided Innovation of New Materials : NORTH-HOLLAND, AMSTERDAM (1991)
- 86) 田中實・山本良一編, 計算物理学と計算化学—分子動力学法とモンテカルロ法—：  
海文堂, 東京 (1988)
- 87) 中島甫氏私信 (JMPD (JAERI Material Performance Database) の現状とその利用例)
- 88) 大野英雄氏私信 (ランダムシステム系の計算機シミュレーション)
- 89) (社) 日本機械工業連合会・(財) 金属系材料研究開発センター, 金属系新素材開発における電算機支援システムに関する調査研究：(1990)
- 90) (社) 日本ファインセラミックス協会, 平成 2 年度無機新素材産業対策調査 (材料別問題別調査研究) 委託調査研究報告書—ファインセラミックス (FC) の材料科学に関する調査－：(1991)
- 91) 毛利哲雄, 日本の科学と技術：(財) 日本科学技術振興財団・科学技術館, vol28, No. 288, p. 38 (1987)
- 92) 塚田捷, 日本の科学と技術：(財) 日本科学技術振興財団・科学技術館, vol28, No. 288, p. 27 (1987)

## 2. 人工知能技術の調査

- 1 ) ICOT-JIPDEC AIセンター (編集), A I ビジョン—90年代の技術と需要：日本経済新聞社, 東京, pp. 21~28 (1987)
- 2 ) 戸内順一, 図解 人工知能入門：啓学出版株式会社, 東京, pp. 11~20 (1991)
- 3 ) " システムAI " に向かうAIツール：日経AI別冊, 1991年春号 (1991)
- 4 ) 戸内順一, 図解 人工知能入門：啓学出版株式会社, 東京, pp. 29~38 (1991)

- 5) 小林重信, 中村孝太郎, 新しい問題解決方式として実用化が期待される事例ベース推論: 日経AI別冊, 1991年春号 (1991)
- 6) 廣田薫, ファジィ推論とファジィ制御: 日本機械学会誌, Vol. 93, No. 856 (1990)
- 7) 小林重信, AI、ファジィ、ニューロ: コンピュートロール, No. 35 (1991)
- 8) 浅川和雄, ニューロコンピュータの現状と展望: FUJITSU, Vol. 42, No. 3 (1991)
- 9) 第五世代コンピュータ: 日経サイエンス, 1991年2月号 (1991)
- 10) あと1年を残し、知識情報処理に成功: コンピュートピア, 1991-9 (1991)
- 11) 山川烈, ファジーコンピュータ: 電子情報通信学会誌, Vol. 73, No. 1 (1990)
- 12) 戸貝方規, ファジィチップと開発環境: システム/制御/情報, Vol. 34, No. 5 (1990)
- 13) 久間和生, 高橋正信, ニューラルネットワークのハードウェア: bit Vol. 23, No. 13 (1991)
- 14) 国内で販売されているAIツール一覧: 日経AI別冊: 1991年春号 (1991)
- 15) 実用システムに適用始まるニューラル・ネットワーク: 日経コンピュータ, 1991/2/25 (1991)
- 16) 谷内田正彦, 画像処理から画像理解へ: 人工知能学会誌, Vol. 4, No. 1 (1989)
- 17) 森元逞, 音声言語処理: 人工知能学会誌, Vol. 6, No. 3 (1991)
- 18) 戸内順一, 図解 人工知能入門: 啓学出版株式会社, 東京, pp. 105~109 (1991)
- 19) ICOT-JIPDEC AIセンター (編集), AI白書 1991—人工知能の技術と利用: (財)日本情報処理開発協会, 東京, pp. 200~202 (1991)
- 20) (社)日本産業ロボット工業会, 産業用ロボット・ハンドブック 1990: (社)日本産業ロボット工業会, 東京, pp. 24~38, pp. 802~807 (1989)
- 21) 館 日章, ニューロボティクスへの挑戦: 日本の科学と技術, Vol. 31, No. 258 (1990)
- 22) 鶴沢忍, 極限作業ロボット: システム/制御/情報, Vol. 34, No. 7 (1990)
- 23) 土屋和雄, 宇宙ロボット: システム/制御/情報, Vol. 34, No. 7 (1990)
- 24) ICOT-JIPDEC AIセンター (編集), AIビジョン—90年代の技術と需要: 日本経済新聞社, 東京, pp. 64~68 (1987)
- 25) ICOT-JIPDEC AIセンター (編集), AI白書 1991—人工知能の技術と利用: (財)日本情報処理開発協会, 東京, pp. 20~47 (1991)

- 26) 各産業分野のエキスパート・システム開発状況を見る：日経A I 別冊，1991年冬号（1991）
- 27) 国内で運用／開発中の主要エキスパート・システム一覧：日経A I 別冊，1991年冬号（1991）
- 28) 広瀬正，森丈彦，金融分野におけるコンサルテーション問題の実際：人工知能学会誌，Vol. 6，No. 6 (1991)
- 29) 田中敬司，移動体運転のためのオペレータ支援技術：計測と制御，Vol. 30，No. 1 (1991)
- 30) 沼野正義，船舶の知能化：計測と制御，Vol. 30，No. 1(1991)
- 31) 松本邦顕，日立製作所におけるファジィ制御：コンピュートロール，No. 35 (1991)
- 32) 泉井良夫，田岡久雄，特集 ニューロおよびファジィ技術の応用，II. ニューロおよびファジィで何ができるようになったか，第2章 電力システムネットワーク技術：電気学会誌，Vol. 111，No. 1 (1991)
- 33) 大島有三，特集 ニューロおよびファジィ技術の応用，II. ニューロおよびファジィで何ができるようになったか，第3章 製鉄プロセスへの応用：電気学会雑誌，Vol. 111，No. 1 (1991)
- 34) 春木和仁，ニューラルネットワークの産業への応用：ファクトリ・オートメーション，'91. 3 (1991)
- 35) 小林重信，知識システムの新たなる展開：計測と制御，Vol. 31，No. 1 (1992)
- 36) 坂本充美ほか，新金融商品開発支援システム「天才くん」の開発：日立評論，Vol. 72，No. 11 (1990)
- 37) 鮫島誠，戸澤祥二，建設機械のエンジン駆動系診断用エキスパートシステムの開発：三菱重工技報，Vol. 27，No. 6 (1990)
- 38) 池田博昭，落合統，エキスパートシステムの自動列車運転装置への適用：三菱電機技報，Vol. 64，No. 10 (1990)
- 39) 岩見昇，松下電器産業におけるファジィ制御：コンピュートロール，No. 35 (1991)
- 40) 鎌田憲幸，内藤修治，田中健彦，連続鋳造のブレイクアウト予知システム：FUJITSU，Vol. 42，No. 3 (1991)

### 3. 地層中での物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討

- 1) D. Read, T. W. Broyd and B. Come: The CHEMVAL project - An international study aimed at the verification and validation of equilibrium speciation and chemical transport models: GEOVAL-90, pp. 417-424, (1990)
- 2) Wolery, T. J., EQ3/6 - Status and future development: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 10-19, 1986.
- 3) Siegel, M. D. and C. D. Leigh (edt.), Progress in Development of a Methodology for Geochemical Sensitivity Analysis for Performance Assessment: NUREG/CR-5085, SAND85-1644, (1985)
- 4) Chiba, H.: Chemical conditions of the Japanese neutral geothermal reservoirs: The Third International Symposium on Advanced Nuclear Energy Research - Global Environment and Nuclear Energy -, pp. 190-194, (1990)
- 5) 千葉仁, 地熱水の溶存化学種組成の推定とその応用: 地熱エネルギー, Vol. 10, No. 4, pp. 30-43, (1985)
- 6) Murphy, W. M.; Calculations of geochemical mass transfer as a function of temperature and time: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 27-33, (1986).
- 7) Kerrisk, J. E. and Silva R. J.; A consistent set of thermodynamic constants for Americium(III) species with hydroxyl and carbonate: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 167-175, (1986).
- 8) Lichtner, P. C.; Multiple reaction path model describing mass transfer in geochemical systems: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 3-9, (1986).
- 9) Sargent F. P., Validation of geochemical modeling and data for assessing the performance of geological disposal of nuclear wastes: GEOVAL-90, pp. 51-61, (1990).
- 10) Wanner, H.; The NEA thermochemical data base: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 157-161, (1986).
- 11) Dalany, J. M.; EQ3/6 Data base - ongoing development at Lawrence Livermore

- National Laboratory: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 162-166, (1986).
- 12) Perkins, E.H., Berman, R and T.H. Brown; Software for the computation and graphical display of intensive variable phase diagrams: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 176-183, (1986).
  - 13) Rubin, J., Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions: Water Resour. Res., Vol. 19, No. 5, pp. 1231-1252, (1983).
  - 14) Bourcier, W.L.; Importants in the solid solution modeling capabilities of EQ3/6: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 41-48, (1986).
  - 15) Perkins, E.H.; A theoretical basis for the coupling of chemical reactions to open system process: Proc. of the Workshop on Geochemical Modeling, pp. 20-26, (1986).
  - 16) Read M.H., Seawater-basalt reaction and the origin of greenstones and related ore deposit:Econ. Geol., 78, pp. 466-485, (1983)
  - 17) Lemire, R.J. and F. Garisto: The solubility of U, Np, Pu, Th, and Tc in a geological disposal vault for used nuclear fuel: AECL Report, AECL-10009, (1989).

付一 1 地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する最近の知見

本調査の「3. 地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討」における調査の一環として、次の両氏に関連した分野での研究の現状や課題等について、原稿を執筆して頂きました。

・慶應義塾大学 理工学部 助教授 鹿園直建 殿

・岡山大学地球内部研究センター 千葉 仁 殿

次頁以降にそれを掲載致します。

また、両氏には、本調査に御協力頂きましたこと、あらためて御礼申し上げます。

# 地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関する調査検討

慶應義塾大学 鹿園 直建

地層中のより精度の高い核種移行評価を行うには、遅延係数等の係数等を使用しないで、核種の化学的挙動の明確化及び岩盤のモデル化等が研究課題となる。ここでは、地層中の物質移動の化学的挙動及び地下水経路に関するこれまでの研究をまとめ、今後の調査・研究に関する提言を行いたい。

## 1. 化学平衡論の研究

地層中では水溶液と岩石（鉱物）とは相互作用を行う。この相互作用のメカニズムとしては、化学反応、流動、拡散が重要である。従来の研究では、化学反応に関しては比較的明らかにされているものの、流動、拡散についてはあまり明らかにされているとはい難い。化学反応に関しては、一般的に化学平衡に達していると仮定し、水／岩石相互作用を理解している。

この化学平衡の取扱い方には、完全化学平衡モデルと部分化学平衡モデルがある。完全化学平衡モデルというのは、システム全体が化学平衡になっていると考えるので、システムを構成する固相、液相、気相間で化学平衡が成り立っているとする。一方、部分化学平衡モデルでは、考えるシステム全体では化学平衡が成り立っていないが、部分々では化学平衡に成っているとする考え方である。例えば、ある量の岩石からなるシステムにある量の水溶液を持ってきて、この岩石、水溶液から成るシステムが化学平衡になったとする。そして、このシステムにはじめと同じ水溶液をつけ加え、化学平衡にする。これらの操作を次々に行う。この過程で岩石が溶解し、水溶液から鉱物が沈殿する。

以上の化学平衡モデルをもとにした天然の水—岩石系の解析は、Sillen(1967)の研究以来、海水—堆積物系、地熱系に対してあてはめられてきた。近年では地下水—岩石系に対しての応用研究もなされてきた。近年コンピュータ技術が発展し、部分化学平衡モデルにもとづく解析が多くなってきた(Helgeson, 1979; Wolery, 1978; Read, 1982)。例えば、地熱系における熱水組成、岩石の変質、鉱床の生成についての検討がなされている。例えば、完全平衡モデルにもとづき、地熱系の貯留層中の熱水の組成を求めたところ、大体よい一致がえられている。

ところが、熱水の流出するところ（流出帶）では、熱水の流速が早く、熱水と冷水（海

水)との急速な混合によって鉱物が沈澱するため、準安定鉱物の生成がみられ、化学平衡からずれている。

以上のように、高温における水／岩石反応に関する研究は、近年の地熱開発や海底資源探査など資源の観点から進められてきたといえる。

一方、低温の水一岩石系の解析に関しては、低温で化学平衡に達しにくいなどの問題があるために、化学平衡モデルにもとづく研究はそれ程みられない。しかしGarrels(1967)による地下水一岩石反応に関する研究以来、研究が進められ、Stumm and Morgan(1981)の風化鉱物一造岩鉱物一水溶液平衡モデルによるGoldchの風化系列の解釈などすぐれた研究例もみられている。今後は、深層地下水など流動速度の遅い地下水組成の解釈を化学平衡論にもとづき進めるべきであろう。

以上の化学平衡論モデルにもとづく計算手法はほぼ完成している（例えば、Pbreeqe, EQ3/EQ6）。しかしながら、問題点として、以下の3つがあげられる。

#### (1) 鉱物固溶体の問題

これまでの水溶液一岩石系の熱力学計算では、鉱物を端成分として扱っている。しかしながら、放射性廃棄物問題において重要な鉱物であるスメクタイトは多くの成分からなる固溶体である。この多成分固溶体の熱力学データを求め、これを入った熱力学計算を行うべきであろう。

#### (2) 準安定相の問題

天然の岩石中には多くの準安定相が存在している。例えば、火山岩の大部分はガラスによって構成されている。このガラスは多成分珪酸塩の準安定相である。この他の例として $\text{SiO}_2$ をあげることができる。 $\text{SiO}_2$ は石英以外に、アモルファスシリカ、オパールという準安定相があり、これらは地表付近で普遍的な鉱物である。今後、これらの準安定相の熱力学的性質、溶解度などを明らかにする必要がある。そして、これらを入れて、水一岩石反応に関する熱力学平衡計算を行うべきであろう。特に、 $\text{SiO}_2$ 以外でも、放射性核種の酸化物、珪酸塩の準安定相に関する研究は重要である。

#### (3) 微量成分の問題

放射性核種など微量成分が岩石やガラス中でどのような存在状態にあるのかという問題は、地層中での水溶液によるこれら元素の運搬の問題を考える場合、本質的に重要である。特にこれらの熱力学的性質、溶解度を求めるといけない。

固相だけでなく、水溶液中の微量成分の研究も重要である。地下水など天然水中で

の放射性核種などの微量元素濃度に関するデータが大変に少ないので、これらの分析を行う必要があろう。

以上の(1), (2), (3)の問題も取り入れて、完全化学平衡モデル、部分化学平衡モデルをより天然に合ったものとし、水溶液—岩石化学平衡によって決められる岩石、水溶液組成を求めていくべきと考える。

## 2. 速度論

水／岩石反応において水溶液から鉱物が沈澱をする。このプロセスは動的であり、これらの反応においては水溶液—鉱物間の化学平衡は達成していない。特に低温や多塩類の水溶液の混合や流速の早い地下水／岩石反応においては、化学平衡には達しにくい。熱水系、地熱系においては、流入帶、貯留層中の熱水の移動速度は遅いので化学平衡モデルの適用も可能かもしれない。しかし、流出帶においては熱水の流速は速く、鉱物の沈澱速度も速く、化学平衡論モデルの適用は難しいであろう。以上のように、化学平衡モデルで扱える場もあるが、扱えない場もある。

水溶液が鉱物と反応すると鉱物は溶解をする。例えば、長石などの珪酸塩鉱物が溶解をすると、Siが水溶液中へ移行をする。水溶液中の $\text{SiO}_4$ 濃度は、この反応速度によって支配される。通常の地下水における $\text{SiO}_4$ 濃度は、石英の飽和濃度よりもかなり高い値になっている。このことは、地下水—岩石系を化学平衡では扱えないことを明らかに示している。石英の飽和濃度以上の $\text{SiO}_4$ 濃度を持つ地下水からは、石英の沈澱がおこるはずである。この石英の沈澱は、速度論によって決められるであろう。この沈澱速度は、一成分系の場合、以下の式によってあらわせられる。

$$\frac{d C_i}{d t} = k(C_i - C_{i \text{ eq}})^n$$

ここで  $C_i$  ;  $i$  成分の水溶液中の濃度

$C_{i \text{ eq}}$  ;  $i$  成分の飽和濃度  
 $k$  ; 反応速度定数  
 $n$  ; 反応次数

反応速度定数  $k$  は、比表面積（水容積の体積／鉱物の表面積比）、濃度、活性化エネルギーによってあらわせられる。この  $k$  に関しては現在のところ限られた鉱物に対してしか求められていない。例えば、 $\text{SiO}_4$ ,  $\text{CaCO}_3$ , 粘土鉱物（カオリナイト他）、硫酸塩鉱物、リン酸塩鉱物に対しての研究はなされている。多くの主要な珪酸塩鉱物の沈澱カイネティック

スの研究を今後進めるべきであろう。Lasaga(1984)は、溶解速度及び熱力学データから沈澱速度定数を求めているが、この値が正しいという保証はない。今後は実験的にきちんと速度定数を求める必要がある。

石英に対して地下水が過飽和であるということは以下の2つの点を考慮しないといけないことを示している。

- (1) 他の酸化物に対しても安定層に関し地下水は過飽和であるかもしれない。これについて知るためには、準安定相の溶解度を知り、かつ地下水中の濃度についてのデータを得る必要がある。
- (2) この過飽和溶液からの安定相の沈澱について考えないといけない。従来は、地下水とガラス固化体、キャニスター、オーバーパック材との反応に関し溶解反応を中心と考えている。すなわち、地下水組成は、反応する前の組成ではなく、溶解反応によって変化すると考えてきた。しかし、溶解反応だけでなく、過飽和溶液からの沈澱反応を考慮しないといけないであろう。

天水起源の希薄で流速の遅い地下水の場合、以上の点はあまり考慮しないで良いかもしれないが（この点についても検討を要する）、海水起源で濃厚で流速の遅い地下水の場合は以上の点を考慮する必要があろう。我が国の地質環境は、火山岩起源の海成層が広く分布しており（例えば、グリーンタフ地域）、海水起源（または海水+天水起源）の地下水が深部に広く分布している可能性がある。またマグマ活動があれば、地下に熱水も存在し、この濃厚な熱水と地下水との混合がおこるかもしれない。以上の深部の地下水の性質を明らかにする（深部ボーリングを行う必要があろう）と同時に、これらからの鉱物の沈澱、及びこれらによる鉱物の溶解を速度論の立場から明らかにしていくべきと考える。

沈澱カイネティックスに比べて、溶解カイネティックスに関しては、近年大いに研究が進められた。例えば、主要な造岩鉱物の反応速度定数は求められている（例えば、Lasaga, 1984），これらのデータは、ほぼ一致しているものの、鉱物によっては大きな相違が見られる。この原因にはさまざまあるであろうが、その多くは、同じ鉱物といっても、その性質に違いがみられる点にある。特に鉱物の表面状態の違いが大きく影響を与えるらしい。例えば、鉱物表面での転位密度は溶解速度に大きく影響を与えるらしい。この鉱物表面の微小領域の状態分析、化学分析技術は近年多いに進展した。例えば、顕微赤外、ラマン、ESCA, オージュ、光電子、タンデムなどがあげられる。今後はより微小領域（オングストロームオーダ）での分析が行われていくであろう。

溶解反応の実験結果を天然の鉱物の風化系列(Goldichの風化系列)との比較がなされており、大体の一致が得られている。しかし、鉱物によっては一致していない。例えばオリビンは、溶解実験ではかなり溶解速度が遅いが、天然では風化されやすい。この不一致の原因は、あまりはっきりしていないが、オリビンが溶解していく時、オリビンの表面近くに他の固相ができていくためか、細かい裂かが結晶の中にまで入っていないためかもしれない。オリビンの表面に他の固相がおおってしまうと、この中における拡散が律速段階になり、内側のオリビンの溶解が遅くなるであろう。

反応速度を明らかにするためには、反応次数を決めないといけない。この反応次数はメカニズムによって大きく異なる。例えば、界面反応、拡散のどちらが律速段階かによって違ってくる (Stumm and Morgan, 1981)。界面反応にもpolynuclear growth, mononuclear growth, らせんgrowthなどがある。拡散にも溶液中のイオンの拡散、電気二重層における拡散、表面拡散、結晶面上の拡散などがある。以上のうちのどれが律速段階になるのかを明確にする必要がある。

この他に、固相から固相への変化、特に準安定相関の変化のカイネティックスを知る必要があろう。例えば、準安定相である酸化物は必ずしも定比化合物ではなく不定比化合物であり、この不定比化合物間のカイネティックスを知る必要があろう。

以上の均一、不均一反応のカイネティックスを明かにするためには、まず鉱物相の同定手法（例えば、アモルファスの同定、不定比組成の決定、微小部の同定）を開発すべきである。それと同時に溶液内の元素のさまざまな存在状態（イオン、イオンペア、錯体、コロイドなど）を直接的手法によって決定しないといけない。地球化学の分野においては、溶液内存在状態の決定は、主として間接的手法によってなされてきた。例えば、鉱物の水溶液における溶解度のpH, Eh, 配位子濃度依存性を実験的に求め、錯体の存在状態を検定する方法がある。この方法はあくまでも間接的な手段によるものであり、より厳密に存在状態を求めようとしたら、さまざまなスペクトロスコピーを用いて直接的に同定を行うことが望まれる。溶液化学の分野において、近年溶存種の状態分析手段は著しく発展したので、これらの手法を大いに取り入れるべきであると考える。

従来の直接的手段による固相、水溶液中の溶存状態の同定は、これらの存在状態の時間的变化を求める目的で行われたことが少ないとと思える。今までの研究では、固相や溶存種の構造解析に力点がおかかれている。溶存種の動的過程についても最近では研究が進んでいるが、主として溶液内反応（均一反応）を扱っているため、取り扱う時間範囲が非常

に狭い。放射性核種移行問題を扱う場合は、不均一反応であるため、より長期的な時間変化を直接的手段をもとに求めて行くべきであると考えたい。

### 3. 拡散

水溶液一岩石系において拡散が律速段階になる場合もある。この拡散には以下があげられる。①水溶液中における溶存種（イオン、錯体など）の拡散 ②固相における元素の拡散（グレイン境界拡散、表面拡散、体積拡散）③水溶液が存在するもとでの岩石、鉱物中の溶存種、ガスの拡散。

①、②に関しては今までに多くの実験的研究がなされており、多くのデータ（拡散定数、活性化エネルギー）が得られている。しかしながら、地下水一岩石系において重要なのは③であろう。この種の拡散に関する基礎的データは非常に少ないので、今後多くのデータを得ていく必要がある。例えば、スメクタイト中の各種元素、ガスの拡散、種々な岩石中の元素拡散実験を種々な水溶液を用いて行うべきであろう。

この拡散定数はtortuosityなど岩石や鉱物中のミクロな割れ目、空隙の長さや形状などの性質の影響を大いに受ける。空隙の研究は、油田地域などの堆積岩に対して行われ進められている。しかしながら、地熱系、地下水系におけるミクロな割れ目、空隙と元素移動との関係に関する研究は今後の研究課題である。堆積盆地や地熱地域での水や元素移行問題は比較的広い範囲での動きが問題となっている。放射性廃棄物からの核種移行についてはより狭いところでのミクロな現象の解明が重要であると考える。

この種の研究は、単に拡散定数を求めれば良いというものではなく、ミクロな割れ目、空隙の定量的把握とその要因との関係が明らかにならないといけない。割れ目の解析において、フラクタル理論を応用する研究が近年多くなされている。この種の研究ではフラクタル次元を求める事が多いが、これだけではいけなく、例えば、そのフラクタル次元と拡散との関係の物理的意味を明らかにする必要がある。

### 4. 流動

地殻内の水（地下水、海水、地熱水）の流動に関する研究はこの20年位の間に多いに進められてた（例えば、Elder, 1966）。これらの研究の初期においては、岩石を均一媒体とみなし、透水係数を求め、その流動解析を行っている。近年では、より複雑なシステムの解析をしている。この種の計算は、今後境界条件をさまざまに与えたり、システムをより

多くのサブシステムからなるとして行っていくことができる。特に日本のような複雑な地質条件のもとではこのような作業が必要とされる。境界条件として、岩石種の違いだけでなく、地下水／海水境界、地下水／熱水境界など違う種類の水の空間的関係も与えないといけない。

重要な問題点として、さまざまなfissureが不均一に入った場合の流動解析があげられる。このfissureの入り方は、岩石種により異なり、また天然の岩石には、一般的にさまざまな力を受け、ミクロからマクロまでの多種類のfissureが入っている。このfissureとして、マグマ冷却によるもの、プレートの力によるもの、マグマの貫入の力によるもの、アイソスターによるもの、などがある。

これらの岩石の破壊に関する理論的、実験的研究を進めるべきであろう。また、どういう種類のfissureがあり、それぞれの特性を明らかにし、これと流動との関係が明らかにならないといけない。fissureがあれば、水が流動するが、この水から鉱物が沈澱し、fissureが充填される。この影響で水の流動が妨げられる。このfissureを充填した鉱物の研究はこれから行っていかないといけない。fissure中には鉱物が充填することもあるが、溶解することもある。この充填、溶解によって、permeabilityは時間とともに変化する。このpermeabilityの時間的変化を入れ、水の流動解析をするべきであろう。水の流動は、岩石種のみならず、同一な岩石種であってもfissureや表面状態が大いに異なることが予想されるので、場所の違いで大いに変化するであろう。この種の計算でもっとも基本となるのは、permeabilityであるが、現在、地下水—岩石系において、permeabilityの理論値と実験値との比較検討がなされているが、よい一致をみているとは言い難い。今後は、理論、フィールド、実験の観点からpermeabilityの研究を進めるべきである。

## 5. 連成モデル研究

放射性廃棄物の研究において、地球化学モデル、地下水流動モデル、応力解析モデル、熱移動モデルなどにもとづき、いくつかのモデル計算がなされている。これらのモデル計算は、それぞれ独立になされているが、今後はこれらを連結したモデルの構築をすべきであろう。

一方、各々のモデルに関してもより精緻なモデルの構築が望まれる。例えば、地球化学モデルにおいては、前にも述べたように完全化学平衡モデル、部分化学平衡モデルにもとづく計算はなされているが、これらは特殊な条件でのみ成り立つモデルである。今後は反

応速度、拡散、流動を入れたモデル計算を行うべきであろう。それぞれのメカニズムに関する研究を独立に進めると同時に、それぞれを組合せたモデル計算を進める必要があろう。上の3つのメカニズムの中で2つのメカニズムを組合せたモデル計算は近年多く行われている（例えば、Lichtner, 1985），この種のモデル計算法は近年大いに発展した。しかし、パラメータの具体的値に関するデータは少ない。また、上の3つを組み合わせたモデル計算はほとんどなされていない。今後は、この種のモデル計算を行うべきであろう。

以上の非平衡系において、反応、拡散、流動が効く場合、パラメータ間の関係は非線形になり、振動をおこすことがある。天然における無機システムにおける化学振動現象の解明は今後の研究課題であろう。水溶液を含まない天然システム、生物システムの振動現象の研究は近年多いに進められたので、これらの研究を水溶液—岩石システムに応用することも可能と思われる。

以上述べてきたように、反応—流動—拡散モデルにもとづいた天然システムへの応用研究はほとんどなされていないが、化学工学や環境システム工学の分野においては、この種の研究の進展が著しい。これらの研究において、第一に重要なことは、どういうモデルを設定するのかにある。このモデルには、回分モデル、押し出し流れモデル、完全混合モデル、槽列モデルなどがある。このモデルの取り方により、物質移動の仕方が大きく変化する。今後は、この化学工学、環境システム工学の研究成果を地球化学の分野にとり入れ、さらに発展させる必要があろう。

## 6. 地球化学モデル計算の評価の問題

重要なパラメータ値を定め、多くのモデル計算を行ったとしても、それが正しいかどうかの評価がなされねばならない。完全化学平衡モデル、部分化学平衡モデルにもとづく計算結果と、天然水の化学組成、鉱物組成との比較はなされている。例えば、地熱系貯留層中の熱水組成、浅層地下水の化学組成、海底に噴出する熱水組成、地熱系の変質岩の鉱物組成に対してモデル計算との比較検討がなされている。しかし、低温水—岩石系における水組成、岩石組成との比較検討例は少ない。

部分化学平衡モデルにもとづく地熱系の解析では、地熱系の貯留層、流出帶での熱水組成、鉱物組成の研究はなされているものの流入帶において、地下深部へ流動、浸透していく水の組成の評価はなされていない。それは、貯留層、流出帶の熱水組成の分析結果は出しやすいが、流入帶の水の組成を求めるることは難しいからである。流入帶における水流動

解析は流入帶を構成する岩石の透水係数がさまざまに変化し、その透水係数が比較的大きく、流動速度が変化し、大きいためになかなか難しい。同様なことは、地下水—岩石系に対してもいえるであろう。例えば、地下水面より上の不飽和帯における流動解析は今まであまりなされていない。今後はこの浅部での水の流動解析、水の分析を行い、モデル計算の評価を行う必要がある。この種の研究は、水の分析を行うことが可能であるために、今後、発展させることができるであろう。いざれにせよ、天然の水—岩石システムにさまざまな水、岩石の分析を行い、モデル計算との比較・評価を行うべきであると考える。今後は、このような観点からナチュラルアナログ研究を進めるべきではなかろうか。従来のナチュラルアナログ研究においては、ウラン鉱床の研究、岩石、鉱物、ガラス、金属も溶解速度の研究などがなされてきたが、さまざまな種類の天然水の研究はあまりなされていないようにみうけられる。

## 7. まとめ

今後、進めるべき調査・研究として以下をあげたい。

### (1) 基礎データ

特に重要なパラメータ値（例えば、鉱物固溶体の熱力学的性質、準安定相の熱力学的性質、反応速度（沈澱、溶解カイネティックス、準安定相のカイネティックス、拡散定数、透水係数）の実験をもとにした収集、及び既存データのまとめ。

### (2) 実験・分析手法の開発

以上の基礎データを得るために、新しい技術開発が欠かせない。特に表面状態、各種状態分析（アモルファス、溶存種、固相中の存在状態）、岩石・鉱物中のミクロな不完全性（fissure, 転位、空隙など）の解明を行って行く必要があろう。

### (3) 地球化学モデル計算

コンピュータ技術の発達した現在、多成分系の反応一流動一拡散モデルに基づくモデル計算は可能であろう。しかしながら、前にも述べたように、計算結果の評価が問題となる。天然事象にあわせるために、システムを複雑にすれば良いというものではなく、システムを簡単化し、計算をし、評価をすることも重要であろう。

### (4) 評価研究

以上の天然の水—賀案積システムのモデル計算の評価手法としてのナチュラルアナログ研究を進めるべきである。多くの天然シナリオの解析がまだおこなわれていない

現在、このナチュラルアナログ研究は多いに進めるべきである。評価研究として、このナチュラルアナログ研究以外に数学的研究があげられる。特に確率論に基づく研究は重要であるが、これについては、ここではとりあげなかった。

以上の基礎データの集積、技術開発（実験、分析、コンピュータ）、評価研究（ナチュラルアナログ、数学的研究）に関して今後に残された多くの問題があるが、それぞれの研究については、近年、地球化学の他分野（例えば、溶液化学、結晶成長論、表面化学、電気化学、腐食化学、化学工業、環境システム工学など）において多いに発達したので、これらの他分野の研究をレビューし、既存データを集め、理論や手法を取り入れることが可能である。そしてこれらを理解し、地層中での物質移行に関する地球化学的研究を多いに発展させ、体系化させることも可能であろう。そのためには、地球化学的の分野に熱力学を取り入れ、それを地球化学的に発展させるのに50年以上もかかっていることを考えると、以上述べてきた形としての地球化学を発展・完成させるためには、多大な努力と長い年月が今後必要とされることは言うまでもない。

## 参考文献

- Elder, J. W, Heat and mass transfer in the earth : Hydrothermal system, No2, Dept. Sci. industr. Res. Bull., pp. 169 (1966)
- Garrels, R. M, Researches in Geochemistry II (1967)
- Helgeson, H. C, Mass transfer among minerals and hydrothermal solutions: in Geochemistry of hydrothermal Ore Deposits (ed. H. L. Barnes), pp. 568~610 John Wiley and Sons (1979)
- Lasaga, A, Chemical kinetics of water-rock interactions:J. Geophy. Res. 89, pp. 4009 ~4025 (1984)
- Lichtner, P. C, Continuum model for simultaneous chemical reactions and mass trns- port in hydrothermal systems: Geochem. Cosmochim. Acta, 49, pp. 779~ 800 (1985)
- Read, M. H, Calculation of multicomponent chemical equilibria and reaction proces- ses in sytem involving minerals: Gas and an aqueous phase, Geochem. Cosmochim. Acta, 46, pp. 513 ~528(1982)
- Sillen, L. G, The Ocean as chemical system : Science, 156, pp. 1189~1197 (1967)
- Stumm, W. and Morgan, J. J, Aquatic chemistry : John Wiley and Sons, New York(1981)
- Wolery, T. J, Some chemical aspects of hydrothermal processes at midoceanic ridges A thoretical study, I Basalt-seawater reaction and chemical cycling between the oceanic crust and the oceans, II Calculation of chemical equilibrias between aqueous solutions and minerals: ph. D. Thesis, Nor- thwestern Univ. (1978)

## 地層中の物質移動の化学的シミュレーション

### 一 現在の到達点と今後の進むべき方向 一

岡山大学地球内部研究センター 千葉 仁

#### ○はじめに

地層中の物質（元素）の動きは、水に溶けて物理的に動くときが最も効率がよい。ある物理的性質の定まっている媒体の中の水の動きは、物理的なシミュレーションによって推定することができる。このようなシミュレーションは、地下水や熱水の流動について既に多くの仕事がなされている。水の存在する環境での物質（元素）のふるまいを考えると、それらは、水の中へ溶け出してきたり、新しい鉱物を作り沈殿したりすることができる。言い換えると、水の中に溶けている元素は、地層中の岩石や鉱物と反応することができる。本小論では、化学反応と水の動きをどのように組み合わせて物質移動の計算がなされているか、また、今後どのような方向に進むべきかを考えてみることにする。

化学反応の速度は、温度が高ければ高いほど速くなる。したがって、高温の系であれば、化学反応は平衡に近づいていると考えられる。この小論で考えるのは、室温から 150°C 位までの比較的低温で、化学平衡が必ずしも成り立っていない系について考えてみることにする。

#### ○地層中の物理化学的条件とその決定要因

地層中の物理化学的条件で、物質の化学的なふるまいを決める最も大きなパラメーターは、温度、pH、酸化還元電位である。この小論で考えようとする環境では、系の圧力は、大きな効果を及ぼさないであろう。これらのパラメーターは、どの様に決められているのであろうか。また、それがどの様に溶存物質の濃度を決めているのであろうか。例えば、溶存シリカの濃度は、50°C以上の温度では、その温度でのシリカ鉱物との溶解平衡によって、決められている (eg. Ellis and Mahon, 1977)。つまり、溶液のシリカ濃度は、温度だけの関数として決められている。約 150°C を越えると中性の流体を持つ熱水系では、ほとんど全ての溶存成分が、その総塩濃度によって、熱水変質の場にある鉱物によってそ

の濃度が支配されるようになる (Chiba, 1991)。このような系では、温度と総塩濃度の関数として、pH や酸化還元電位も決まってしまうので、上記のパラメーターは、系自身により決められていると考えることができる。このように、ほとんど化学平衡にある系においても、元素は、まわりの固相との反応によってその濃度が決められているもの (reactive elements) と水溶液中へ常に溶けだす傾向のあるもの (mobile elements) の 2 つに分けられるということに注意すべきである。

本論で考えようとする温度が 150°C 以下の系では、水溶液と鉱物との反応速度は遅くなり、溶存物質の濃度は、まわりの岩石との反応によって決められなくなってくる。このため、系の物理化学的パラメーターは、一部の低温でも反応速度が速い反応によってのみ影響を受けて、ある種の定常状態にあることが予想される。

#### ○化学的シミュレーションの方法

現在行われているシミュレーションは、化学平衡が成り立っていると仮定して行われているものである。一部に、化学反応の反応速度を取り入れることにより速度論的効果を取り入れようという試みもなされている。

計算手法には、2種類のものがある。一つは、ほとんどのコードで使われているもので、溶液内部での化学平衡を仮定したときにある鉱物が飽和であるか、未飽和であるかを知って、固相を溶解させたり沈澱させたりして、系の全体の組成を計算するものである。もう一つは、自由エネルギーを用いて、系の自由エネルギーの総和を最低にするというアルゴリズムである。前者の手法が一般的に使われている理由は、得られる熱力学データの質が良く、豊富であるためである。また、筆者の見るところ、速度論的効果をシミュレーションに取り入れる場合、前者の手法でしか可能でないと思われる。

#### ○化学的シミュレーションで使われているコード

放射性廃棄物からの元素の移動のシミュレーションを目的として、最も、広範に使われているコードは、アメリカの Lawrence Livermore Laboratory で T.J.Wolery 等によって、開発が現在も続けられている EQ3/6NR という package である。このコードは、EQ3 (aqueous speciation 用) と EQ6NR (chemical modeling 用) の 2 つのコードよりなって

いる。また、このコードは、300 °Cまでの溶存化学種と鉱物の熱力学データのデータ・ベース（地層内処分の対象となる放射性元素を含む）を備えていることから、放射性廃棄物からの元素の移動ばかりでなく、水が関与した多くの地球化学的過程のシミュレーションにも使われている。このコードは、その大きさが非常に大きいため、メイン・フレームの計算機でしか使用できない。EQ3/6NR には、反応の kinetics をシミュレーションに取り入れるオプションも最近取り入れられつつある。これは、相対的な鉱物の溶解速度を用いるものや、溶解と沈澱の新しい速度論的取扱いを利用したものといわれている (Wolery, 1986)。

EQ3/6NR と並んで、多くの高温 (300 °C以下) の地球化学的な系で用いられているコードは、University of Oregonの M. H. Reed によって開発されている SOLVEQ(aqueous speciation 用) と CHILLER (chemical modeling 用) である。このコードは、一般的な地球化学的過程のシミュレーションを目的として開発されているものであり、放射性元素の熱力学的データ・ベースを持っていない。しかし、熱力学データ・ベースを変更するだけで、放射性元素の移動のモデリングを行うことが可能である。また、このコードは、コンパクトに作られており、パーソナル・コンピューターでも十分使用可能であるという特徴を持っている。

以上の 2 つの他にも、PHREEQ, MINEQL, WATEQ, SOLMNEQ など数多くの化学的モデリングや Aqueous Speciation を計算をするためのコードが開発されている (これらについての review は、Potter (1979) や Nordstrom and Munoz (1985) などにある)。

#### ○熱力学データ・反応速度論データの生産と評価

##### [熱力学データ]

化学的な平衡状態を計算するためには、鉱物、イオン、水などの熱力学データが、計算を行う温度で正確に判っている必要がある。たとえ微量成分のみの情報を知りたい場合でも、溶液の化学的性質を決めているのは主要成分であるため、主要な化学種の熱力学的データが計算に欠くことはできない。

溶液中のイオンやイオンペアの熱力学的性質は、室温付近の温度では、測定が比較的容易なため多くのものについての測定がなされている。しかし、高温高圧下では、測定に困難が伴う。そのため、実験者によって異なる結果が与えられることがある。また、堆積

物を含む環境では、無機イオンと有機酸や有機物との錯体が、物質輸送で重要な役割を果たしている可能性がある。このような錯体の錯形成定数の実験的な決定は、現在のところ、それほど多くの系で成されていない。上にあげたコードでは、溶存種の熱力学データとして、実験結果を収集して計算に用いている。これらのデータの妥当性や他のデータとの整合性は、実験の行われている系や十分な研究により化学的な性質が判明している天然の系で試験的に使用してみて、評価されている。

水自身の熱力学的性質は、低温ではよく研究されている。しかし、高温高圧下ではNaClを含む系以外の系は、まだ十分な研究がなされていない。低温の環境下におけるシミュレーションのためには、十分なデータが蓄積されているといえるであろう。

鉱物の熱力学データは、1000°C, 5000 barsまで Helgeson らによる一連の仕事によって、多くの鉱物について、内部矛盾のないデータ・セットが得られている。しかし、低温のプロセスを研究するために必要な低温で安定な鉱物のデータは、十分ではない。また、そのような鉱物は、きれいな端成分で存在することが稀であり、その熱力学データの測定は容易ではない。さらに、それらの複雑な鉱物では、固溶体の熱力学データを取り扱うモデルに選択の余地がある。

以上、熱力学データについてまとめると、放射性廃棄物の地層内処分後の元素の移動のシミュレーションを行うための水溶液中の成分の熱力学的性質は、比較的よく研究されている。しかし、それと反応するであろうまわりの岩石に含まれていたり、溶液から生成されるであろう鉱物の熱力学的性質は、現在のところ、十分なデータの蓄積がなされていない。

#### [反応速度論のデータ]

溶液内のイオン間あるいはイオンとイオン・ペアとの間の反応は、一般的に固相とイオン間の反応よりも速い。例えば、最も速い proton transfer の反応では、室温であっても  $t_{1/2}$  (半分反応が進む時間) は、ピコ秒のオーダーである。しかし、溶液中でも遅い反応がある。例えば、中性溶液中の金属イオンの酸化反応の例では、 $t_{1/2}$  が、 $\text{Fe}^{2+}$  の酸化の場合 10 秒から 3 時間弱、 $\text{Mn}^{2+}$  の酸化の場合では 3000 年程度である (Stumm and Morgan, 1981)。したがって、溶液内反応であっても、低温では、反応によって、平衡状態からずれているものが存在する。(ただし、このような遅い反応も、生物が関与することによってその反応速度が、非常に加速される。) このように、溶液内部の反応の反

応速度は、実験的に測定されていたり、理論的な取扱いもされていて、比較的よく分かっていると言える。

これに対して、固相の鉱物と溶液中のイオンとの間の反応の反応速度は、まだ十分な測定値が少ない。その反応速度は、溶液中の反応に比べて遅いと考えられている。鉱物の溶解反応の速度は、鉱物ごとに反応速度は異なることが分かっている（Wood and Walther, 1983）。しかし、低温の環境で重要な鉱物のデータは、まだ不十分である。

堆積環境や変成作用の環境で起こる固相と溶液中のイオンとの間の反応の活性化エネルギーは、10 - 20 kcal/mole の範囲にある（Lasaga, 1981）。この活性化エネルギーの大きさは、150 °C の時の反応速度を 1 とすると 25°C の時の反応速度が、1/20000 から 1/150 になることを示している。つまり、温度が下がると、固相とイオン間の反応の反応速度が、非常に遅くなることが分かる。温度変化がある環境では、反応の活性化エネルギーも天然の系をモデル化する上で重要な情報である。

#### [準安定相・核形成・結晶成長]

鉱物が、溶液から生成する時、その温度圧力条件で安定な鉱物が最初から生成するとは限らない。最初に生じた準安定相が、固相反応によって安定な相に変化していく場合、その反応時間は、溶液から生成する場合に比べて非常に長くなることが予想される。どの様な準安定相が生じるかを予言するような理論は現在存在していない。

鉱物がいつから生成し始めるかは、溶液がその鉱物について過飽和になった後に、結晶核が生成してからである。核生成についての実験的研究は、現在のところ非常に少ない。したがって、鉱物生成のタイミングをモデルに取り込むことができない。また、これまで行われた実験や天然のよく判っている系のモデリングの結果から、現在得られるの熱力学データを用いる場合、溶液中で過飽和である鉱物が必ずしもすべて生成するわけではないことが判っている。このような鉱物は、溶液中での核形成が困難であるのかもしれない。したがって、核生成の問題は、鉱物の生成の化学的なモデリングを行う立場からも、今後早急に発展することが期待される分野である。

結晶成長の速度も溶液の組成変化の速度を決める重要なファクターである。結晶成長については、前の二つに比べて、研究が進んでいるようにみられる。しかし、モデリングに適用できるような形での速度論的取扱いは、まだ成されていない。

## ○化学的平衡過程と非平衡過程

天然において到達すべき平衡状態とは、どういう状態を指して言うのであろうか。天然で一般的に観察される鉱物組み合わせがそれであるのか。それとも、現在ある熱力学的データを用いて熱力学的にエネルギーが最も低い状態を言うものなのか。そもそも、天然には、完全に化学的な平衡状態などというものは存在せず、いくつかの部分平衡が成立した系がいくつか合わさって存在しているだけと認識すべきなのであろう。特に、低温の系を考えるときは、そのように考えるべきである。

このような部分平衡しか成り立っていない系をモデル化するためには、まず、どの様にして、系が平衡に近づいていくのかを考えておく必要がある。それには、三つの過程が考えられる。第一は、化学的平衡過程で、この過程では、すべての物質が化学平衡下にあって、最終的な化学平衡へと進んでいくものである。非平衡過程は、二つに分けて考えられる。非平衡過程（1）では、準安定な相を生じ足りせず、系の物理化学的パラメーターが調和的に、平衡に近づく過程である。それに対して、非平衡過程（2）は、準安定な相を生じたり、ある種の系の物理化学的パラメーターが長期間にわたって他の化学的変化に追随しない場合で、本来の平衡状態とは少し異なった方向に一時的に近づく過程である。この過程には、準安定相が生じて完全な化学平衡下の二次鉱物の生成に必要なシリカやアルミニウムの濃度が平衡のレベルと異なったり、反応速度が遅い酸化還元反応が他の化学反応に追随しない場合などが予想される。これまでに発表されているモデリングの結果や筆者のモデリングの経験から、天然の現象が、全てが化学的平衡の下で進行していることは、熱水変質過程程度の温度（せいぜい、350 °Cまで）では、むしろ稀であるように思われる。天然では、非平衡過程を通して、部分平衡を達成しつつ、長い時間かけて徐々に平衡へと近づいていくものと考えられる。その場合、反応経路として上記の非平衡過程（1）と（2）のどちらが一般的なのであろうか。この回答を現在筆者は知らないが、天然の観察や実験室での実験から、平衡に近づいていく過程を観察するより他に方法がないように思われる。

現在行うことができる化学的な物質移動のシミュレーションで、どの様な場合に実際に起こるであろうことが予測可能なのであろうか。もし、天然の現象が、非平衡過程（1）により起こっているならば、完全平衡を仮定したシミュレーションは、最終的に到達するであろう状態を予測することができる。そして、現実に起こるであろう状態は、平衡モ

ルで予想される状態とほとんど何も反応が起こらなかった場合の間に入ってくるものと考えられる。しかし、(2)のような非平衡過程では、平衡を仮定したシミュレーションでは、現実に起こるであろうことを予測することができない場合がある。このような場合には、準安定相を仮定したり、ある種の反応をシミュレーションを行う系からはずしてシミュレーションを行い、その結果をも現実に起こり得る一つの例として考慮せねばならないであろう。ここに、化学的なモデリングをする人間の天然の系に対する認識の仕方が入ってくることは避けられない。

#### ○物理的シミュレーションと化学的シミュレーションのカップリング

天然で現実に起こっている現象をモデル化する場合、一つの反応の場しか考えない化学的なモデリングでは、現実を再現することはむずかしい。このようなアプローチは、天然を一つの closed system として見てしまうことになる。天然は、外部との物質の交換のある開放系であり、その取扱いをしないと物質移動の経路が長くなつた場合、天然を再現できないであろう。水の流れと化学反応をカップリングしたシミュレーションは、いくつかなされている。そのうちで最近のものの一つは、斑岩銅鉱床の二次付加体の生成過程をシミュレーションしたもの (Auge and Brimhall, 1989) である。この研究は、水の流れを計算する TRUST というコードと化学反応を計算する上記の EQ3/6NR を組み合わせて用いている。このシミュレーションでは、1.5 m のカラムを 30 cm ずつ 5 つセルに分けて、地表に降った雨が地下に浸透していく間の反応を 25 °C, 1 bar で計算している。鉱物の溶解速度を計算に組み込んでいるので、時間に対する各セルの化学的、鉱物学的变化が、12,000 年にわたって計算されている。計算結果は、天然で観察される鉱物組み合せと一般的によい一致を示している。これは、一つの成功例と言える。しかし、このようなシミュレーションにおいては、るべき結果は先に判っており、その場についての深い理解の結果として、モデリングの系に取り込むべき物質についての知識があることを忘れてはならない。

長い流路での物質移動のシミュレーションを行うためには、反応が行われるセルの数を上記の論文よりも増やす必要がある。また、上記の論文で考慮されていない反応に伴う鉱物の体積の増減による水の流れに影響を与える地層の porosity や permeability の変化、反応速度に多くの影響を及ぼす鉱物の表面積の変化などを取り入れる必要がある。このよ

うな効果を取り入れることにより、あるセルの中で溶解する鉱物が完全に溶けてなくなってしまったり、地層の porosity や permeability あるいは、反応する鉱物の表面積が著しく変化した場合、ある path が閉じて新しい reaction path が生じることなどがシミュレーションできる可能性がある。さらに、微量元素の挙動を考える場合、鉱物の表面などへの微量元素の吸着も考慮に入れる必要がある。このようにして、今後、モデルを天然に近づけることが可能と思われる。また、物理的過程と化学的過程をカップリングさせシミュレーションにおいても、モデルを作る人間の天然でどの様な化学反応が起きているのかという視点の違いによって、計算される結果が異なってくることが大いに予測される。

## 参考文献

Auge J. J. and Brimhall G.H. Geochemical modeling of steady state fluid flow and chemical reaction during supergene enrichment of Porphyry Copper Deposits: Econ. Geol., 84, pp. 506-528 (1989)

Chiba H. Attainment of solution and gas equilibrium in Japanese geothermal systems: Geochem. Jour. 25, pp. 335-355 (1991)

Ellis A. J. and Mahon W. A. J. Chemistry and Geothermal Systems: Academic Press, Inc. 392p. (1977)

Lasaga A. C. Rate laws of chemical reactions: Reviews in Mineralogy, 8, pp. 1-68 (1981)

Nordstrom and Munoz Geochemical Thermodynamics: The Benjamin/Cummings Publishing Co., Inc. 477p. (1985)

Potter R. W. Computer modeling in low temperature geochemistry: Rev. Geophys. Space Phys., 17, pp. 850-860 (1979)

Stumm W. and Morgan J. J. Aquatic Chemistry: John Wiley and Sons, Inc. 7, 80p. (1981)

Wolery T. J. EQ3/6NR - Status and future development: in "Proc. of the Workshop Geochemical modeling". 10-19, Lawrence Livermore National Lab. (1986)

Wood B. J. and Walther J. V. Rates of hydrothermal reactions: Science, 222, pp. 413-415 (1983)

## 付一2 化学的シミュレーション及び人工知能技術に関する用語

ここでは、「1. 化学的シミュレーションの調査」及び「2. 人工知能技術の調査」に記載した内容のうち、基礎的あるいは特色的な用語について、文章中に説明を付していない用語の説明を行う。

「1. 化学的シミュレーションの調査」での用語

用語	ページ	用語の意味
超格子	17	基本的な結晶が複数重なりあって形成する構造体。
規則相	17	化合物において規則的に元素が配置している部分。
被覆度	17	金属表面にアルカリ原子などの異物質が吸着している割合。
仕事関数	17	金属表面から、電子1個を表面のすぐ外側に取り出すために必要な最小エネルギー。
ガーニーモデル	17	金属表面に、アルカリ原子を吸着させた時の仕事関数の変化を算出する際に用いるモデル。
反応素過程	17	化学反応の要素となる過程をさす。最も簡単な素過程は、分子内解離過程「A B → A + B」である。
金属クラスター	17	同種または異種の金属が複数（数個から数千個程度）集まって形成する構造単位。
単価錯体	18	1つの錯体をさす。複数の錯体が集まった時には、特別の構造をとるのが通常である。
遷移モーメント	18	原子・分子・原子核などにおいて、光などの電磁波の吸収・放出を量子力学的に取り扱う場合の状態の遷移形態をいう。
振動子強度	18	原子・分子・原子核などにおいて、光などの電磁波との大きさを励起エネルギー（振動数）の関数として求めたもの。
ペンローズ格子	18	36ページに示す実線の格子。
裏格子	19	36ページに示す破線の格子。
エピタキシー (エピタキシャル成長)	20	一つの結晶を他の結晶の表面上で一定方向へ成長させる方式
動径分布関数	20	気体・液体・非結晶固体などにおいて、1つの原子（または分子）を中心として、他の原子の位置の統計的分布を表す関数。中心からの距離として表示する。
$\alpha$ ヘリックス	21	$\alpha$ ヘリックスとは、タンパク質の立体構造のことをさし、他に $\beta$ ヘリックスがある。 $\alpha$ ヘリックスは、3.6残基で一回転するラセン構造が一般的である。

用語	ページ	用語の意味
配座解析	21	不齊炭素原子（4個の別々の原子または基と結合している分子内にある炭素原子）に結合する原子や原子団（基）の不正炭素の回りで取る空間を、位置と分子エネルギーの関係から解析することをさす。
イオンチャンネル	21	数ある反応の内、イオンとの反応を起こす反応機構を指す。
21残基	21	タンパク質の構成要素ポリペプチドに、アミノ基（-NH <sub>2</sub> ）が必ずありこれをアミノ残基という。この21残基とは21個のアミノ残基をさす。
MD法	22	分子動力学法の略称。
ネマチック液晶相	22	等方性の液晶を急速に冷却した時にみられる糸状の液晶の状態。
ノックオン原子	39	高速荷電粒子によって弾性散乱に近い衝突を起こした際にたたき出された原子。
ドープ	40	半導体や液晶等に少量の不純物を混入させること。
受容体理論	45	細胞内部で細胞外からくる刺激物を、受容体と呼ばれるタンパク質等により認識する理論。
スマイル表記法	46	化学構造の表記方式の一種。（固有名詞）

「2. 人工知能技術の調査」での用語

用語	ページ	用語の意味
パターン認識	54	自動的な手段で形状、輪郭などを識別すること。 文字、図形、音声波形などのパターン情報をコンピュータで認識して、約束された概念、カテゴリーとして文字シンボル、図形の幾何学的表示、画像中の対象の固定、音韻や単語の識別などを行う。
自己組織化	65	あるシステムが、自分で自分の構造を変えることによりその機能を変化させること。
ROM	80	read-only memory 内容があらかじめ固定されていて、それを読み出して使うことを目的とする記憶装置。
RDB	87	relational data base IBM社のCoddの提案した関係モデルに基づくデータベースデータを、記録されている物理的な構造から独立して取り扱い、データ項目の組は関係の概念に従って定義される。
OCR	104	optical character reader 機械により印字された文字や手書き文字を光学的手段により読み取る装置。
アクチュエータ	107	操作量を変位、速度、力などの実際の物理量に変換する能動的な装置のこと（例えばモータや電磁弁）。
マニピュレータ	107	放射性物質など危険物を扱う時に、危険を避けるため厚いガラス越しから操作する人工の腕。
シールドマシン	123	トンネルを掘るための円筒型の掘削機
カンバン方式	125	トヨタ自動車がジャスト・イン・タイムに生産することを目指して確立した生産管理方式。 「必要なときに必要な量だけ生産する」ことを基本理念とし、後工程が使用した部品の種類・量を前工程に伝えるために用いられた指図票を「かんばん」と呼んだことによる。