

本資料は2002年02月28日付けて

登録区分変更する。 [東海事業所技術情報室]

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)

平成3年度 成果概要

(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

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松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

電話：029-282-1122(代表)
ファックス：029-282-7980
電子メール：jserv@jnc.go.jp

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

この資料は、
転載、引用等

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

では、複製、
管理して下

さい。また今

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

区分変更

公開資料

PNC 7
PJ1561 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）

伊加利勝悟*，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、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



PNC 71561 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 Reseach 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	7
1.2.1 電子レベル手法	7
1.2.2 原子・分子レベル手法	8
1.3 利用形態の概要	10
1.3.1 データベース	10
1.3.2 コンピュータ計算技術	10
1.4 適用事例	12
1.4.1 データベース	12
1.4.2 コンピュータ計算技術	12
1.5 課題と展望	13
1.5.1 現状での課題	13
1.5.2 今後の展望	15
2. 人工知能技術の調査	17
2.1 概要	17
2.1.1 人工知能技術と関連した技術	17
2.1.2 研究開発の経緯	17
2.2 基礎技術	18
2.2.1 知識	18
2.2.2 推論	22
2.2.3 ファジィ理論	23
2.2.4 ニューロ	25

2.2.5 A I (E S) , ファジィ, ニューロの比較	28
2.3 言語	31
2.3.1 L i s p系	31
2.3.2 P r o l o g系	31
2.3.3 オブジェクト指向系	32
2.3.4 C言語系	32
2.4 マシン	32
2.4.1 ワークステーション	32
2.4.2 第五世代コンピュータ	33
2.4.3 ファジィコンピュータ	33
2.4.4 ニューロコンピュータ	34
2.5 ツール	39
2.5.1 エキスパートシステム構築ツール	39
2.5.2 ファジィツール	41
2.5.3 ニューロツール	41
2.6 応用分野	41
2.6.1 エキスパートシステム	41
2.6.2 理解システム	42
2.6.3 機械翻訳	44
2.6.4 知能ロボット	45
2.6.5 その他	46
2.7 実用化状況	49
2.7.1 概論	49
2.7.2 エキスパートシステム	49
2.7.3 ファジィシステム	54
2.7.4 ニューロシステム	56
2.7.5 その他	57
2.8 課題と展望	59
2.8.1 課題	59
2.8.2 今後の展望	60

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	62
3.1 概論	62
3.2 地球化学プロセス研究の現状	63
3.2.1 地熱分野での現状	63
3.2.2 地球化学シミュレーションコードの現状	64
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	65
3.2.4 CHEMBALプロジェクト	67
3.3 地球化学データベースの現状と動向	68
3.4 連成モデル研究の現状と動向	69
3.5 まとめ	71
あとがき	73
謝辞	74

図 目 次

図—1	標準的なエキスパートシステム基本機能構成	19
図—2	A I (E S) , ニューロ, ファジィの各技術の融合	29
図—3	A I 導入事業所の導入システム利用状況	49
図—4	エキスパートシステムの利用状況	50
図—5	物質移動問題での化学反応の分類	69

表 目 次

表—1	A I の研究開発経緯	18
表—2	初期のころの海外の代表的なエキスパートシステム	18
表—3	ファジィ理論の研究開発の経緯	26
表—4	ニューラルネットワーク技術の研究開発の経緯	26
表—5	A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較	28
表—6	第五世代コンピュータの研究開発経緯	35
表—7	ファジィコンピュータの国内の研究開発の経緯	36
表—8	ニューロコンピュータの国内の研究開発の経緯	37
表—9	化学種組成計算プログラム	65
表—10	E Q 3 / 6 の構成	65

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

This is a blank page

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摘出に資するため、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。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

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。

(2) データ利用手法

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

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了し、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不向きであり、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

1.3.1 データベース

(1) 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として、イギリスのケンブリッジ大学で構築したデータベース（CCSD）やドイツで構築したデータベース（ICSD）等がある。また、タンパク質結晶構造データベースとして、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）がある。

(2) 化合物物性データベース

熱物性データベースとしては、熱物性や安全性に関するデータの他、物性を推算するためのデータを構築したものがある。これらについては、種々のシステムが開発されている。

(3) 合成反応データベース

この種のデータベースとしては、化合物の反応例を収録してこれから合成経路を検索できるようにしたシステムが開発されている。また、最適な合成経路や原材料を検索するシステムもある。

(4) スペクトルデータベース

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に模擬させる構造推定システムとよばれるシステムがある。

1.3.2 コンピュータ計算技術

(1) 理論的手法

(a) 電子レベル手法

電子レベル手法のなかでは、分子軌道法によるものが多い。その適用対象として

は次のようなものがあげられる。

- ①材料設計
- ②金属表面へのアルカリ吸着
- ③固体表面の反応
- ④触媒設計
- ⑤色素の分子設計
- ⑥銅酸化物のクラスター

また、エネルギー・バンド法としては、アモルファスカーボンの構造解析に用いた例が見られる。

(b) 原子・分子レベル手法

モンテカルロ法を用いたものとしては、構造解析に利用した例の他、相互作用問題への適用が見られる。

分子力学法の例は多くはないが、薬物の分子設計や人工タンパク質の設計に用いた例がある。

原子・分子レベル手法としては、分子動力学法を用いた例は多く、構造解析、分子挙動、不均一系のなどに適用されている。

(2) データ利用手法

データ利用手法は、分子設計と材料設計の2つの分野にて開発が進められているが、開発されているシステムの一例を次にあげる。

- a)分子設計
 - ①A I M B : 分子の3次元構造モデル構築
 - ②C A S E : 定量的構造活性相関分析
 - ③合成設計・反応予測システム

- b)材料設計
 - ①超伝導材料設計支援システム
 - ②ヘテロ接合設計支援システム

1.4 適用事例

1.4.1 データベース

データベースの例として日本では、日本原子力研究所におけるJAMPなる材料データベースがある。これは、原子炉材料を対象としており、材料に関する実験結果をデータベース化したものである。データベース化することにより、例えば環境助長割れの主な原因が材料および力学条件にあることが分かり、材料破壊の原因究明の一助となる等、材料工学の分野にて有効である。

1.4.2 コンピュータ計算技術

(1) 理論的手法

(a) 電子レベル手法

分子軌道法の例としては、色素の分子設計に適用したものがある。これは、色素の電子状態は、分子軌道が π 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したものである。

(b) 原子・分子レベル手法

モンテカルロ法の例としては、水溶液中での水和や相互作用を計算した例がある。水は単分子としては単純なものであるが、分子集団として示す性質は複雑であり、このような問題にモンテカルロ法が適している。この例では、純粋中とメタン分子1個を含む水溶液での水素結合について比較しているが、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。

分子力学法の例としては、人工タンパク質の設計に適用した例がある。人工タンパク質の設計の手順については、まだ確立されていないが、分子力学法を用いて設計している。具体的には、まず望みの構造やアミノ酸配列を決め、次に分子力学法にて構造の最適化を行い評価するというものである。

分子動力学法の例としては、ガラスの構造解析を行った例がある。分子動力学法

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、このような場合に有効である。この例では、レーザーガラスの母体組成を検討対象とし、組成の違いによる発光スペクトルのピークの相違から検討を行っている。

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・化合物特性に関する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-band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・バンド法については、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必要がある。

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。

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

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ード

ト大学で知識工学の概念を導入したESが開発され、医療診断システムMYCINなどが発表されると、AIはES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AI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。

表一1にAI研究の主な動きを、表一2に初期のころの代表的なESを示す。

2.2 基礎技術

AI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ESを図一1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

AI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。

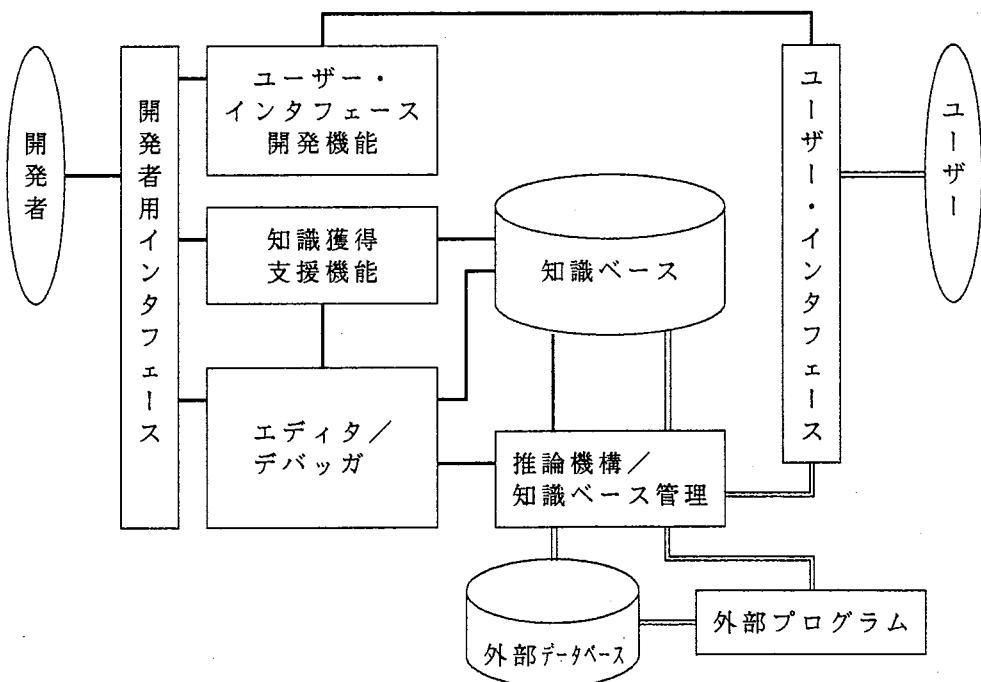
表 - 1 A I の研究開発経緯

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

表 - 2 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



(注) ——; 開発者からの関係
 = = =; エンド・ユーザーからの関係

図-1 標準的なエキスパートシステムの基本機能構成

(a) 意味のネットワーク (Semantic Network)

物、事実、概念などがある関係（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。

(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。

(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。

(2) 知識獲得

領域専門家などからの知識獲得はAI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

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 (IF で示される事実) から処理部 (THEN 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 E S 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)

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、これを用いた推論を事例ベース推論と呼ぶ。

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

ジイ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E S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。E S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 (L I F E : Laboratory for International Fuzzy Engineering Research)が設立されている。

表-3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

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。

(2) ファジィ推論

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 ニューロン

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。

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-4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、巡回セールスマントラベル問題(n個の都市を一人のセールスマントラベル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している。

(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

表-3 ファジイ理論の研究開発の経緯

年	ファジイ理論の研究開発経緯
1965年	Zadeh教授によるファジイ集合の提唱
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 ファジイ推論を応用
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イ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	国際ファジイシステム学会(IFSA: International Fuzzy Systems Association) 設立
1989年	日本ファジイ学会設立
1989年	国際ファジイ工学研究所(LIFE)設立

表-4 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	ペ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	ペ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

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、シミュレーテッドアニーリング（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途中で、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せることにより、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

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いる。A I (E S), ファジィ, 及びニューロの各技術の比較を表-5 に示す。

また、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-2）

表-5 A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較

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

表 - 5 A I (E S), ファジィ, ニューロ技術の比較 (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

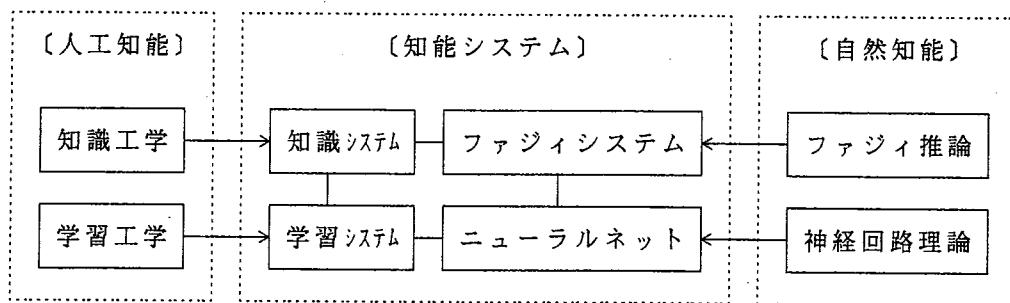


図 - 2 A I (E S), ファジィ, ニューロの各技術の融合

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PROLOGなどが使用されている。また、C言語やP L / I, FORTRAN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）で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AIツールには、C言語で記述されたものが多い。

代表的なAI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。

AI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（ICOT）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

LISPやPROLOGなどのAI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 α (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

「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-6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P I M (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。

2.4.3 ファジィコンピュータ

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。

ディ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ィジタル技術（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、従来のディ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-7にファジィコンピュータの国内の研究開発状況を示す。

2.4.4 ニューロコンピュータ

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-8に示す。

表 - 6 第五世代コンピュータの研究開発経緯

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 D e l t a 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 (O S) 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 K a p p a 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 (O S) 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ふ。

「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 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論理アーキテクチュア設計支援システム「R O D I N」

表-7

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	ファジィプロセッサを開発 (戸貝, 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 家電分野, 計測器などに適用 (富士通)
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.

表-8 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($2\mu\text{m}$ Bi-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(ニューロン)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	世界初のニューロン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ザブレイ、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ニューロン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造を持つ。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	ディ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。

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

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。

(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A G E であ

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

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対応する

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。

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。

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。

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、演繹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E S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E S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など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。

(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、チエス用の言語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) 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、計的な音韻モデルHMM (Hidden Marakov Model) と拡張L R構文解析アルゴリズム (Generalized LR Parsing Algorithm) を結合したもので、HMM-L R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ロードが開発した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。

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（E D R）では、1986年度から9年計画で電子化辞書プロジェクトを開始した。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。

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。E C (欧州共同体) では1982年から多言語自動翻訳システム E U R O T R A 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。

2.6.4 知能ロボット

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、E S等を備えたロボットの開発が進みつつある。

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・装駆式移動機構、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。

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。コスモ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られている。

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)

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発揮するものである。

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)

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CAI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 A I 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）が1989年12月に実施したA I 利用動向アンケート調査の結果(有効回答事業所数1,844)によると、最近の利用動向として、以下のような特徴が挙げられており、A I 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
- ②開発事例の大半はE S
- 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A I 専用機から汎用機へ

A I を導入している 379事業所の導入システムの内訳及びA I システム別の利用状況を図-3 に示す。

2.7.2 エキスパートシステム

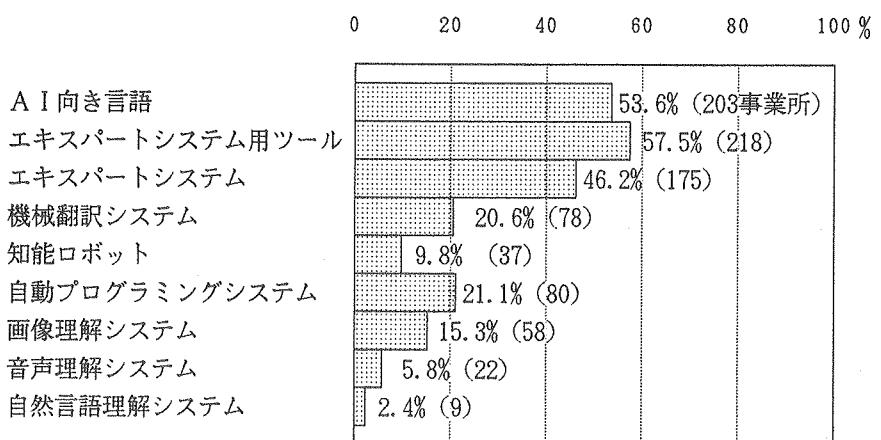
(1) エキスパートシステムの利用動向

E S 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を図-4 に示す。

(2) 産業分野別エキスパートシステム利用状況

(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。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。

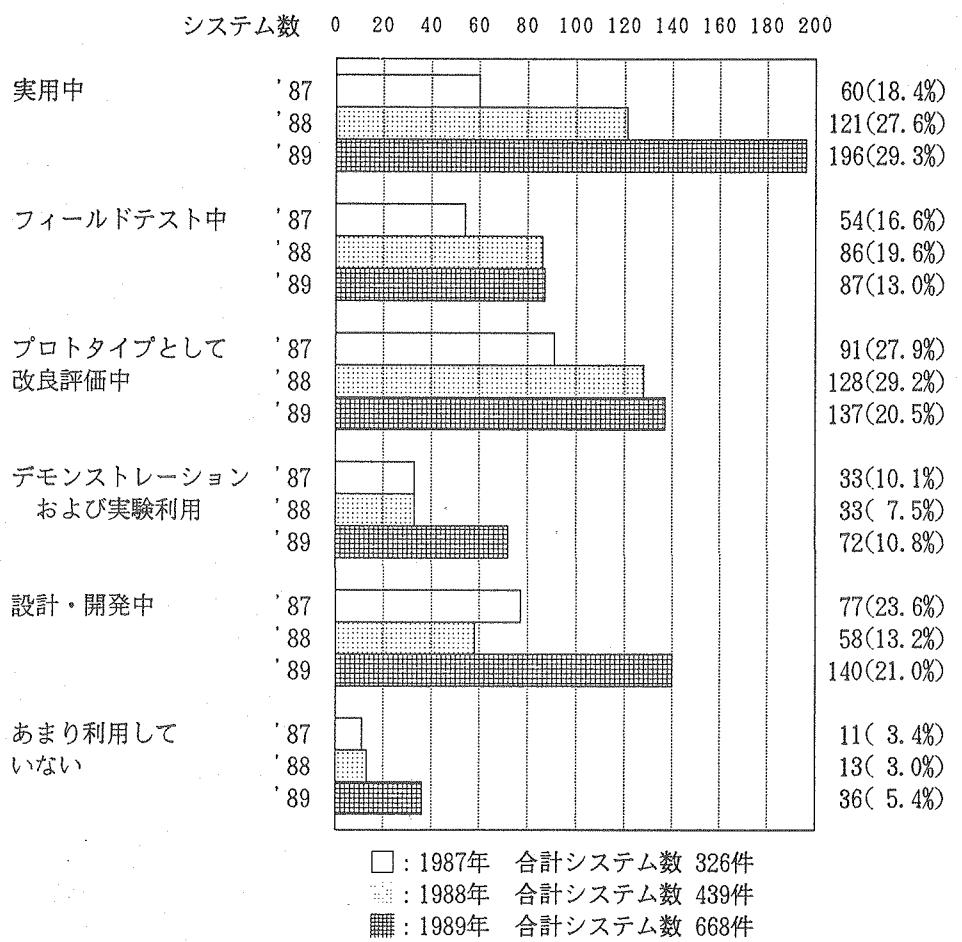


(a) A I 導入事業所(379事業所) のシステム導入状況 (1989年調査)

利用システム	導入事業所数	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%	8%	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%
音声理解システム	22	54.5%	40.9%	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-3 A I 導入事業所の導入システム利用状況



(a) エキスパートシステムの開発・利用段階別内訳

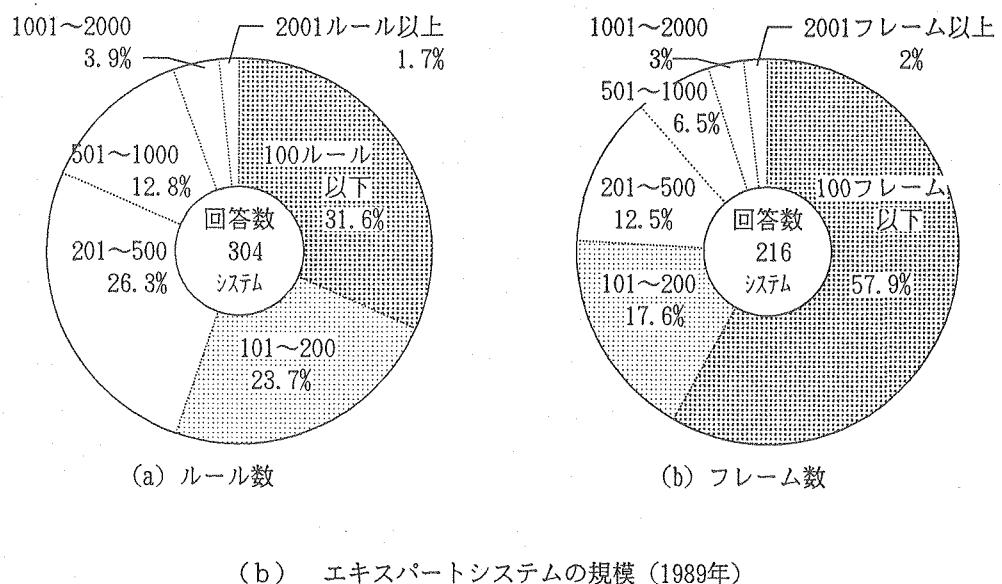
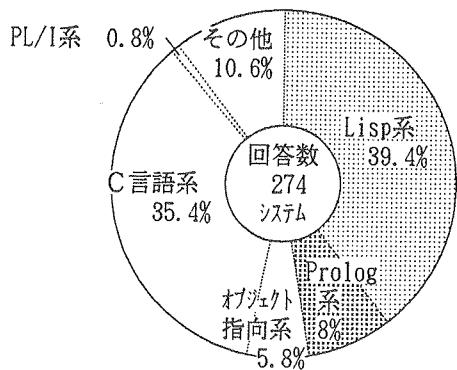
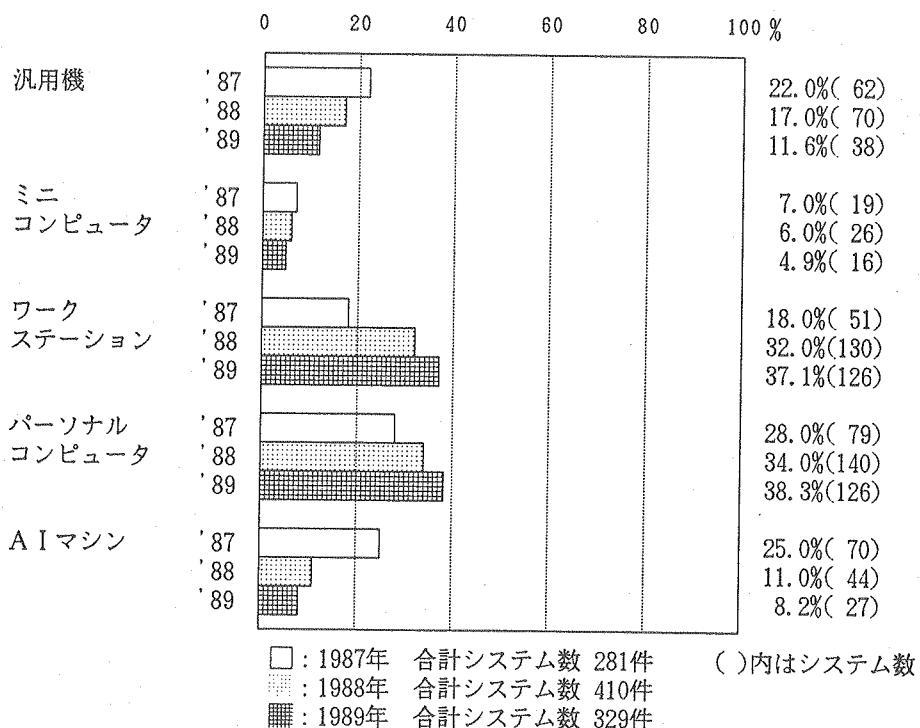


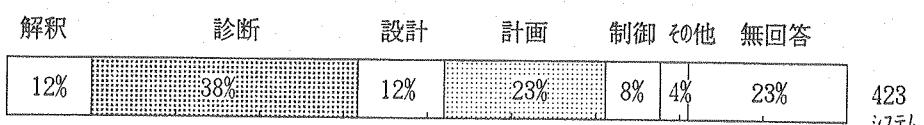
図-4 エキスパートシステムの利用状況



(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)



(e) エキスパートシステムの対象領域 (1989年)

図-4 エキスパートシステムの利用状況 (つづき)

(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。

(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。

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。

(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。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。

(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。

(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ES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。

(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ニーズが大きく、早くからAIを導入した業種のひとつである。

(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ES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。

(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。

(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。コンピュータ利用技術は進んでいるが、E S の実用化はあまり進んでいない。

重工・造船各社は、船舶事業以外に原動機、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 E S の種類も多い。

(k) 製紙・窯業土石業における利用状況

製紙業では裁断計画支援が、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。

(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 E S 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。

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、E S 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。

(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P I D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。

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。

2.7.4 ニューロシステム

(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、

巡回セールスマントークン問題がある。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。ES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ESに移植して利用している。

2.7.5 その他

(1) 機械翻訳システム

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。

(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。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。

(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C A I

知的C A I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C A I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。

2.8 課題と展望

2.8.1 課題

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習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ない。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フェースが求められる。グラフィックインタ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ヒューマンインターフェース：人にやさしいインターフェース
- 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

が考えられている。

自然言語処理技術に対しては、(株)日本電子化辞書研究所 (EDR : 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 (LIFE : 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A I技術の進展のためには、これまで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、水一岩相互作用のシミュレーションが行なわれる。CEC 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、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。

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。

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、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できるとなる。

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。

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。

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

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示す。

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—9である。

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っており、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。表—10に、EQ3/6 の構成を示す。

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。

(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

表一 9 化学種組成計算プログラム

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 calculatoe language
SIMPLE	Chiba (1985)	46	BASIC

表一 10 EQ3/6 の構成

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

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ため、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。

(3) 吸着／遅延係数データ

Kd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。

(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。

(5) 塩分および高イオン強度の影響

種々の研究結果によると、イオン強度の増加が 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

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

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。

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。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。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。

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、データを理解しやすく整理する工夫もなされている。

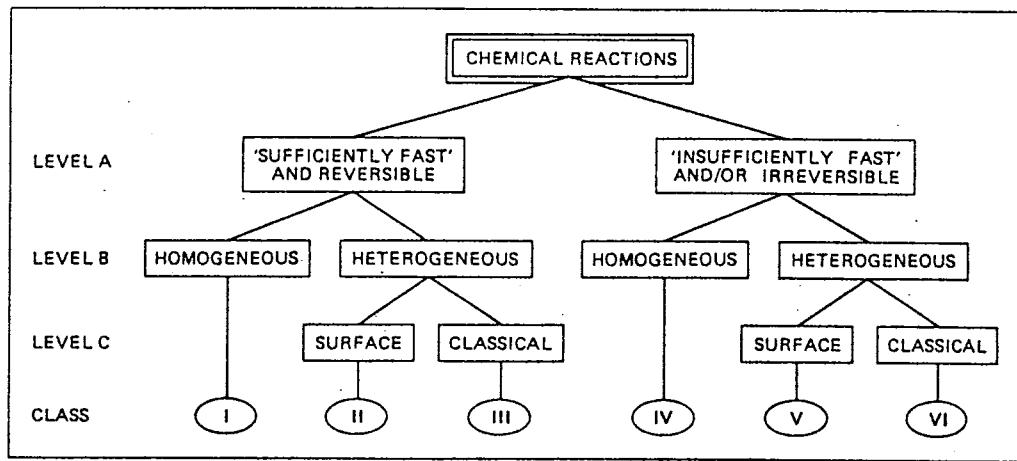
3.4 連成モデル研究の現状と動向

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、図一5のようになる。

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。



図—5

物質移行問題での化学反応の分類

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ろう。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。

This is a blank page

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イ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。