

# 無機分析手法エキスパートシステムの試作

永 山 和 幸  
 田 畑 智 一  
 戸 井 田 良 晴  
 岡 田 忠 司

## Expert System for Analysis of Inorganic Elements

Kazuyuki NAGAYAMA  
 Tomokazu TABATA  
 Yoshiharu TOIDA  
 Tadashi OKADA

Today there are so many methods available for sample preparation, especially in dissolving samples for analysis of inorganic elements, which make the selection of the optimum scheme of manipulation and reagents to be a complicated and laborious task.

An expert system has been developed to assist analysts in the selection of optimum method. By using this system, it becomes easier to select the method for preparing samples and decide the method for operation.

### 1. 緒 言

分析業務においては、個々の試料ごとに測定機器や前処理方法を選択したり、或いは、数種の分析機器で得られたスペクトルから物質の構造を求める際などに、様々な「知識」が利用されている。

例えば、無機分析では試料の主成分組成や形態などの情報から、試料に最適な溶液化の方法を検討する際に、「ノウハウ」と呼ばれる明確化されていない知識が利用されている。

これら「ノウハウ」は、各研究者が長年の経験を通じて作り上げた貴重な財産である。しかし、この「知識」は研究者各個人が所有し、明文化されておらず、研究者間の共通な財産となっていない。しかもそれらは、系統的にまとめられていないことが多い。その結果、過去に実施した分析より得られた「知識」を有効に利用することが出来ない。

これら、専門家が長期に渡って蓄積してきた知識を継承するため、何らかの形で明文化することが必要である。

また、現有の「知識」を解析し、不十分な部分を明確化して次にどのような知識が必要かを判断することにより、知識をより深化し、或いは新規に開発するための目標を設定することが出来る。そのためには、知識を系統的に明確化することが必須である。

更に、今後危険な作業や力仕事を伴う作業、またルーチン的な分析操作から人間を開放し、ロボット化していく必要がある。このために分析手法の標準化、定型化を図るため、現在の分析手法及び知識を系統的にまとめることが必須となってくる。

一般に、知識をまとめる方法としては「マニュアル」を利用する事が多い。分析業務において、個々の試料を分析するためのマニュアルは、内容的には短い試料ごとに異なるため、多数必要となる。この結果、目的とするものを検索することは困難であり、更に、現在どのよ

うな分析知識が不足しているか、どのような分析手法が共通に使用出来るか、といった業務解析を行うことは不可能である。

近年、コンピュータを利用してこのような知識をデータベース化し、更に解析可能にするエキスパートシステム化の技術が、容易に利用出来るようになった。

我々は、このエキスパートシステム化技術を用い、知識の構造が比較的単純であり、かつ整理がなされている無機分析の知識をデータベース化することにした。

その結果、分析の初心者が容易に前処理方法を選択することを可能にする「無機分析手法エキスパートシステム」を構築することが出来たので以下に報告する。

## 2. 無機分析の業務内容

現在、我々は依頼分析業務をおおむね以下の順で実施している。

- 1) 分析依頼を受け付け、試料を入手する。その際、合成条件や試料履歴などの情報を収集する。
- 2) 分析試料や分析目的に応じて、有機分析、無機分析、固体構造解析の三つに分類し、各専門家に受け渡す。
- 3) 収集した情報を基に、どの分析機器を使用するか、そのためにはどのように前処理すべきかを検討する。
- 4) 決定した方法に沿って前処理操作を行う。
- 5) 機器で測定する。
- 6) データを解析する。
- 7) 報告書を作成する。

この中で1)、2)及び7)の段階は各分析部門とも共通であり、また、4)及び5)の段階は実際の操作に過ぎず、定型化されている。

3)の段階では使用機器と前処理方法の両方を決定する。

有機分析では、質量分析装置、赤外吸光分析装置及び核磁気共鳴分析装置が主な使用装置であり、この内のどれを用いるかは、分析目的に応じて、ほぼ一義的に決定されてしまう。試料の前処理は溶媒の種類を決めたり、クロマトなどの分離操作を行う程度で、あまり選択の余地が無い。

一方、無機分析では、主に試料中に含まれる無機元素の定性、定量分析を、原子吸光分析装置、誘導結合プラズマ (ICP) 発光分析装置及び ICP 質量分析装置を用いて行うが、この場合どの分析機器を用いるかは、試料が溶液化されていれば測定する元素とそのおよその濃度範囲により、ほぼ決まっている。

それに対して試料を溶液化する前処理では、試料の組

成や測定する元素の種類、試料の形状 (粉末か、塊か) などにより多くの方法がある。従ってその選択には非常に多くの経験、知識を必要とするため、この知識をまとめる必要性が高い。

しかもこの知識は、数は多いが基本的には既知であるものの中から選択するものであり、知識の構造としては比較的単純で、まとめ易い。

6)のデータ解析において、有機分析では複雑な知識が要求される。例えば、プロトン NMR のスペクトルでは、あるプロトンのピークが、自分の結合している炭素の隣の炭素について水素の個数によって分裂するなど、ピーク間で互いに影響し合っている。このように、「隣」が変わればスペクトルも変わるために、常に同一な方法でデータを解析することは出来ず、この知識をまとめて定型化することは困難である。

一方、無機分析のデータ解析は、簡単な四則演算を行って試料中の求める元素の含量を算出するだけの定型業務である。

即ち、無機分析業務では、前述の3)の段階の知識さえ明確化出来れば、業務全体を定型化することが出来るため、その効果が非常に大きい。

更に、無機分析の場合、実際の前処理操作では、溶解するために強酸・強塩基など薬傷の恐れのある薬品を利用したり、高温での熔融を行うなどの危険な作業が多い。

このため、現在の分析作業を標準化し、作業の自動化、ロボット化を行い、上記のような人間に及ぼす各種の危険性を減少させるためにも、業務内容を解析することが重要である。

以上の理由により、無機分析における、試料に最適な前処理方法を決定する知識を明確化することにした。

## 3. エキスパートシステム

(本報告書の中で用いられる各語句の意味については付録参照)

エキスパートシステムとは、『ある特定の分野の専門家 (エキスパート) が持つ知識を、「規則」や「事実」の組み合わせからなる知識データベースに変換してコンピュータに保存し、その分野の初心者であるユーザーがそれと対話しながら、その「規則」や「事実」を利用し、専門家に匹敵した知識で問題に対する答えを得ることが出来るシステム』と定義される<sup>1)</sup>。

例えば、自動車が故障した場合、経験豊かな技師は、初めはエンジンが悪いのか、駆動伝達部が悪いのか、電気系統が悪いのかなど大きく絞り込み、次いで、エンジ

ンなら燃料関係が悪いのか、シリンダー関係が悪いのか、燃料関係なら燃料パイプは大丈夫か、燃料は入っているかなどの点検項目を順次チェックして原因を特定する。

引き続き、その故障を修理するためにはどのような部品が必要であり、その部品はどのように入手すれば良いか、更には、部品を入手出来るのは何日後か、修理のためにはどんな機械が必要か、現在何台の自動車が修理待ちであり、各々何日まで修理しなければならないかといった条件を考慮し、その修理計画を立案する。

エキスパートシステムは、この技師の持つ知識をデータベース化し、技師に代わって修理工にチェックの指示を与え、チェック結果の入力に応じて次の指示を出す、ということを繰り返す、最後にその原因を見出す。更に、必要に応じてその対処のための計画などを作り出すようなシステムである。

ところで、一般にコンピュータでこのようなシステムを構築する場合は、次のような手順で作業が実施される。

1) 何についてのシステムを構築するのか、どのようなユーザーを対象とするのか、最終的に求めたい結論を何にするか、といった問題領域を決定する。

〈例1〉技師自身が自動車の故障原因を特定するのを助けるシステムにする。

〈例2〉自動車だけでなく二輪車も対象とする。

〈例3〉修理方法まで含める。

2) 求めたい結論に到達するためには、どのような知識が必要か、或いはシステムをどう利用させるか、などのシステム設計を実施する。

〈例〉自動車を目の前にしてチェックしながら使うのか、チェックシートに記入するのか。

3) 専門家が実際に何を、どのように実施しているか、といったデータを収集し、まとめる。

〈例1〉自動車故障の症状としては、まずエンジン、車輪、ヘッドライトの三つに大別すれば良い。

〈例2〉エンジンがかからない場合には、次にセル・モータが回るかどうかのチェックを行う。

4) プログラミングを行う。

5) 動作確認テストを実施する。

6) デバッグを行う。

7) 運用を開始する。

実際のシステム構築に当たり、プログラマーは、システム設計業務の初めに、専門家の行っている仕事の内容について調査する。この時、専門家は、そのシステムが完成するまではそれがどのように使用されるか見当がつかず、プログラマーの質問に対してどのように答えれば

良いか分からない。逆にプログラマーは、専門家の知識の全てを聞き出せないままシステム設計を行うことになる。この結果、出来上がるシステムは、専門家の持つ知識の一部しか含まれないもの、また場合によっては全くかけ離れたものとなる可能性がある。

エキスパートシェルと呼ばれるソフトを用いてシステムを構築すると、このような問題を解決することが出来る。一般に、エキスパートシステムを構築するためには、FORTRAN など手続き型言語を用いる方法と、エキスパートシェルと呼ばれるソフトを利用する方法がある。このソフトは、知識を検索したり、それによってデータを変換するプログラム部分や、マン・マシンインターフェース部分、ヘルプ機能などのプログラム部分が既に出来上がっており、知識を入力するだけでシステムを構築することが出来るソフトである。

Fig. 1 に、エキスパートシェルと通常の手続き型言語によるプログラム方法の違いを示した。

知識は、通常「もし〇〇ならば××である。そうでなければ～」という形で表現される。手続き型言語でこれを表現しようとする、if then else というコマンドの集まりで表現される。実際のプログラムでは、これらがプログラムの内部に組み込まれてしまい、大量の知識をプログラミングすると、何箇所にも何重にも渡って、if then else のループが出来る。その結果、知識の内容を変更するために、そのつながりがどうなっているかを辿ったり、修正のために特定の知識の存在箇所を知ることが非常に困難になる。

それに対して、エキスパートシェルでは知識をデータとして取り扱うため、プログラムとは完全に分離されている。従って、知識データだけを独立して、容易に修正、追加することが出来る。

更に、ユーザーや求める結論の変更など、問題領域の決定にまで遡った変更さえ、データの修正と同様に簡単に実施できる。

このエキスパートシェルには、どのような形式の問題に対応するかによって、『診断・処方型』『計画立案型』と呼ばれる二種類のものがある<sup>1)</sup>。

『診断・処方型』とは、前述の例で自動車の故障原因を特定する場合のように、既知のものの中から条件に適したものを選択する型の問題に適している。

分析の知識では、以下のものがこれに相当する。

【分析元素や測定深さ、測定面積に応じた、表面分析機器の選択】

【無機分析における試料溶液化方法の選択】

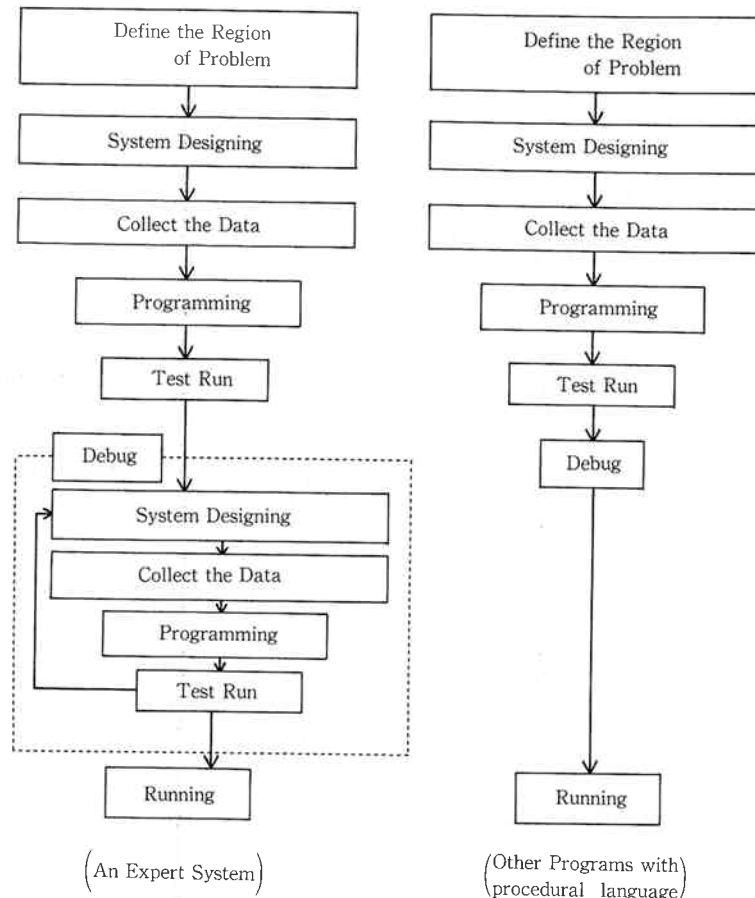


Fig. 1 The differences of the method of programming between expert system and others.

【有機分析における混合物中の特定物質の抽出方法の選択】

【高速液体クロマトグラフィーやガスクロマトグラフィー部門におけるカラムや検出器の選択<sup>2)</sup>】

【プラントで用いる耐食材料の選択】

【電子線マイクロアナライザーでの元素の同定<sup>3)</sup>】

『計画立案型』とは、前述の例で故障原因より修理計画を立案する場合のように、各種の制限条件や制限となるデータを満足するスケジュールを立案する型の問題を対象としている。

分析業務では、機器や人間のスケジュール管理がこれに相当し、時間ではないが、以下の知識がこれと類似した考え方を利用する。

【各種の機器より得られるスペクトルを総合的に解釈して行う有機化合物の構造解析<sup>4),5)</sup>】

【質量分析での分子の質量値を満たす元素の組の算出】

【高速液体クロマトグラフィーの溶離条件の探索】

【四軸X線回折を用いた単結晶の構造解析】

この二種類の知識の中で、『診断・処方型』に相当する知識は、市販のエキスパートシェルを利用して容易に

構築できる。しかし『計画立案型』類似の知識のシステム化は、大型の計算機とエキスパートシステム構築方法に習熟した専門家が重要な難しい技術である。

無機分析の知識は、前述のように『診断・処方型』であり、本システムも市販の『診断・処方型』エキスパートシェルを利用した。

#### 4. 「無機分析手法エキスパートシステム」

##### (1) 問題領域

本システムは、ユーザーに無機分析の初心者を選び、最終的には、試料に最適な前処理方法を与えてくれるようなシステムを構築することにした。

##### (2) システム設計

本システムは、分析目的やどのような試料であるかのシステムの質問に初心者自身が答を入力するだけで、結論である前処理方法を提示するようにした。

また、ヘルプ機能を最大限に利用し、ユーザーが質問に答え易いように質問の意図を示した。更に、ユーザーがコンピュータ端末を離れて“実験室で”試料の前処理操作を行えるよう、結論として得られた操作方法を、マ

ニユアルとして印刷するようにした。

〔3〕 データの構造

無機分析の担当者にとのようにして試料を前処理するかという手順についてインタビューを行った。その結果、以下で示す様々な判断基準、即ち「知識」が得られた。

この中で、例えば、

『もし、試料が硝酸で分解するものであり、かつ硝酸に溶解する元素を測定するならば、硝酸溶液を試料とせよ。そうでないなら沈澱物をアルカリ熔融したものを試料とせよ。』

『もし、試料がナトリウムや塩素などの揮発性元素を含有しており、かつそれを定量するならば、湿式灰化する必要があるが、そうでなければ乾式灰化でよい。』

『もし、主成分がジルコニアやアルミナならば、加圧酸分解によらないと溶解しない。』

といったように、実験方法や便覧に記載された公知の内容は、「学問的知識」と言われる。

一方、

『もし、100 ppb 以下のナトリウムを定量するならば、不純物の少ないA社製の硫酸を用いて溶解する必要があるが、そうでなければB社製でも良い。』

『もし、試料が無機物であり、かつ何に溶解するか不明であるならば、①塩酸、②王水、③弗酸、……のいずれかの方法で溶解する。』

といったものは、研究者の長年の経験から得られるものであり、「ノウハウ」と呼ばれる。

このようにして得られた前処理操作の流れをまとめたのが、Fig. 2 である。

このように、図を基にして専門家より知識を引き出せば、分岐の先が無いなどの知識の漏れを無くすことが出来、また、Fig. 2 の形に従って系統的にまとめられる<sup>6)</sup>。

この操作手順概略図の各分岐部分で行っている判断、即ち知識を、エキスパートシェルで取り扱える形にしたものが「規則」である。

この一つの例を示す。

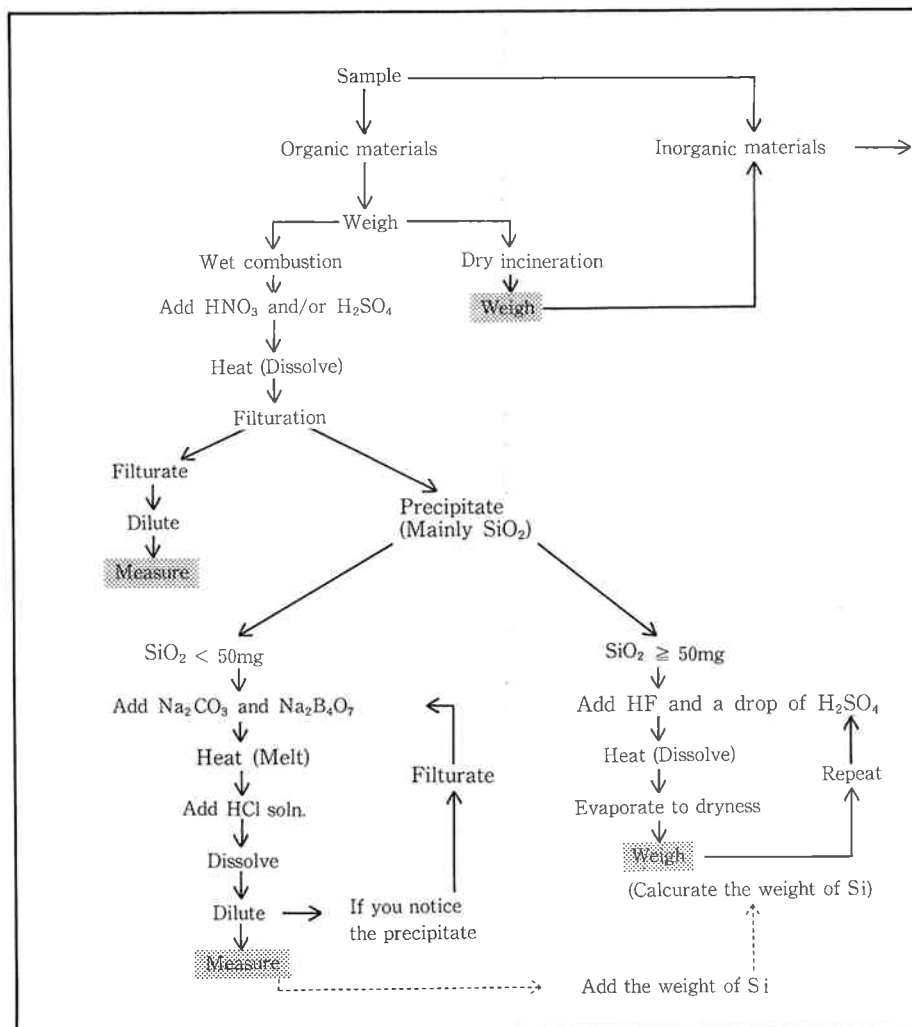


Fig. 2 An example of schematic diagram of the manipulation of sample preparation.

『もし、主成分が不明で、  
 かつ試料が有機物を含む試料で、  
 かつ塩素を含む試料で、

かつ試料中には、Ba, Pb が含まれると思われ、  
 かつ目的成分が、過塩素酸、硫酸等の酸に溶ける  
 ならば 前処理方法 2 を用いる。』

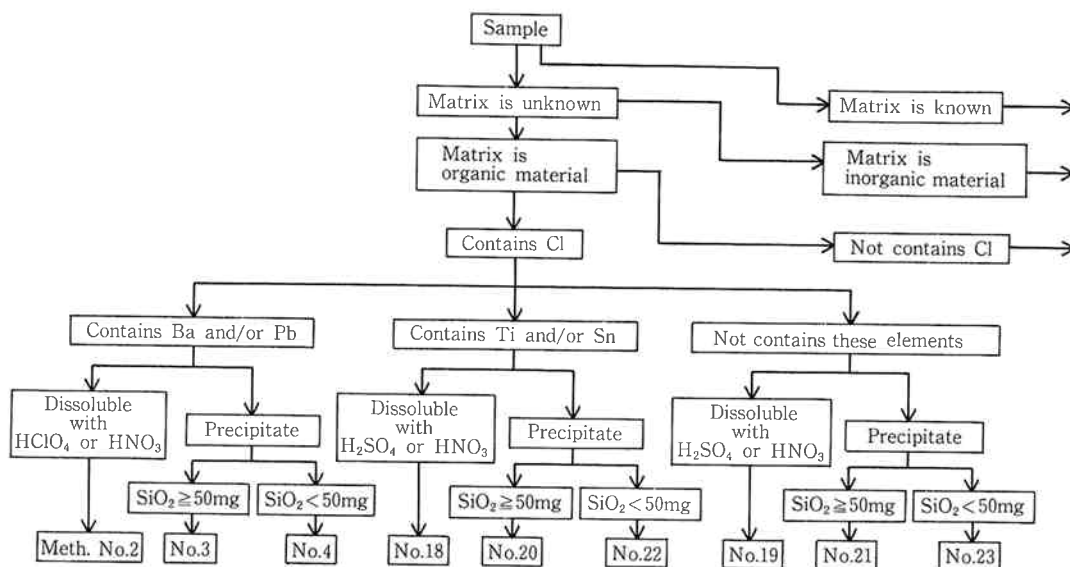


Fig. 3 The tree of selection.

This diagram shows the knowledge how to analyze inorganic elements.

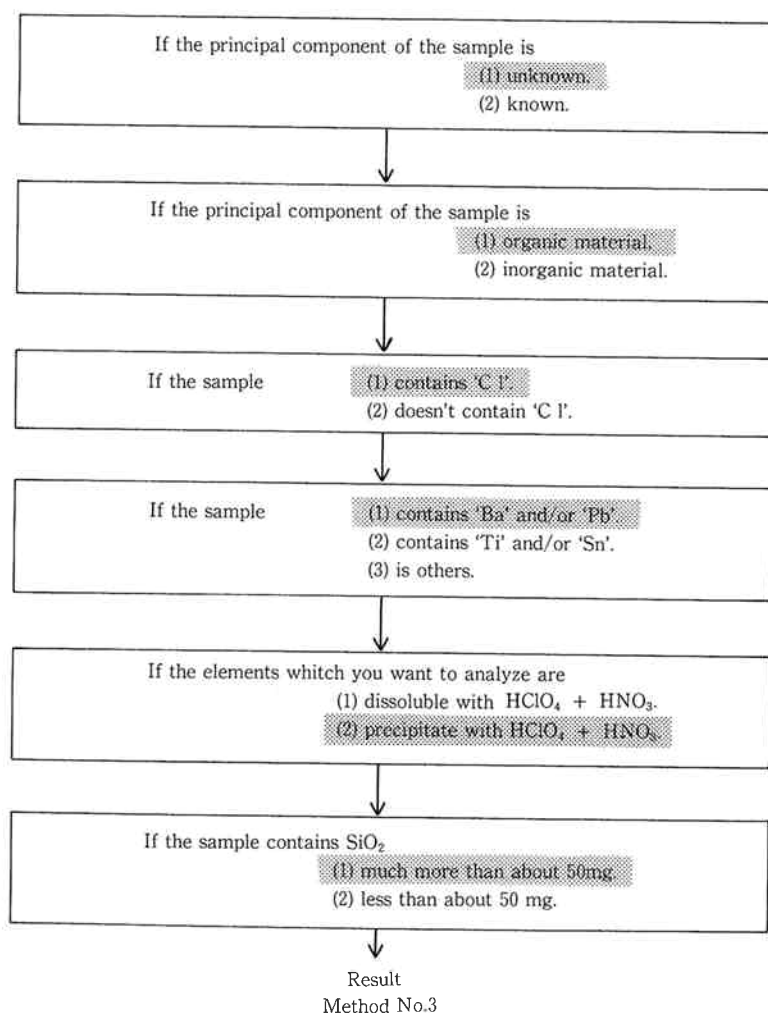


Fig. 4 An example of a series of questions.

この規則の最後の行に示された「方法2」とは、規則が示した条件に対応した試料の前処理方法であり、この規則の「結論」と呼ばれる。

このように Fig. 2 の操作手順の各分岐部分を「規則」として書き直すと、エキスパートシステムの分野で「ツリー構造図」、或いは「選択の木」と呼ばれる、判断の体系図が出来上がる。この図の一つの枝が「規則」を表わし、また各枝先には「結論」が示される。

今回構築した「無機分析手法エキスパートシステム」は、全部で67個の規則を含んでおり、また、結論として51通りの試料前処理方法が組み込んである。

本システムのツリー構造図の一部を Fig. 3 に示す。

#### (4) 本システム利用法

ユーザーである初心者が、業務の中で、どのようにして本システムを利用するかについて、以下に示す。

1) 分析依頼を受け付け、試料を入手する。その際、主

成分、試料形態など出来るだけ多くの情報を依頼元より収集する。

2) 入手した情報に基づいて予想される、元素のおおよその濃度範囲より、測定機器を選択する。

3) 本システムを起動させると、画面上に、Fig. 4 の一番上に示したような質問が表示される。試料の形態などの情報に基づいてユーザーがどちらかを選択すると、それに応じた次の質問が画面上に現れる。

例えば、Fig. 4 の一連の質問に対し、網かけで示した方を順次選択すると、結論としての「方法3」に到達する。このように、システムは対話形式になっている。最後に、Fig. 5 のような操作手順のフロー図を印刷してシステムは停止する。尚、フロー図には、必要に応じて標準試料調製及び検量線作成方法についても記載してある。

4) 得られたフローに基づいて、必要な試薬や器具を用

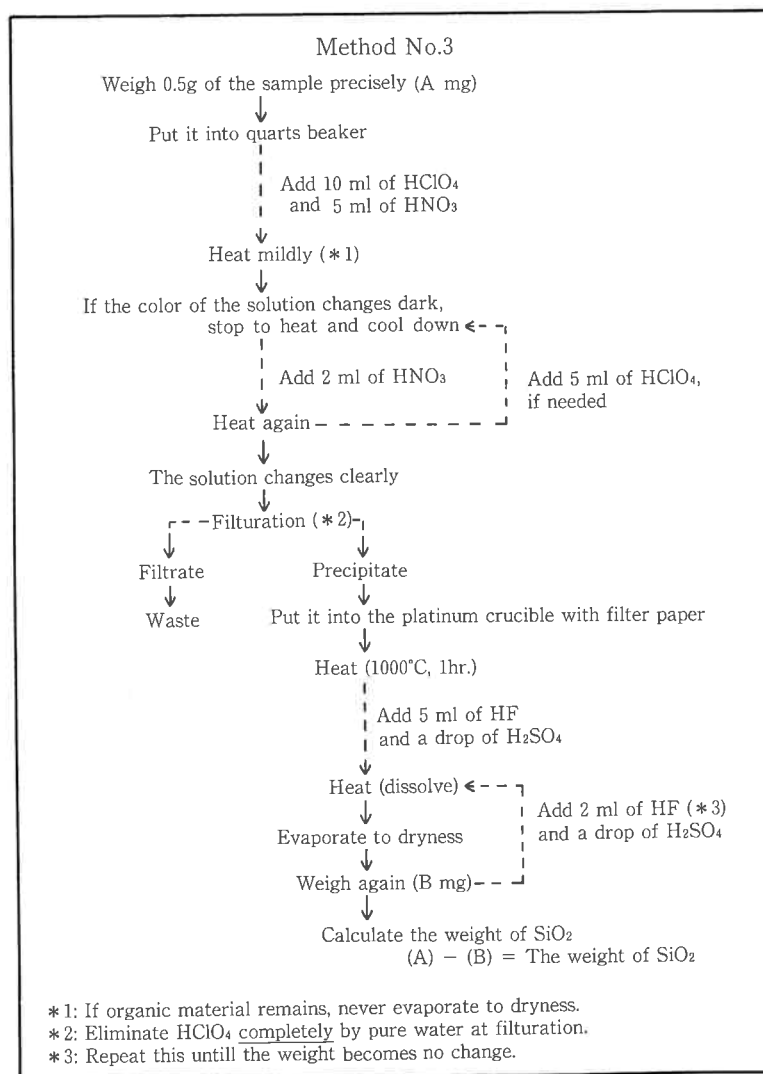


Fig. 5 An example of the flow chart of manipulation of sample preparation which is printed out by use of this system.

- 意し、前処理操作を実施する。
- 5) 機器で測定する。標準試料も機器で測定し、測定結果より検量線を作成する。
  - 6) 検量線上に試料での測定値をプロットして濃度を求め、四則演算により試料中の求める元素の含量を算出する。
  - 7) 報告書を作成する。

以上のように、本エキスパートシステムを用いることで、無機分析において最も困難であった試料ごとに最適な前処理方法を選択する部分が簡単になり、ほぼ定型的業務になった。

## 5. 結 言

今回、試料ごとに最適な前処理方法を選択する際の知識をまとめ、未熟練者に対してその方法を教授してくれる、「無機分析手法エキスパートシステム」を構築することが出来た。

これにより、無機分析において最も困難であった、試料ごとに最適な前処理方法を選択する部分が簡単になり、ほぼ定型的業務になった。

更に、知識を系統的に明確化したために、容易に解析出来るようになった。

今後は、知識を解析して不十分な部分を明確化することにより新規知識の導入を図る。また業務をロボット化するために、操作内容自身の見直しを実施していく。

## 文 献

- 1) Paul Harmon, David King; “エキスパートシステムズ”, (1986), 諏訪 基監訳 (サイエンス社)
- 2) L. Buydens, A. Peeters, D. L. Massart; *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 5, 1 (1988)
- 3) J. F. Konopka; *Microbeam Analysis*, 23rd (1988)
- 4) J. Zupan, M. Razinger, S. Bohanec, M. Novic, M. Tusar, L. Lah; *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 4, 4 (1988)
- 5) S. Sasaki, I. Fujiwara, H. Abe, T. Yamasaki; *Anal. Chim. Acta*, 122 (1980)
- 6) A. R. de Monchy, A. R. Forster, J. R. Arretteig, Lan Le, S. N. Deming; *Anal. Chem.*, 60, 23 (1988)

### 使用ソフト

- 1) 「日本語エキスパートシェル『創玄』」エー・アイ・ソフト社

2) 「印刷ユーティリティ PRT Version 4.32」,  
Copyright (C) 1989, 1990 by Hisamichi  
Toyoshima

### 付録：語句の定義

エキスパートシステムの分野で用いられる各語句の意味は、社会慣習的に用いられているのとは異なるため、本報告書での意味をここで説明する。

#### デ ー タ :

実験などから得られる数値やテキスト。

例えば、反応温度 18.5°C の『18.5』といった数値や『反応温度』という文字。

#### 情 報 :

それを基に解析を行うことが出来るデータの集合体。例えば、一次反応  $A \rightarrow B + C$  に対して、 $A$  の初濃度を  $[A]_0$ 、時間  $t$  における  $A$  の濃度を  $[A]_t$  とし、『縦軸に  $\{\ln([A]_0/[A]_0 - [A]_t)\}$  を、横軸に時間をとってプロットし、更に反応温度 18.5°C などのテキストを加えたグラフ』、また『原料の各成分の融点や密度などをまとめた表』など

#### 知 識 :

水素と酸素が反応すると水になる、また溶液の温度が高ければより多くの物質を溶かすことが出来るなど、その分野全般で認められた学問的理論、及び、微量成分の分析を行う場合は高純度試薬を用いるなど、個人が経験により得たノウハウを言う。更にこれを用いて判断や推論を行う際の基準。コンピュータで判断や推論を行う場合には、これらを「規則」または「事実」の二種類の形態を用いて表現する。

〈規則〉：『もし○○ならば△△。そうでなければ××』という形で知識を表現したもの。人間は、これと類似した思考を行っており、これを組み合わせることで、知識を容易に規則化出来る。

ここで○○の部分を変数、△△や××を「その規則の結論」と呼ぶ。

規則には、『もし  $\{\ln([A]_0/[A]_0 - [A]_t)\}$  v.s.  $\{t\}$  のグラフが直線ならば一次反応である。そうでなければ二次以上の反応である』とか『もし一次反応ならば、速度定数  $k$  は、式  $k = (1/t) * \{\ln([A]_0/[A]_0 - [A]_t)\}$  より求められる。』といった「解析」方法に関するもの、『もし有機物試料ならば灰化せよ。そうでなければ省略して良い。』



といった、実験方法や操作手順などに関するものなどがある。

規則には『もし〇〇の可能性があるならば…』『もし〇〇ならば、たいていは△△である。』という判定基準が曖昧なもの、また、『もし〇〇かつ□□ならば…』『もし〇〇または□□ならば…』のように複数の判定基準がつく場合もある。

〈事実〉：『〇〇は××である。』というように、場合分けを含まず、断定形を採る知識を表現したもの。これには、『これは、反応速度定数を求めるためのグラフである。』『一次反応の  $\{\ln([A]_0/[A]_0 - [A]_t)\}$  v.s.  $\{t\}$  のグラフの傾きは、反応定数  $k$  である。』など「解析」方法に関するものや、『中和点ならば、pH は7である。』といった実験方法や操作手順に関するものなどがある。

解 析：

データの集合である情報を、知識を用いて加工し、新たな数値やテキストデータとすること。

例えば数値データの内で最大のものを取り出したり、一次反応の場合、 $\{\ln([A]_0/[A]_0 - [A]_t)\}$  v.s.  $\{t\}$  のグラフの傾きより反応定数「 $k$ 」を算出すること。

またデータを加工する場合に、情報の重複部分（例えば同じ温度での測定）や不十分な部分（例えば、データ点のない高温部での測定）などを明示することや、情報の不十分な部分のデータを得ることを指示するなどのテキストを創り出すこと。

知識工学(者)：

専門家の保有する「知識」を「規則」や「事実」に分解し、更にそれらを分類、再編成してコンピュータの言語に変換する技術。即ちエキスパートシステムを構築する技術。(またはそれを行う人。)

専 門 家：

ある特定の分野における技術、専門「知識」を修得し、保有している人。エキスパートとも呼ばれる。

ユ ー ザ ー：

システムを使用する、或いは使用すると想定された対象となる人々。エキスパートシステムに蓄積された「知識」を使用して、実際に業務を遂行する人。



著 者

氏名 永山和幸  
Kazuyuki NAGAYAMA  
入社 昭和62年4月1日  
所属 研究本部  
化学研究所  
第四研究室



著 者

氏名 田畑智一  
Tomokazu TABATA  
入社 昭和46年2月1日  
所属 研究本部  
化学研究所  
第四研究室  
副主任研究員



著 者

氏名 戸井田良晴  
Yoshiharu TOIDA  
入社 昭和63年1月11日  
所属 研究本部  
化学研究所  
第四研究室  
主任研究員



著 者

氏名 岡田忠司  
Tadashi OKADA  
入社 昭和46年4月6日  
所属 研究本部  
化学研究所  
第四研究室  
第四研究室長