

TM-0139

メタプログラミングによる仮説生成
システムの試作について

鶴巻宏治 (NTT)

國藤 進、古川康一 (ICOT)

October, 1985

©1985, ICOT

ICOT

Mita Kokusai Bldg. 21F
4-28 Mita 1-Chome
Minato-ku Tokyo 108 Japan

(03) 456-3191~5
Telex ICOT J32964

Institute for New Generation Computer Technology

メタプログラミングによる 仮説生成システムの試作について Hypothesis Generating System Using Meta-programming Techniques

* 鎌倉宏治, * 國藤 進, * 古川康一

* NTT電気通信研究所, * ICOT

[あらまし] 本仮説生成システムは、与えられた観測事象を説明する仮説を、既知の事実から次々と生成し、最も妥当な仮説をユーザとのインタラクションによって選択していくシステムである。本システムの実現手段としてはPrologによるメタ・プログラミング技法を用いている。また、具体的アプリケーションとしては、未知の化学物質の既知の化学物質との反応からの同定問題を採り上げている。

1. はじめに

人間の問題解決・推論過程の記号論的本質は、演繹(Deduction)・帰納(Induction)・発想(Abduction) [Kunifuji 85-1, Arikawa 85] にあると言われる。従って、知識情報処理システムのプロトタイプ構築にあたって、演繹・帰納のみならず発想の過程を支援する機能をプロトタイプ化してみることは、極めて重要な研究課題であると言える。しかしながら、従来、知識情報処理システムあるいは知識ベースシステムの研究で採り上げられていた研究課題は、主として演繹あるいは帰納による推論であり、発想に連なる推論機構研究はほとんど行なわれていない。そこで本稿では、発想的推論に関する基礎研究として、特に仮説生成という人間の最も良く使用する推論パターンを採り上げ、その論理プログラミングによる試作研究を通じて、発想的推論のフレームワークを明らかにすることを主題に、種々の実験研究を行なったので報告する。

さて、人間の問題解決・推論過程の本質を記号論的にみると、図1に見られるように、未知の観測事象を説明する仮説を生成する過程(発想)、得られた仮説から論理的に導出される帰結を得る過程(演繹)、およびそのようにして得られた帰結をなんらかの実験によって検証し、最初に生成した仮説を検定する過程(帰納)からなる。周知のように、演繹とは大前提と小前提とから帰結を求める推論過程である。帰納とは小前提と帰結(という個別知識)より大前提(という一般知識)を求める推論過程である。これに対して、発想とは帰結(という観測事象)と大前提(という既知の事実)とから小前提(という観測事象を説明し得る未知の仮説)を求める推論過程である。従って、例えば図1の発想的推論スキーマは、次のようなスキーマとして抽象的に把握できる。

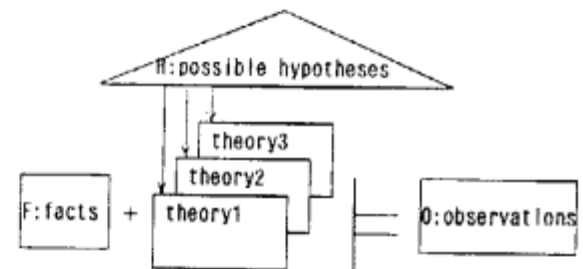
B (Observation)(1)
A) B (Fact)(2)
∴ A (Hypothesis)(3)

本稿では、Poole らの理論構築システム Theorist [Poole 85] のフレームワークを参考にしつつ、与えられた観測された事実を説明する仮説を生成し検定していくシステムの構築法に関する考察結果を述べる。

2. システムの基本設計

今回試作したシステムの概要を紹介する。本システムの目的は、観測された事象からそれを説明する仮説を生成することである。仮説生成のプリミティブな部分のメカニズムは

Poole らのシステム Theorist [Poole 85] を参考にしている。そこで、以下に Theorist の枠組みの概観を示す。Theorist においては、表現言語を一階述語論理の節形式表現としている。また、知識は、可能な仮説集合(H: possible hypotheses), 知識ベース(F: facts), 観測事象(O: observations)の3つにモジュール化されており、図2に示されているようにそれぞれは次のような意味を持つ。図2において、+記号は和集合を、“A ⊢ B”はAを真とするモデルにおいてBが真であることを意味する。



F与えられた世界に関する知識の集合
H可能な仮説の集合(観測事象の説明は、この要素を見出すことからなる。)
O観測事象

但し、FとHの和集合は無矛盾であると仮定する。

図2 Theoristのフレームワーク

この仮説生成メカニズムを図3のように解釈すれば、前述の発想的推論のスキーマの特殊例とみなすことができる。すなわち、観測空間Oに与えられた観測事象と、知識空間Fのある知識の結論部とに、なんらかの対応関係を見出し、その対応関係に基づいて、見いだされた知識を観測空間Oに導入する。そして、観測空間Oにおける観測事象に対する原因が、仮説空間H中のある仮説を観測空間Oに

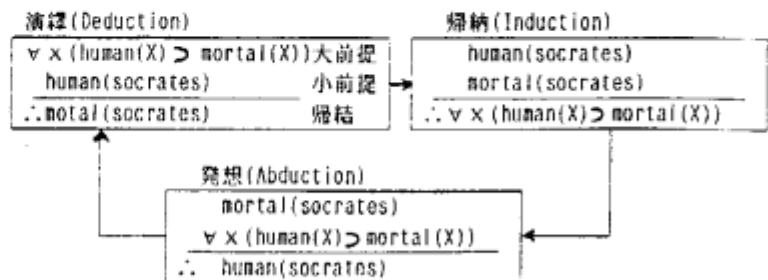


図1 演繹・帰納・発想的推論のスキーマ

導入することで説明できるかどうかを確認する。

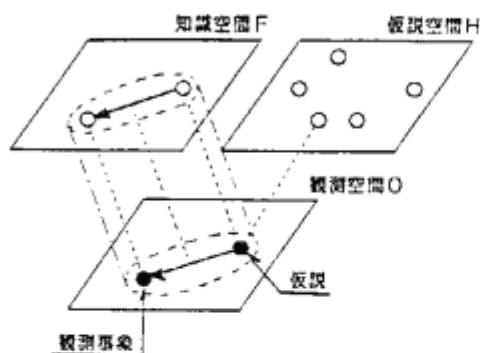


図3 仮説生成のメカニズム

上記のスキーマに基づくシステムの構築を考える。このシステムは、知識空間Fと仮説空間Hを持つ。本システムは、新たな観測事象が観測空間Oに与えられたとき、それを真となしめる仮説を仮説空間Hから見つけ出すという処理を行なうものである。

一般に、ある仮説をたてて観測された事象を説明しようと試みたとき、仮説は複数考えられる可能性があるということは容易に想像がつく。このとき、それらは、

- より単純明快な仮説
- より確実な仮説
- より詳細な仮説

など様々な評価基準によって順序づけされると考えられる。この評価基準を明確にするためには、知識表現の分野で一般に重要視されている階層構造[Kitakami 85]の概念を仮説空間にも導入して、仮説間に上位下位関係を設定することにより、知識ベースだけでなく仮説空間も階層的に構造化することが必要になる。

3. システムの特徴

3.1 システムの機能

筆者らが試作したシステムの機能的な特徴は

- a) 複数の仮説が生成可能であるとき、仮説間に、ある価値基準に基づいた優先順位（すなわちある種の評価基準）を与え、それに基づき仮説を選択する機構を導入する；
- b) 仮説の検定作業を含むユーザとのインタラクションにより、可能な限り精密な仮説を提示する機構を導入することである。

与えられた知識ベースFにおいて、ある観測事象Oを説明する仮説は一般に複数個存在する。このとき、それらの間に優先順位を設定することが、本システムの特徴の一つである。優先順位を決定するための基本的な原理として一般にいわれているものに、

原理1) より単純な仮説を優先する。(診断の原理)

原理2) より多くの事実を演繹する仮説を優先する。

(Popperの原理[Popper 65])

がある。この他にもいくつか考えられるが、優先順位決定のための基本原理は、対象とする領域に依存してそれぞれ異なるものである。本システムの目標は、様々な評価基準に対して優先順位を決定できる統一的な枠組みを提供することである。

本稿では、後述のように化学物質の同定問題を例題とし、上の2つの基本原理を採用した。

観測事象を説明する仮説は図3の仮説空間Hの要素の連言で表現される。本システムでは、連言の数を仮説の長さとしている。

3.2 システムの構成

システムの持つ知識は、以下に示すように3つにモジュール化されている。

- 1) 仮説空間
- 2) 階層構造
- 3) 知識ベース

1) の仮説空間は次のようなPrologの節のアサーションとして与えられる。

```
hyp(Class, A).
```

ここで、Class は、階層構造における位置づけを示すためのクラス名である。Aには素命題が代入され、例えば、
hyp(Cu_ion, exist_Cu_ion(X)).
のように表現される。

2) の階層構造は、仮説空間をis_a階層の概念によって構造化するものであり、

```
is_a(Class, SuperClass).
```

のように記述する。Class, SuperClassには仮説空間のクラス名が代入され、例えば、次のようになる。

```
is_a(Cu_ion, transition_element_ion).
```

3) の知識ベースは、Prologのルール形の知識の集合であり、下のような形で与えられる。

```
property(Class, (A1 :- A2)).
```

Class は、この知識が属するクラス名であって、例えば
property(Cu_ion, (precip_with_halogen_ion(X) :-
exist_Cu_ion(X))).

のように記述する。ここに簡単のため、A2は素命題とする。

知識ベースと仮説空間は階層構造を共有することによって密接に関連している。

3.3 システムの処理

システムが行う処理の概略を図4に示す。

システムは原理1に対応して、まず与えられた観測事象（一般には複数）を説明できる長さ1の仮説を生成する。留意すべき点は、ここで生成される仮説は、“観測事象を説明し得る範囲で最も抽象的なものである”ということである。

具体例で説明する。仮説空間と知識ベースが図5のように与えられているとする。例えば、観測事象

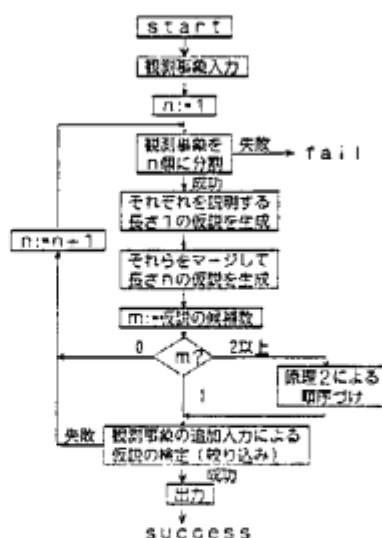


図4 処理のフロー

obs1: 水溶液XがSイオンと反応して沈澱を作った。
を説明する妥当な仮説は、

hyp1-1: Xは遷移元素を含む。

である。階層構造の持つ継承機能により「Xは鉛を含む」ことも可能性としては考えられるが、与えられた観測事象から直接言えるのは「Xは遷移元素を含む」ことだけであり、ここではhyp1-1のみを妥当な仮説とする。

検定プロセスでは、生成した仮説の裏づけをとるためのマンマシン・インタラクションが行なわれる。仮説が正しいと仮定したとき新たに観測される筈の事象について、システムがユーザに問い合わせる。問い合わせ全てについてユーザの確認が得られたとき、その仮説が正しいとする。

長さ1の仮説がみつからないか、もしみつかったも検定プロセスで「否定」されたならば、次に長さ2の仮説を立てて説明を試みる。観測事象を2つに分けてそれぞれを説明する仮説を生成する。例えば観測事象
obs2: 水溶液Xは SO_4 、OH、Sイオンのいずれとも反応して沈澱を作った。

が長さ1の仮説では説明できなければ、観測事象を2つに分ける。その結果、「 (SO_4, OH) 、S」の組からは、
hyp2-1: Xはカルシウムと遷移元素を含む。

また、「 SO_4 、 (OH, S) 」の組からは、
hyp2-2: Xはアルカリ土類と遷移元素を含む。

という2つの妥当な仮説が生成される。このときhyp2-1を仮定したときに観測される筈の事象の集合は、hyp2-2よりも、カルシウム固有の性質の分だけSuperSetになっている筈である。従って前述の原理2に対応してhyp2-1を優先し、hyp2-2よりも先に検定を行う。

仮説空間H

- 水溶液Xは陽イオンを含む。
- ├ 水溶液Xは水素イオンを含む。
- ├ 水溶液Xは金属イオンを含む。
- ├ 水溶液Xはアルカリ金属イオンを含む。
- ├ 水溶液Xはアルカリ土類金属イオンを含む。
- ├ 水溶液Xはカルシウムイオンを含む。
- ├ 水溶液Xは遷移元素イオンを含む。
- ├ 水溶液Xは鉛イオンを含む。
- └ etc.

知識ベースF

- 1) アルカリ土類イオンは硫酸イオンと沈澱を作る；
- 2) アルカリ土類イオンは炭酸イオンと沈澱を作る；
- 3) カルシウムイオンは水酸基イオンと沈澱を作る；
- 4) 遷移元素イオンは水酸基イオンと沈澱を作る；
- 5) 遷移元素イオンは炭酸イオンと沈澱を作る；
- 6) 遷移元素イオンはイオウイオンと沈澱を作る；
- 7) 鉛イオンは硫酸イオンと沈澱を作る；
- etc.

図5 仮説空間と知識ベース

4. インプリメンテーション

本システムは、構造化された知識ベースと仮説空間を用い、メタプログラミングの技法[Kunifuji 85-2]によって仮説を生成するシステムである。図6は、観測された事象列を単独で説明でき、かつ最も抽象的な仮説を見つけるexplain述語のプログラムである。述語explain

nは3引数である。第1引数は、説明されるべきゴールのリストであり、最初にexplain述語を呼ぶときは観測事象のリストを代入する。第2引数は、その時点までの観測事象を全て説明できる仮説のクラス名が代入されている。最初にexplain述語を呼ぶときは仮説空間のうち最も上位にある仮説のクラスを代入しておく。explain述語が成功したとき、第3引数には、全ての観測事象を説明し得る最も上位の仮説のクラス名が代入されて返ってくる。

```
1) explain([], Class, Class).
2) explain([G:Gr], Top, Exp) :-
    property(Top, (G:-B)),
    list_trans(B, Bl),
    explain(Bl, Top, Next),
    explain(Gr, Next, Exp).
3) explain([G:Gr], Top, Exp) :-
    inherit_property(Top, (G:-B)),
    list_trans(B, Bl),
    explain(Bl, Top, Next),
    explain(Gr, Next, Exp).
4) explain([G:Gr], Top, Exp) :-
    hyp(Top, G),
    explain(Gr, Top, Exp).
5) explain([G:Gr], Top, Exp) :-
    inherit_hyp(Top, G),
    explain(Gr, Top, Exp).
6) explain(Goals, Top, Exp) :-
    is_a(Low, Top),
    explain(Goals, Low, Exp).
```

図6 3引数explain述語

- 1) 終了条件；
- 2) 次に説明すべき観測事象と現在注目しているクラス内のルールのHead部がマッチングした場合、そのルールのBody部を説明する；
- 3) 次に説明すべき観測事象と現在注目しているクラスの上位クラスのルールのHead部がマッチングした場合、そのルールのBody部を説明する；
- 4) 次に説明すべき観測事象が現在注目しているクラスの仮説で説明できる場合、その観測事象の説明を終了する；
- 5) 次に説明すべき観測事象が現在注目しているクラスの上位クラスの仮説で説明できる場合、その観測事象の説明を終了する；
- 6) 次に説明すべき観測事象が上の2)～5)で処理できなかった場合、現在注目しているクラスの一つ下位のクラスの仮説で説明することを試みる。

5. 実行例

本システムを開イオンの診断過程に応用した例を示す。仮説空間と知識ベースには図5に示した例を用いる

図7は、観測事象として、

- 1) Xに炭酸イオンを加えると沈澱を生じた；
 - 2) Xに硫酸イオンを加えると沈澱を生じた。
- という二つの観測事象からX中に含まれるイオンを推測する例である。

図中*の部分は、1), 2)を説明できる長さ1のすべての仮説であり、適切な仮説の候補となるものである。ここでは、「鉛イオン」、「アルカリ土類金属イオン」のいずれかが含まれているという仮説を生成している。

システムは、これらの候補の検定をするために質問をする。これに対し、ユーザはyes かnoで答える。このマンマシン・インタラクションによって得られた情報により、シ

システムは仮説を絞り込んでいく。

図7の例では、「ハロゲンイオンで沈澱を生じるか」という質問に対してはnoと答え、「リン酸イオンで沈澱を生ずるか」という質問にyesと答えている。システムは、これらの情報から判断を行ない、「Xに存在するイオンはアルカリ土類イオンである」という仮説を最終的に提示している。

```
! ?- start.
```

```
observations: precip_CO3_ion(x),
               precip_SO4_ion(x).
```

Tentative Possible Explanations for the observations

```
Pb ;          ----- *
alkaline_earths ----- *
```

```
Is "precip_halogen_ion(x)" right (y/n) ?
>> n
```

```
Is "precip_PO4_ion(x)" right (y/n) ?
>> y
```

```
verified_explanation :
    alkaline_earths
```

yes

図7 実行例(その1)

図8の例では、以下の3つが観測事実となっている。

- 1) Xは水酸基イオンで沈澱を作った;
- 2) Xはイオウイオンで沈澱を作った;
- 3) Xは硫酸イオンで沈澱を作った。

これを説明する長さ1の仮説は「鉛イオン」だけであるが、この仮説は「ハロゲンイオンで沈澱を作るか」という質問にユーザがnoと答えることによって否定されている。システムは次に長さ2の仮説を2種類生成している。これらのうち「カルシウムと遷移元素」の方を前述の原理2に従って「アルカリ土類と遷移元素」よりも先に検定する。ここではユーザが、「炎色反応で橙色を呈するか」、「リン酸イオンで沈澱を生ずるか」、「炭酸イオンで沈澱を生ずるか」の質問にすべてyesと答えているため、システムは「Xに存在するイオンはカルシウムと遷移元素である」という仮説を提示している。

```
! ?- start.
```

```
observations: precip_OH_ion(x),
               precip_S_ion(x),
               precip_SO4_ion(x).
```

Tentative Possible Explanations for the observations

```
Pb
```

```
Is "precip_halogen_ion(x)" right (y/n) ?
>> n
```

Tentative Possible Explanations for the observations

```
Ca & transition_element ;
transition_element & alkaline_earths
```

```
Is "flame_color_orange(x)" right (y/n) ?
>> y
```

```
Is "precip_PO4_ion(x)" right (y/n) ?
>> y
```

```
Is "precip_CO3_ion(x)" right (y/n) ?
>> y
```

```
verified_explanation :
    Ca & transition_element
```

```
yes
! ?-
```

6. まとめ

図8 実行例(その2)

本稿では、PooleらのTheoristシステムの理論を参考にして、仮説生成と検定を行なうシステムの構築について報告した。そこでは、可能な仮説の集合である仮説空間が階層的に構造化されていることが特徴である。さらに複数の仮説の中からより適切な仮説を選択するための評価基準を明らかにするための実験ツールを作った。本稿で採り上げた2つの評価基準の根拠となる概念は、診断の原理とPopperの原理である。また、仮説の検定には、ユーザとシステムとのインタラクティブな要素が不可欠であるとし、システムにはインタラクティブに情報を獲得するモジュールを導入した。

今後の課題として、次のようなものが挙げられる。

- 1) 階層構造を持った知識ベースが、例外的な知識を持つ場合に、それが仮説の順序づけにどう作用するか明らかにし、対応する機能をシステムに導入する。
- 2) 仮説を生成検定していくプロセス上で、新たに得られた知識を知識ベースに無矛盾に獲得するメカニズムを明らかにする。

《謝辞》 なお、本研究の機会を与えて下さったI C O T 研究所第一研究所長ならびにN T T 電気通信研究所入力装置研究室小森昭室長、および熱心に議論していただいたGoebel助教授(Univ. of Waterloo)、世木研究員をはじめとするI C O T 第一研究室の諸氏に感謝致します。

〔参考文献〕

- [Arikawa 85] 有川節夫, 帰納推論と類推の動向, 日本創造学会編 創造性研究3, 共立出版, 1985.
- [Kitakani 85] 北上 始, 國藤 進, 宮地素造, 古川康一, 論理型プログラミング言語Prologによる知識ベース管理システム, 情報処理, Vol.26 No.11, 1985.
- [Kunifuji 85-1] 國藤 進, 演繹・帰納・充実の推論機構化をめざして, 同上.
- [Kunifuji 85-2] 國藤 進, 北上 始, 宮地素造, 古川康一, 知識工学の基礎と応用〔第4回〕—Prologにおける知識ベースの管理—, 計測と制御, Vol.24 No. 6, 1985.
- [Poole 85] David Poole, Romas Alaiunas, Randy Goebel, Theorist: a logical reasoning system for defaults and diagnosis, submitted as a chapter in the volume Knowledge Representation, N.J. Cercone & G. McCalla (eds.), IEEE Press, in preparation.
- [Popper 65] Karl R. Popper, Conjectures and Refutations: The Growth of Scientific Knowledge, Harper Torchbooks, 1965.