

## 機能モデリングのための機械学習の統合

石川 孝

寺野隆雄

木更津高専情報工学科

筑波大学経営システム科学

本研究の目的は、機能モデリングと呼ばれる知識の構造化手法を用いる知識ベースシステムにおいて学習を実現することである。特に、設計型問題におけるモデリング支援や、分類型問題における知識獲得（例えば、蛋白質の機能予測知識の生成）に対する機械学習手法の応用を目標とする。学習の実現に対して本研究は、学習自体が知識に基づく推論であるという知識集約アプローチに基づいて、単独の推論手法では学習が困難な場合に複数の学習戦略を組み合わせることによって学習を実現する多戦略アプローチをとる。とりわけ類推による仮説生成を核としたアーキテクチャによって機械学習を統合することが特徴である。本論文は、知識の構造化手法として機能モデリングを用いる知識ベースシステムにおいて学習を実現するアーキテクチャの設計について述べる。

## Integrating Machine Learning Techniques for Functional Modeling

Takashi Ishikawa

Takao Terano

Kisarazu National College of Technology

The University of Tsukuba

The objective of the research is to built learning functionality in knowledge-based systems which use a knowledge organization method named functional modeling. Specifically, the goal is to apply machine learning techniques to modeling supports in design problems and to knowledge acquisition for classification problems. For these purposes, the research adopts two approaches: knowledge intensive approach and multistrategy learning approach. An feature of the proposed architecture for integrating machine learning techniques is utilization of Abduction by Analogy as the kernel inference. This paper presents the design of a learning architecture for knowledge-based systems using functional modeling method.

## 1. はじめに

知識ベースによる問題解決は形式化された知識に基づく推論を前提にしているため、知識ベースシステムが解決できる問題は準備された知識に依存する。しかし現実世界の問題解決では、必要なすべての知識をあらかじめ準備しておくことは困難であり、不完全な知識から出発して問題を解くことになる。不足する知識や誤った知識は、問題解決の過程で準備された別の知識から推論したり、人間が入力することによって獲得・修正される必要がある。このように、学習によって知識を獲得する知識ベースシステムが求められている。

本研究の目的は、機能モデリングと呼ばれる知識の構造化手法を用いる知識ベースシステムにおいて学習を実現することである。特に、設計型問題におけるモデリング支援[1][2][12]や、分類型問題における知識獲得（例えば、蛋白質の機能予測知識の生成）[3][13]に対する機械学習手法の応用を目標とする。学習の実現に対して本研究は、学習自体が知識に基づく推論であるという知識集約アプローチ[19]に基づいて、単独の推論手法では学習が困難な場合に複数の学習戦略を組み合わせることによって学習を実現する多戦略アプローチ[4]をとる。とりわけ類推による仮説生成を核としたアーキテクチャによって機械学習を統合することが特徴である。

本論文は、知識の構造化手法として機能モデリングを用いる知識ベースシステムにおいて学習を実現するアーキテクチャの設計について述べる。学習の実現にあたって、まず機能モデリングにおける知識構造を分析して、学習問題の構造を明らかにする（2章）。つぎにモデリング支援に対するアプローチと課題について考察する（3章）。そして複数の機械学習手法を統合する枠組みとそのアーキテクチャについて説明する（4章）。おわりに得られた結論をまとめ、今後の課題について述べる（5章）。

## 2. 機能モデリング

### 2.1 機能モデル

対象領域における実体の「機能と構造の関係」に対する形式的表現を機能モデルと呼ぶ[6][9][20]。設計では設計物の意図された機能とその実現構造の関係が、また蛋白質ではそのアミノ酸配列と発現機能の関係が機能モデルである。機能モデルは、対象領域での問題解決に必要な知識を構造化する役割をもつ。本研究では、機能モデルの知識の構造化に対する働きをシステム論的オントロジー[15]に基づいて分析し、つぎの構造化原理にまとめる。

構造化原理（分解・結合原理）：

- (1) [分解] システムの機能は、その要素システムの機能に分解できる。
- (2) [結合] 要素を結合することによって、システムの機能を発現できる。

学習の実現に用いる類推による仮説生成を論理プログラムによって実現するために、機能モデルの論理表現を考える。さらに論理プログラムをPrologで記述することを考慮して、表現を節形式に限定する。システム原理(1) [分解] を節形式で表現するには、つぎの一般的な構文を用いる。

<システムの機能> :- <要素の機能>, . . . . .

ここで、<...>はリテラルを表す。この構文の下でシステム原理(2) [結合] は、リテラルの引数の間の等値関係（または同一性）として表現される。引数は一般にシステムまたは

要素の状態を記述するパラメータを表現する。この表現では、パラメータ間の因果性は、機能を定義する節によって記述されることになる。

## 2. 2 機能モデリング

機能モデルを構築するタスクを機能モデリングと呼ぶ。知識の不完全な対象領域においては、機能モデル自体が知識を精密化するための仮説であり、学習の対象となる。機能モデリングを仮説生成過程とみなして、仮説生成に機械学習手法を適用して支援するというのが、本研究のアプローチである。

上述の機能モデルの表現形式において、機能モデリングは「機能を定義する節を得る問題」として定式化される。この問題では一般に、システムの機能を記述するリテラルとプリミティブな要素の機能を記述するリテラルを与えて、機能の分解と結合である機能展開を求める。機能展開に必要な節が知識ベースに全て存在すれば、この問題は演繹的に解ける。知識ベースが不完全なら、節の学習が必要となる。

## 3. モデリング支援

### 3. 1 アプローチ

節の学習に現在の機械学習手法を適用するには、二つのアプローチが考えられる。一つはシステムの機能からトップダウンに機能展開を探索する方法で、説明に基づく一般化や抽象化に基づく類推などが適用できる。もう一つはプリミティブな機能からボトムアップに機能展開を構成する方法で、さまざまな帰納的学習手法が応用できると考えられる。しかし、問題は個々の学習手法単独では機能モデリングの解決には不十分であり、何らかの統合的な適用が必要であるということである。

機能モデリングを自動化するという目標設定もあるが、ここではモデリングを行うのは人間であって、計算機はその問題解決を支援するという「モデリング支援システム」を考える。分業の原則は、明示的な知識によって制御可能な探索は計算機が行い、それが困難な決定は人間が行うというものである。

### 3. 2 支援の課題

モデリング支援システムの主要課題は、知識表現と知識獲得である[8]。本研究では、これらの課題を上述の「機能モデルの論理表現における節の学習」として定式化して扱う。計算機が何も学習しない場合、システムは単なる「論理プログラミング支援システム」となり、計算機が全てを学習すればシステムは「自動化機能モデリングシステム」となる。システムがこのスペクトルのどこに位置するかは、学習における探索を制御する知識の多少に依存している。

## 4. 機械学習の統合

### 4. 1 統合の枠組み

機能モデリング支援システムにおいて機械学習の統合が必要な理由は、節の学習においてトップダウンとボトムアップの両面からのアプローチが必要であることにある。さらに、学習の仮説生成における組み合わせ爆発を避けるには、知識集約的なアプローチ[19]が必

要である。

知識獲得への多戦略学習アプローチは、機械学習において演繹推論(deduction)、発想推論(abduction)、帰納推論(induction)を統合するアプローチである[4][7][14][18][22][23]。これらの研究では、対象領域の知識に応じて各推論手法が特殊化されて用いられている。例えば発想推論については、決定規則による類推[22]、因果関係に基づく類推[7]、抽象化に基づく類推[18]、一般化に基づく類推[23]、事例ベース推論[14]が用いられている。適用手法が領域依存であることは、汎用のモデリング支援システムを構築する上での困難である。モデリング支援においては少なくとも、対象に応じて手法を選択できることがシステムの要件であると考えられる。

#### 4.2 発見学習と効率化学習

知識ベースシステムにおける学習は、発見学習と効率化学習に大別できる。発見学習は解決できる問題範囲を拡大するための知識を獲得し、効率化学習は問題解決の効率を改善する知識を獲得する。学習タスクを推論に基づく問題解決と見なして知識レベル分析[5][10][11]を適用すると、発見学習はさらに、仮説生成と仮説精密化に分割できる。仮説生成はある問題を解決するためのルールを生成することであり、仮説精密化は与えられた問題すべてを正しく解決するためのルール群を生成することである。本研究では、仮説生成に重点をおいて学習アーキテクチャを設計する。

#### 4.3 アーキテクチャ

以上の考察に基づいて、学習システムを発想推論モジュール、演繹推論モジュール、帰納推論モジュールで構成する(図1)。学習システムの入力は目標節であり、出力はその証明である。目標に対して生成する解としての証明を制限するために、仮説基準を必要により入力する。知識ベースには、目標に類似な頭部をもつルール群とその証明に必要な事実、および目標との類似性を定義する知識が与えられているものとする。この条件が満たされていない場合は、推論の過程で必要な知識を人間が与えるものとする。以下、各モジュールの機能について説明する。

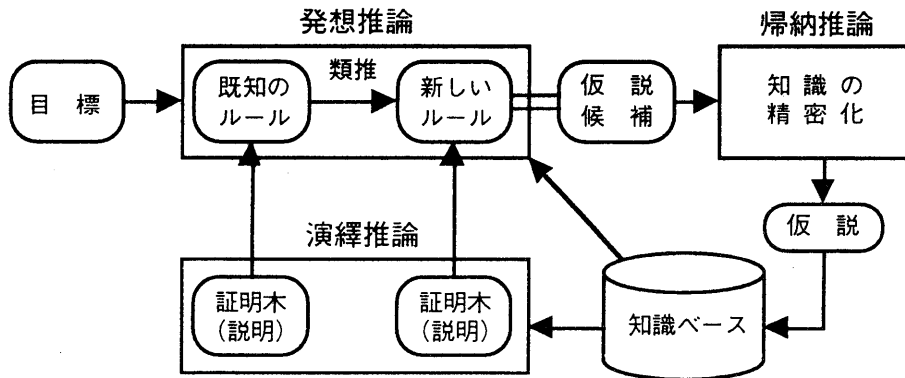


図1. 学習システムのアーキテクチャ

(1) 発想推論モジュールは、目標節を入力として、目標節と単一化できるリテラルを頭部にもつ新しいルールを出力とする。発想推論にはさまざまな手法が提案されているが、本論文では類推による仮説生成(Abduction by Analogy: ABA)を用いた場合について説明する。ABAは、まず目標節に対して頭部が類似する既知のルールを知識ベースから探索する。類似性の定義は知識ベースに与えられているものとする。つぎに類似なルールに対する証明木(説明)を演繹推論モジュールを使って生成する。そして、目標との類似性に基づいて類似なルールに対する証明木(説明)を変換することによって、与えられた事実に対して証明可能な新しいルールを生成する。

(2) 演繹推論モジュールは、任意の節を入力として、その証明木(説明)を出力とする。証明木は、節の証明に使われたルールとその中の変数を例化する事実とからなる構造である。

(3) 帰納推論モジュールは、仮説候補としての新しいルールを入力として、与えられたすべての事実に対して誤りのない仮説を出力とする。帰納推論の手法は、経験的帰納手法または構成的帰納手法を入力条件に応じて選択する。

このアーキテクチャの特徴は、学習問題を仮説生成問題と仮説精密化問題に分割して、探索空間を縮小していることにある。また、帰納推論や演繹推論が単独では解決できない学習問題に対して、発想推論を組み合わせることで解決できるようにしたことが特徴である。この学習アーキテクチャに類似な知識獲得のための多戦略学習アプローチに基づく研究としては、蓋然的正当化木(Plausible Justification Tree: PJT)による統合化の枠組み[21][22]がある。PJTによる統合の目的が仮説精密化を主としているのに対し、本研究の統合の目的は仮説生成にあり、互いに相補的な関係にあると考えられる。

## 5. おわりに

本論文では、機能モデリングのための機械学習の統合を目的として、類推による仮説生成を核とした学習アーキテクチャの設計について述べた。このアーキテクチャの特徴は、学習問題を仮説生成問題と仮説精密化問題に分割して、類推による仮説生成によって知識発見問題を解決することにある。実用的なシステムの実現に向けては、大規模な知識ベースに対して推論を効率化する技術が必要と考えられるが、今後支援ツールの構築と使用を通じて、課題の明確化と解決手段の開発に取り組む計画である。

## 参考文献

- [1] 石川 孝:「設計対象モデリングへのA Iアプローチ」, 人工知能学会誌, Vol.7, No.2, pp.237-243 (1992)
- [2] 石川 孝, 今村 聡, 平岡弘之, 村上 存:「概念設計支援への計算的アプローチ—その展望と課題—」, 第12回設計シンポジウム講演論文集, pp.112-117 (1994)
- [3] 石川 孝, 寺野隆雄:「多戦略学習による蛋白質機能予測知識の生成」, 情報処理学会情報学基礎研究会, 95-FI-36, pp.23-30 (1995)

- [4] 沼尾正行：「複数の情報媒体を用いた学習—多戦略学習とその情報源による分析—」, 人工知能学会誌, Vol.9, No.6, pp.837-842 (1994)
- [5] 中村祐一, 堀 雅洋：「エキスパートシステム構築における知識レベル分析—ルール表現からモデル構築オペレータへの変遷を通して—」, 人工知能学会誌, Vol.9, No.6, pp.850-858 (1994)
- [6] Abu-Hanna, A., Jansweijer, W., Benjamins, R. and Wielinga, B., "Functional Models in Perspectives: Characteristics and Integration in Multiple Model-Based diagnosis", *Applied Artificial Intelligence*, Vol.8, No.2, pp.219-237 (1994)
- [7] Baroglio, C., Botta, M., and Saitta, L., "WHY: A System That Learns Using Causal Models and Examples", Michalski, R. S. and Tecuci, G. (eds.), *Machine Learning Vol.IV*, Morgan Kaufmann, pp.319-347 (1994)
- [8] Brian, R. G. and Shaw, M. L. G., "Using Knowledge Acquisition and Representation Tools to Support Scientific Communities", *Proceedings of AAAI'94*, pp.707-714 (1994)
- [9] Chandrasekaran, B., "Functional Representation: A Brief Historical Perspective", *Applied Artificial Intelligence*, Vol.8, No.2, pp.173-197 (1994)
- [10] Clancy, W. J., "Heuristic Classification", *Artificial Intelligence*, Vol.27, pp.289-350 (1985)
- [11] Clancy, W. J., "Model Construction Operators", *Artificial Intelligence*, Vol.53, pp.1-115 (1992)
- [12] Ishikawa, T., Mitaku, S., Terano, T., Hirokawa, H., Suwa, M. and Seah, B.-C., "Finding Functional Features of Proteins using Machine Learning Techniques", *Proceedings of Genome Informatics Workshop 1994*, pp.168-169 (1994)
- [13] Ishikawa, T. and Terano, T., "Analogy by Abstraction: An Algorithm of Case Retrieval and Adaptation for CBR Design Expert Systems", *Proceedings of Japan/Korea Joint Conference on Expert Systems*, pp.99-104 (1994)
- [14] Leake, D. B., "Focusing Construction and Selection of Abductive Hypotheses", *Proceedings of IJCAI'93*, pp.24-29 (1993)
- [15] Long, J. G. and Denning, D. E., "Ultra-Structure: A Design Theory for Complex Systems and Processes", *Communication of ACM*, Vol.38, No.1, pp.103-120 (1995)
- [16] Michalski, R. S., "Inferential Theory of Learning", in [7], pp.3-61 (1994)
- [17] Mooney, R. J. and Ourston, D., "A Multistrategy Approach to Theory Refinement", in [7], pp.141-164 (1994)
- [18] Moriak, K., "Balanced Cooperative Modeling", in [7], pp.295-317 (1994)
- [19] Pazzani, M. J., Brunk, C. A., and Silverstein, G., "A Knowledge-Intensive Approach to Learning Relational Concepts", *Proceedings of The 8th International Workshop on Machine Learning*, pp.432-436 (1991)
- [20] Rosenman, M. A. and Gero, J. S., "The What, the How, and the Why in Design", *Applied Artificial Intelligence*, Vol.8, No.2, pp.199-218 (1994)
- [21] Tecuci, G., "Plausible Justification Trees: A Framework for Deep and Dynamic Integration of Learning Strategies", *Machine Learning*, Vol.11, pp.237-261 (1993)
- [22] Tecuci, G. and Duff, D., "A Framework for Knowledge Base Refinement through Multistrategy Learning and Knowledge Acquisition", *Knowledge Acquisition*, Vol.6, pp.137-162 (1994)
- [23] Wisniewski, E. J. and Medin, D. L., "The Fiction and Nonfiction of Explanation", in [7], pp.64-84 (1994)