

# 例外事例を含むDBからの 化学知識の自動抽出

山崎 毅文   桑原 敏   服部 文夫

NTT情報通信処理研究所

知識の自動抽出方法の一つとして、データベース(DB)内の事例から得られる解釈を組み合わせて、知識として生成するシステムを提案する。本システムは、DB内の例外データが知識生成時に引き起こす解釈の不整合を無くすために、TMS (Truth Maintenance system) を利用した例外データ候補の検出法、及び事例頻度に基づく例外データの同定法を用いている。本稿では、上記手法を中心に、具体的なシステム構成を示し、さらにシステムを評価するため、実際に使用されている化学反応DBを用いた化学知識抽出システムについて述べる。さらに、実験の結果、例外データの除去と抽出した知識の正当性が確認され、本システムの有効性が実証されたことを明確にする。

A u t o m a t i c   C h e m i c a l   K n o w l e d g e   A c q u i s i t i o n  
f r o m   A   D a t a b a s e  
t h a t   I n c l u d e s   E x c e p t i o n a l   c a s e s

Takefumi YAMAZAKI   Satoshi KUWAHARA   Fumio HATTORI  
NTT Communications and Information Processing Laboratories  
1-2356 Take Yokosuka-shi , Kanagawa 238-03

This paper describes a method of acquiring knowledge from a database that includes exceptional cases. This method has the following two features. (1) Exceptional case candidates are detected by using the TMS (Truth Maintenance System). (2) The case which should be removed is decided among candidates based on how many times the case appears in the database. The validity of this method is evaluated by using a simple system which abstracts chemical knowledge from the existing chemical reaction database. Results of the system confirm that this method might be possibly used.

## 1. はじめに

知識獲得は、知識システム構築における最大のボトルネックになっているが、そのボトルネック解消のために、現在様々な手法が研究／開発されている。[1]

従来研究されてきた知識獲得手法においては、その獲得対象の知識源は、主に専門家であり、専門家から、いかに効率良く、知識を抽出するかに研究の関心があった。最近、研究開発されている多くの知識獲得支援ツールは概ねこれに分類される[2][3]。

知識システムの進展、及び大規模化に伴い、要求される知識の量は、拡大の傾向にあるが、専門家から知識を獲得するだけでは、大量、かつ、良質な知識を得ることは、非常に困難である。例えば、化学反応のような場合、化学物質は数百万種類も現存し、かつ反応はその組合せであるから、その知識は膨大であり、専門家自身も知識を十分に持ち得ない状況が考えられる。

この解決策として、知識源に、事例データベース (DB) を利用する手法が有効になるものと考えられる。例えば、化学反応の場合では、商用の反応DBが利用可能なので、この知識獲得メカニズムが確立できれば、知識の大量獲得の可能性が増大することになる[4]。しかし、DB中には、その事例自身から一般的な知識を求めることが困難な、例外事例なるものが存在する可能性があり、例外事例の除去が事例DBからの知識抽出の中心課題となる。

本稿では、まずDBから知識を獲得するための基本的な知識抽出モデルについて論じ、例外性のある事例から得られた解釈が整合性のある知識抽出を阻害することを明確にする。

さらに、TMS (Truth Maintenance System) を利用した、DBからの知識抽出方法の実現例を示し、具体的に、既存の反応DBから、置換基の位置選択性知識を求めた結果について述べ、本手法が有効であることを示す。

## 2. DBからの知識抽出における問題

### 2. 1 知識抽出モデル

DBから知識抽出を行なう場合、DB内の個々の事例から、考えられる複数の解釈を生成し、それらの解釈のうち、整合性のある組合せを、知識として蓄積する方法が考えられる。生成された各々の解釈は、幾つかの仮説から構成されており、全ての解釈の組合せについて、仮説間に存在する制約条件が制限になり、その整合性が計算される。

事例の集合をD、それから生まれる解釈の集合をI、解釈Iを構成する仮説の集合をH、また仮説間に存在する制約の集合をCとした場合、それらの定義を、以下に示す。

$$D = \{D_i \mid i=1, \dots, n\}$$

$$I = \{I_{ij} \mid i=1, \dots, n, j: D_i \text{ から生成される解釈数}\}$$

$$H = \{H_i \mid i=1, \dots, m\}$$

$$C = \{C_{kl} \mid C_{kl} = H_k \wedge H_l \rightarrow \perp\} \quad \text{但し、}\perp\text{は、論理的矛盾を表わす。}$$

DBからの知識抽出は、図1に示すように、各データから生成される解釈の中から一つ選んで、組み合わせせて、仮説の制約条件を満たすものを、適する解釈の組として蓄積することによって、行なわれる。

例えば、以下の場合、

$$D1 \rightarrow I11 \vee I12, \quad D2 \rightarrow I21 \vee I22$$

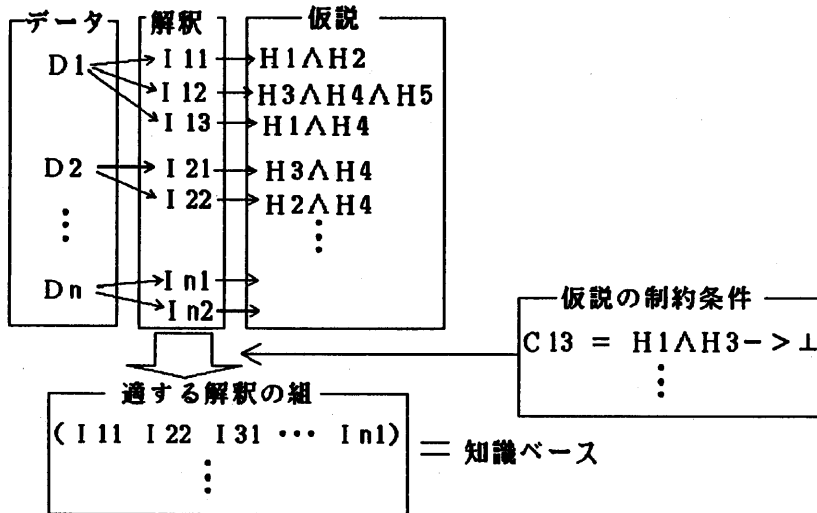
$$I11 \rightarrow H1 \wedge H2, \quad I12 \rightarrow H1 \wedge H3$$

$$I21 \rightarrow H2 \wedge H3, \quad I22 \rightarrow H3 \wedge H4$$

$$C24: H2 \wedge H4 \rightarrow \perp$$

$$C14: H1 \wedge H4 \rightarrow \perp$$

整合性のある解釈の組合せは、(I11, I21)、及び(I12, I21)であり、抽出された知識は、両者共、 $H1 \wedge H2 \wedge H3$  と計算される。



(図1. 知識抽出モデル)

### 2. 2 例外データの存在による問題とその解決策

DB中に、例外データ、あるいは誤データ等の特殊事例が存在した場合、前項のモデルでは、整合性のある解釈の組合せが生成できない可能性がある。

例えば、以下の場合には整合性のある解釈の組合せは得られない。即ち、解釈のどの組合せを選んでも、制約条件を満たすものは存在しない。

$D1 \rightarrow I11 \vee I12$ ,  $D2 \rightarrow I21 \vee I22$ ,  $D3 \rightarrow I31 \vee I32$   
 $I11 \rightarrow H1 \wedge H2$ ,  $I12 \rightarrow H1 \wedge H5$   
 $I21 \rightarrow H2 \wedge H3$ ,  $I22 \rightarrow H2 \wedge H4$   
 $I31 \rightarrow H3 \wedge H4$ ,  $I32 \rightarrow H2 \wedge H5$   
 $C13 : H1 \wedge H3 \rightarrow \perp$ ,  $C14 : H1 \wedge H4 \rightarrow \perp$

この解決策として、例外データの除去の方法が考えられる。例えば、上記の例では、D2を除去することにより、整合性のある解釈の組合せとして、(I11, I32)が得られる。

### 3. TMSを用いたDBからの知識抽出

前章で述べたように、DBから知識抽出を行なう場合には、例外データの除去を行う必要がある。その為には、解釈と制約から例外データを検出するための基本的手段をシステムが持つ必要があり、ここでは、入力される主張(assertion)間の論理的整合性を計算するものであり、記述力に優れ、主張の追加/削除が容易である McAllester の TMS (TRUTH MAINTENANCE SYSTEM) [5] [6] の利用を検討した。

#### 3. 1 TMSの概要

TMSは仮説に基づく推論を管理し、仮説の変更に対処して推論結果を更新するシステムであり、次の2つの基本的能力を持つ。

- ①論理計算：入力された主張の論理的関係を調べ、そこから導かれる論理的帰結を計算する。
- ②矛盾検出：入力された主張に論理的矛盾がある場合に、それを検出して、原因となっている主張の組合せを提示する。

(1) 論理計算の例 (図2)。

(-) a b), (-) b c), (not c) という3つの事実をユーザが、TMSに入力したとする。これらは、順に「aならばb」、「bならばc」、「cでない」ということを表わす。これらの入力を受けたTMSは、これらの論理的関係を調べ、論理的帰結である「a」が偽であることを導く。

(2) 矛盾検出の例 (図3)。

前述の例に、aという事実を追加入力する。この場合、明らかに、(-) a b), (-) b c), (not c) から導かれる「a」が偽という結果と、「a」が真だとする事実は、矛盾することになる。TMSは、入力された事実の中に、論理的矛盾がある場合、これを検出して、矛盾の原因になった主張の組合せを提示する。TMSには矛盾の主張が入力された場合の論理的関係を再調整する機能も持っている。図3の例では、「a」が真だという事実を除去(retract)することを入力した例であり、矛盾が除かれた後、TMSは再び、前と同様に論理的関係を調整する。

```
) (assert '(-) a b))
==> (-) a b)
) (assert '(-) b c))
==> (-) b c)
) (assert '(not c))
==> (not c)
) (truth 'a)
==> FALSE
) (truth '(not c))
==> TRUE
```

```
) (assert 'a)
==> (THERE IS A CONFLICT BETWEEN)
(1 ((-) b c) ASSUMED TO BE TRUE))
(2 ((not c) ASSUMED TO BE TRUE))
(3 ((-) a b) ASSUMED TO BE TRUE))
(4 (a ASSUMED TO BE TRUE))
(WHICH ASSUMPTION SHOULD BE RETRACTED?)4
```

(図3. TMSによる矛盾検出の例)

(図2. TMSによる論理計算例)

### 3. 2 TMSによる例外データの検出

例外データの検出については、TMSの矛盾検出能力を利用する。

例えば以下のデータ、解釈、制約の場合、TMSへの入力は何4のように表現される。

```
D1 -> I11 V I12 D2 -> I21 V I22 D3 -> I31 V I32
I11 -> H1 ^ H2 , I12 -> H1 ^ H5
I21 -> H2 ^ H3 , I22 -> H2 ^ H4
I31 -> H3 ^ H4 , I32 -> H2 ^ H5
C13 : H1 ^ H3 -> ⊥ , C14 : H1 ^ H4 -> ⊥
```

図5はこれらの入力に対する出力であり、矛盾を引起こす節を、除去(retract)の対象の節として、提示する。これは、例外データの候補の提示であり、最下行には除去する節の入力が可能であることを示している。図5では、(assert '(or (and H2 H3) (and H2 H4)))のretract、即ちD2を例外データとして除去し、D1,D3に基づき整合性の再計算を行うことを意味する。

```

(assert ' (or (and H1 H2) (and H1 H5)) ; <= D1に相当
(assert ' (or (and H2 H3) (and H2 H4)) ; <= D2に相当
(assert ' (or (and H3 H4) (and H2 H5)) ; <= D3に相当
(assert ' (-) H1 (not H3)) ; <= 制約条件 H1 ∧ H3 -> ⊥
(assert ' (-) H3 (not H1)) ; <= 制約条件 H1 ∧ H3 -> ⊥
(assert ' (-) H4 (not H1)) ; <= 制約条件 H1 ∧ H4 -> ⊥
(assert ' (-) H1 (not H4)) ; <= 制約条件 H1 ∧ H4 -> ⊥

```

(図4 TMSへの入力)

```

(THERE IS A CONFLICT BETWEEN
(1 ((OR (AND H2 H3) (AND H2 H4)) ASSUMED TO BE TRUE));<= D2
(2 ((OR (AND H1 H2) (AND H1 H5)) ASSUMED TO BE TRUE));<= D1
(WHICH ASSUMPTION SHOULD BE RETRACTED?) 1 ;<= D2 を retract

```

(図5 例外データ候補の出力)

### 3.3 事例頻度に基づく例外データの同定/除去

前節では例外データの候補を検出、及び除去におけるTMSの利用法について示した。TMSによって、矛盾のあるデータの組合せが提示された時、各データのDB上での出現頻度を調べ、出現頻度の少ないデータを例外データと同定し、抽出対象のデータから除去する。

図5の最下行では、TMSに対して除去対象の事実をインタラクティブに選択する方法を示したが、除去データを出現頻度の低いデータに自動的に設定するようなストラテジーをTMSに組み込むことが可能である。この場合には、出現頻度に応じて、段階的、及び自動的に矛盾データを同定/除去する。

図5の例では、D1、D2、D3のデータの出現回数が、各々、10、2、4とすると、図5においてD1とD2が互いに矛盾を発生させるデータであることを提示するが、どちらを除去するかは、データの出現頻度で決まり、まずD2を自動的に例外データとして同定し、知識抽出の対象データから除去する。

### 3.4 TMSによる解釈の組合せ

矛盾するデータを除去した後、TMSを用いて整合性のある解釈の組合せを求める方法について述べる。これには、TMSの論理計算能力を利用する。

例えば、以下のデータについて、整合する解釈の組合せを求めることにする。

```

D1 -> I11 V I12 , D2 -> I21 V I22 , D3 -> I31 V I32
I11 -> H1 ∧ H2 , I12 -> H1 ∧ H5
I21 -> H2 ∧ H3 , I22 -> H2 ∧ H4
I31 -> H3 ∧ H4 , I32 -> H2 ∧ H5

```

図6は整合性判定の例であり、(ex1)の場合では、I11、即ち「H1 ∧ H2」の入力に対し、I21、即ち「H2 ∧ H3」の「truth」の値によって、I11、I21が整合性のある解釈かどうかを判定している。この場合は「TRUE」が出力され、整合性のあることが判定できる。

(ex2)では(ex1)に対して、I32を追加して整合性判定した場合であり、(ex1)同様にI32を「truth」の値で結果が分かる。この場合には、「FALSE」が出力され、この解釈の組合せは不整合になることが計算される。

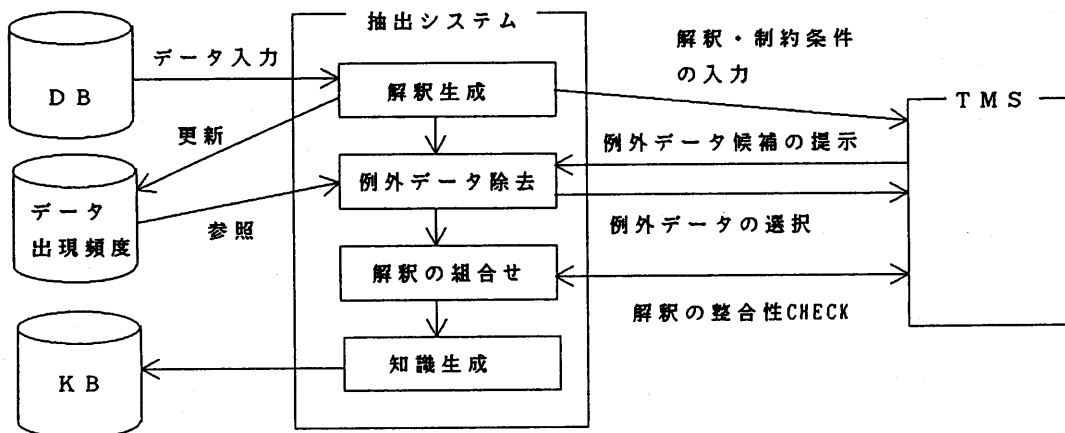
(ex1).  $I_{11} \wedge I_{21}$  の場合  
 (assert '(and H1 H2)) ; ==)  $I_{11}$  に相当  
 (truth '(and H2 H3)) ; ==)  $I_{21}$  に相当  
 ==> TRUE ; ==>  $I_{11}, I_{21}$ は、整合を示す

(ex2).  $I_{11} \wedge I_{21} \wedge I_{32}$  の場合  
 (assert '(and H1 H2)) ; ==)  $I_{11}$  に相当  
 (assert '(and H2 H3)) ; ==)  $I_{21}$  に相当  
 (truth '(and H2 H5)) ; ==)  $I_{32}$  に相当  
 ==> FALSE ; ==>  $I_{11}, I_{21}, I_{32}$ は、不整合

(図6 TMSによる解釈の組合せの整合性判定)

### 3. 5 システムの機能フロー

前節までの知識抽出方法を知識抽出システムとして構成した場合の概念的な機能フローを図7に示す。



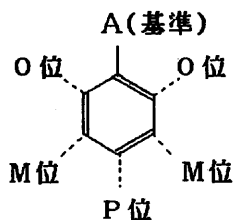
(図7. DBからの知識抽出システムの機能フロー)

## 4. 実験によるシステムの評価

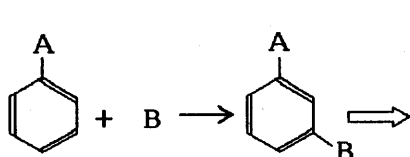
前章までの知識抽出モデルを評価するため、化学反応DBからの化学知識抽出を評価の題材に設定して、簡単なプロトタイプを作成した。具体的には、ベンゼン環における置換基の位置選択性及びそれらの相対的強度に関する知識を既存の化学反応DBから自動的に抽出することを試みた。

### 4. 1 ベンゼン環の置換基の位置選択性

ベンゼン環の置換基の位置というのは、図8のように、基準の置換基Aを中心に、オルト(O)位置、メタ(M)位置、パラ(P)位置で表現される。図9では、反応事例から得られる解釈について示した例であり、上図では、置換基Aのついたベンゼン環に、置換基Bが入る位置は、置換基Aの性質で決まり、この場合、BはAに対してM位であるので、AはM配向性置換基と解釈されることを示している。また、下図の場合には、置換基A、Bのついたベンゼン環に置換基Cが入る位置は、AがM配向性、かつBがO配向性である解釈と、AがO配向性、かつBがO配向性であっても、AよりもBの置換基の相対的強度が大きく、BのO配向性が働いて、CがAに対してM位置に入るという解釈、あるいは逆に、AがM配向性、かつBがM配向性、かつ、AのBに対する相対的強度が強いという解釈の3通りが考えられる。

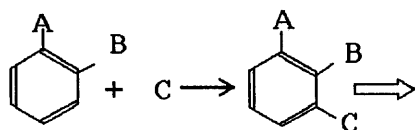


(図8. ベンゼン環の置換基の位置選択性)



(解釈)

AはM配向性



(AはM配向性)  $\wedge$  (BはO配向性)

または

(AはO配向性)  $\wedge$  (BはO配向性)  $\wedge$  (A < B)

または

(AはM配向性)  $\wedge$  (BはM配向性)  $\wedge$  (A > B)

(図9. データの解釈)

#### 4. 2 システム概要と実行例

実験に使用した反応DB [7] [8]は、反応物質、生成物質、及び反応条件(試薬、収率)等が記号化されて記述されており、データは、主に文献[9]より収集されたものである。

本DBを利用するにあたっては、必要なデータの検索、及び知識抽出に必要なデータ形式への情報の抽出、変換が行われなければならない。本実験システムでは、前処理として、ベンゼン環の置換反応のデータを検索し、検索されたデータについて、反応物、生成物の原子情報、置換基の抽出、及び反応箇所の抽出を行なうことによって、位置選択性の知識を引き出すために必要な、置換基と置換基の位置関係の情報を事例データとして蓄積した。また、各事例データの出現頻度についても、この段階で記録しておいた。

以上の前処理の後、知識抽出の本体部に処理が引き渡され、前章の手順に従って、知識の自動抽出を行なった。以下、その処理例を示す。

##### (1) データの入力

DATA1: (AR-OCH3 O)

DATA2: (AR-OH O AR-OCH3 M)

DATA3: (AR-OCH3 M)

上記は、例えばDATA2では、「ベンゼン環に置換基OH基とOCH3基が既にある、新たにベンゼン環に入ってくる置換基の位置は、OH基に対してO位、またOCH3基に対してはM位であること」を意味している。

## (2) 解釈と制約条件の生成

DATA1 から生成される解釈

=> I11:(AR-OCH3 0)

DATA2 から生成される解釈

=> I21:(AR-OH 0) and (AR-OCH3 M)

I22:(AR-OH 0) and (AR-OCH3 0) and (AR-OH > AR-OCH3)

I23:(AR-OH M) and (AR-OCH3 M) and (AR-OH < AR-OCH3)

DATA3 から生成される解釈

=> I31:(AR-OCH3 M)

例えば、I22は、「OH基がO配向性、かつOCH3基がO配向性、かつOH基の強度はOCH3基の強度より大きい(>)」を表わす。

また、DATA2から生成される制約条件は、「OH基やOCH3基は、O配向性またはM配向性のいずれかであることや、OH基とOCH3基との間に相対的強度がある」ことである。これらの解釈/制約条件のTMS上での表現を、図10に示す。

```
<解釈>
(assert '(or (and AR-OH-is-0 AR-OCH3-is-M) ; <= I21
             (and AR-OH-is-0 AR-OCH3-is-0
                 AR-OH>AR-OCH3) ; <= I22
             (and AR-OH-is-M AR-OCH3-is-M
                 AR-OH<AR-OCH3)) ; <= I23

<制約条件>
(assert '(-) AR-OH-is-0 (not AR-OH-is-M))
(assert '(-) AR-OH-is-M (not AR-OH-is-0))
(assert '(-) AR-OCH3-is-0 (not AR-OCH3-is-M))
(assert '(-) AR-OCH3-is-M (not AR-OCH3-is-0))
(assert '(-) AR-OH>AR-OCH3 (not AR-OH<AR-OCH3))
(assert '(-) AR-OH<AR-OCH3 (not AR-OH>AR-OCH3))
```

(図10 DATA2 から生成される解釈と制約条件のTMSへの入力)

## (3) 例外データ候補の探索

DATA1:(AR-OCH3 0),DATA3:(AR-OCH3 M) は、例外データ候補であることが、TMSにより計算される。

```
(THERE IS A CONFLICT BETWEEN)
(1 (AR-OCH3-is-0) ASSUMED TO BE TRUE)); <= DATA1
(2 (AR-OCH3-is-M) ASSUMED TO BE TRUE)); <= DATA3
(WHICH ASSUMPTION SHOULD BE RETRACTED?)
```

(図11 例外データ候補の出力)

## (4) 例外データの選択

例外データの選択は、例外データ候補の出現頻度によって決定する。例えば、DATA1, DATA3の出現頻度が、各々5,1の時は、DATA3を例外データとして選択し、知識抽出対象のデータから除去する。

## (5) 解釈の組合せ

(4)よりDATA3から生成される解釈I31は、解釈の組合せ候補から除去され、引き続いて、TMSを用いて、解釈の組合せが求められる。

以下の例では、I11∧I22が成立し、即ち(AR-OH 0)∧(AR-OCH3 0)∧(AR-OH > AR-OCH3)が整合性のある解釈の組合せと計算される。



```
(assert 'AR-OCH3-is-0) ; => I11
(truth '(and AR-OH-is-0 AR-OCH3-is-M)) ; => I21 に相当
==> FALSE
(truth '(and AR-OH-is-M AR-OCH3-is-M AR-OH<AR-OCH3)) ; => I22
==> FALSE
(truth '(and AR-OH-is-0 AR-OCH3-is-0 AR-OH-is-0)AR-OCH3-is-0) ; => I23
==> TRUE
```

(図12 TMSによる解釈の組合せの整合性判定)

#### 4.3 結果評価

反応DBには約7000件の反応事例が格納されており、それから今回の知識抽出に必要なデータ(ベンゼン環の置換反応)を約100個検索した。さらに、反応部位を認識し、抽出システム本体が処理できるデータ形式に変換した後、置換基の位置選択性、及び相対的強度に関する知識の抽出実験を行った。

結果の出力を図13に示す。ここで、置換基の位置選択性及び相対的強度は、各ノード(AR-OH-is-M, AR-OH)AR-OCH3....etc)の真理値(TRUTHの値)によって、判定され、真理値が、TRUEのものが解となる。

```
***** RESULT OUTPUT*****
*** O ***
AR-OCOCH3-is-0 = TRUE
AR-OCH3-is-0 = TRUE
AR-N(CH3)2-is-0 = TRUE
AR-CL-is-0 = TRUE
AR-OH-is-0 = TRUE
AR-BR-is-0 = TRUE
AR-NHCOCH3-is-0 = TRUE
AR-CH3-is-0 = TRUE
AR-NH2-is-0 = TRUE
AR-NO2-is-0 = TRUE

*** M ***
AR-COCH3-is-M = TRUE
AR-CHO-is-M = TRUE
AR-COOCH3-is-M = TRUE
AR-COOH-is-M = TRUE

*** relative strength ***
AR-OH)AR-OCH3 = TRUE
AR-OH)AR-CL = TRUE
AR-OH)AR-NO2 = TRUE
AR-OH)AR-BR = TRUE
AR-NH2)AR-NO2 = TRUE
AR-NH2)AR-COOH = TRUE
AR-OH)AR-CH3 = TRUE
AR-NHCOCH3)AR-CH3 = TRUE
AR-NH2)AR-CH3 = TRUE
AR-CH3)AR-NO2 = TRUE
AR-CH3<AR-NH2 = TRUE
```

(図13 知識抽出の結果)

置換基の配向性の知識は化学上の既知の知識であることから、図13の結果の内、配向性に関しては、参考文献[10]により、AR-NO2以外は、その一致が確認できた。M配向性であるAR-NO2が、O配向性となった原因は、AR-NO2に関するデータにおいて、特殊な触媒の使用、高温状態等の反応条件があったためと考えられる。また、図13の結果の相対的強度に関しては、化学専門家に検証依頼した結果、正しいことが確認できた。特に、O配向性の置換基グループとM配向性のグループとの相対的強度が、全てO配向性の方が強いという結果になっているが、化学専門家への検証依頼の結果、これは置換反応における置換基の性質を反映していることを確認した。

## 5. まとめ

本研究では、DB内の事例データから得られる解釈を組み合わせて、整合性のある解釈の組合せを知識として生成することを基本とするDBからの知識自動抽出方法を提案した。

その際の例外データの検出にはTMSを用い、かつ例外事例の除去には事例頻度による多数決に基づく判定法を採用することにより、整合性のある解釈の組合せとして、知識を抽出するシステムが構成できることを示した。

本モデルの有効性については、ベンゼン環における置換基の位置選択性の知識を、既存化学反応DBから抽出する実験を行ない、実験結果と実際の理論と照らし合わせて、抽出した知識の妥当性を確認した。

本研究の狙いは、DBからの知識抽出の基本的な抽出モデルの提案であり、具体的に化学を題材にその有効性が確認できたが、もう少し一般的に、本アプローチを、過多制約条件を持っている制約充足問題への適用可能性について、検討を進展させることも有益であると考えられる。また、今後の課題として、解釈生成のための知識の獲得や出現頻度以外の例外データ同定ための評価方法の検討が考えられる。

## 6. 謝辞

本研究に用いた化学反応DB、DB利用のソフト（反応検索システム、反応箇所抽出システム）を試用させて頂いた中外製薬株式会社富士御殿場研究所の松浦育敏氏、及び獲得した化学知識の検証に協力頂いた名古屋大学化学測定機器センターの早川芳宏助教授に感謝致します。

また、本研究の機会を与えて頂いた村上知識処理研究部部長、吉田主幹研究員に感謝すると共に、TMSの利用に関して、細部に渡り協力して頂いた樺蕭之氏をはじめとする、知識処理研究部の方々に感謝致します。

## 7. 参考文献

- [1] 国藤 進： " 知識獲得と学習研究の新しい流れ "，人工知能学会誌 59-65,1988.11
- [2] 滝 寛和 編： " 知識獲得支援システム " ICOT TM-654，1988
- [3] 山崎 毅文、滝 寛和、椿 和弘： " 類型タスク構造に基づく知識獲得支援一分類型問題向け知識獲得支援システムCTAS- "，人工知能学会第一回人工知能ツールと知識システム研究会、1987.12
- [4] 山崎 毅文、桑原 敏： " KBMSによる化学反応知識構成法 " 情報処理学会第37回全国大会，1988
- [5] McAllester,D.： " An outlook on truth maintenance "，Artificial Intelligence Laboratory,AIM-551,MIT,Cambridge,MA,1980
- [6] McAllester,D.： " A three-valued truth maintenance system,S.B. Thesis " Department of Computer Science,Tech.Rept.No.203, State University of New York,Buffalo,NY,1983
- [7] 松浦 育敏： " データベース型反応設計支援システム "，知識システムによる分子設計研究会，1986-9
- [8] 松浦 育敏： " 化学物質等設計知識ベース研究の方針と現状 " 知識システムによる分子設計研究会，1988-9
- [9] Dauben G. William ,ed.： "ORGANIC SYNTHESSES" John Wiley，1965
- [10] Hugh J. Williams： " 入門・有機化学 " 化学同人，1987