

6L-4

定性的推論による
生体ダイナミクスの予測

磯崎 秀樹

(NTT電気通信研究所)

田中 博

(東京大学医用電子研究施設)

1. はじめに

これまでに様々な定性的推論プログラムが作成されているが、いずれもメモリや計算速度の点で問題点を抱えている。ある瞬間の系の各変数の値を求める方法についてはバックトラックによらないで枚挙的探索を行うde KleerのEQUAL/ATMS [1,2]があるが、このシステムでも状態解釈(episodes)の間の遷移については通常のgeneration & test によって求めていくにすぎない。そこで、時間変化について効率的計算方法を提案する。

2. 細胞分裂法(Cell Division Method)

この方法は少ない変数で不可能なことが判っている遷移を除いておけば、変数を増やしたとき、低次元で不可能な遷移を調べなくて済むという考え方に基づいている。遷移が可能かどうかの判定は全ての符号変数が連続に変化するという仮定に基づく。微係数にもこれを仮定する。したがって各変数の遷移として $+-$, $-+$, $++$ という遷移は認められず、下図のようになる。



Fig. 1 遷移

図中の破線は定数だけに許す。時間の関数としてテラ展開可能で、定数でない量が、ある区間で一定値を取り続けることはないからである。上の図のルールはB. KuipersのI-遷移、P-遷移[3]に対応する。ここでは瞬間から区間への遷移をP I 遷移、区間から瞬間への遷移をI P 遷移という。

2. 1. 変数の増加にともなう遷移の変化

考慮する変数の数を増やしていくとき、各状態はいくつかの更に詳しい状態に置きかわる。状態遷移図全体で考えると、符号変数の増加によるノードの変化の様子が細胞分裂に似ているので、細胞分裂法(CDM)または細分(refinement)と呼ぶ。また逆に詳細な遷移図をもとに特定の符号変数の値を無視して複数の状態をまとめて出来る大まかな図を射影(projection)という。実際の推論時には、細分と射影を何度も繰り返して計算量の増加を抑えるよう制御するのがよい。従来の定性的推論で行っているように既知の変数と因果関係のある変数を選んでいくようにすれば、早い段階で制限が入りやすく、その後の計算量を抑えることが可能である。細分にともない、遷移も次のように変化する。

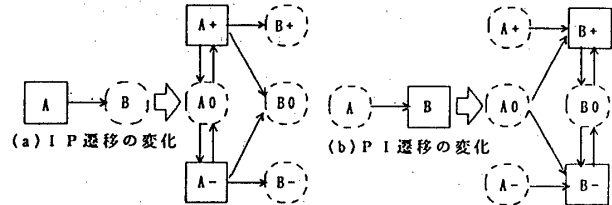


Fig. 2 細分にともない遷移の変化

2. 2. 例題

微分方程式 $x''+ax'+bx=0$ ($a, b \geq 0$)はよく知られているように、パラメタ a, b の関係により減衰振動・単振動・指数減衰・過減衰になる。変形した方程式

$$x' = y - ax, y' = -bx$$

にこの方法を適用すると下図のようになる。

(a)は x のみ考えた場合で、(b)は y も考えた場合である。ここまででは何も制限がないが、 y' を考えると $y' = -bx$ であるから、 y' の値は各状態について一意に定まってしまい、ノードの数は増えない。 y と y' の値から y が次に取りうる値が制限される。例えば (x, y, y') が $(-, +, +) \rightarrow (-, 0, +)$ の遷移は不可能なので削除される。同様にして各遷移を検討すると(c)が得られる。次に x' を考慮してノードを分割する。 $(x, y, y') = (-, 0, +)$ などは $x' = y - ax$ から x' の値が一意に決まるので分割しない。結局 $(-, -, +)$ と $(+, +, -)$ のみ分割して(d)の13状態が得られる。この13状態間で可能な遷移を求めるには、前段階(c)で残っている遷移をFig. 2に従って書き換えればよい。ただし $(-, -, +)$ と $(+, +, -)$ 以外はノードが変化していないので、その間の遷移も増えない x と x' から $(0, -, 0, -) \rightarrow (+, -, -, -)$ 等の遷移が禁止されて(d)になる。

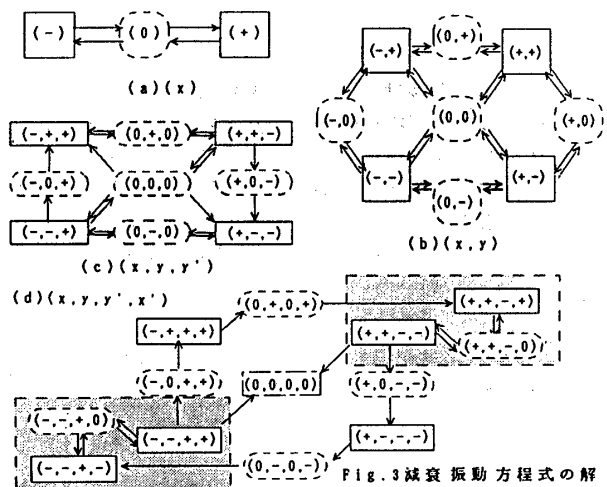


Fig. 3 減衰振動方程式の解

2. 3. CDMの計算量

高次の微係数の採用や射影などの適用に任意性があり、計算量は一般的には計算できないが、CDMを一度適用するのに必要な計算量は元のグラフの大きさから計算できる。状態遷移図が区間が i 個、瞬間が p 個、PI遷移が π 個、IP遷移が ε 個できているとき $D(i, p; \pi, \varepsilon)$ と表す。まず符号変数を1つだけ考えると、 $D(2, 1; 2, 2)$ である。現在のグラフが $D(i, p; \pi, \varepsilon)$ であるとき、CDMで生成されるグラフは最大 $D(2i, 3p+i; 4\pi+2i, 4\varepsilon+2i)$ である。一つのノード(エッジ)の無矛盾性を調べる手間を1とすると、CDMは結局元のグラフのノードとエッジの数のオーダーの手間でできる。この方法では状態遷移図の大まかな構造が早くから得られるため、興味のある遷移の所だけ詳細に調べることが容易に出来る。相互作用の局所性を仮定した因果解析はどの変数を次に考慮するかという順序の選択と関係しており、時間順序を追わずに全体を一度に求めても因果解析がおろそかになるわけではない。全てのノードについて判っている変数が同じなので、各段階で考慮すべき制約条件は全ノード共通である。

3. 状態リストの共時処理

こうして状態遷移図が作成できるが、前記の例では $y'(-bx)$ の追加では新しい分割は生じず、可能性が減るだけである。このように、どれかひとつの符号変数が決まると残りの変数の値も一意的に決まってしまう変数群がある。これを共時変数と呼ぶ。そのうちの一つに符号が束縛されたときに残りも束縛するのは、その場で関係を調べて処理するより、初めに一括処理した方が簡単である。Chronological Backtrack では同じ作業を何度も行いがちなので、この手法は他の計算方法でも有効である。Prologでは符号を次のように表現することによって実現できる。

$$\begin{array}{lll} x < 0 & x = 0 & x > 0 \\ -s("<0") & -s("<0") & -s("<0") \end{array}$$

生体内には日周期リズムの発生や心筋細胞の鼓動など様々な非線形振動子がみられる。生体ダイナミクスを定性的推論で扱おうとすれば、こうした非線形振動子の定性的推論による解を知っておくことは有意義である。非線形振動子の基本的なものとして次式のようなvan der Pol型のものが重要である。

$$\begin{array}{l} x' = y + \varepsilon x(a-x)(a+x) \\ y' = -x \quad (a>0, \varepsilon>0) \end{array}$$

この式はFig.4のようにリミットサイクルを一つ持っている。これに上記の方法を適用するとFig.5のようになる。

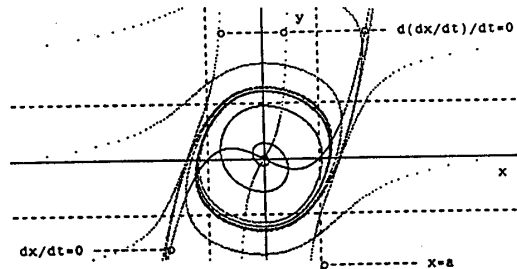


Fig.4 van der Pol型非線形振動子

名前	微係数の符号	基準値との差の符号
[[-a,	[der(s("00")),	[-a,s("00")), [0,s("<0")]]
[0,	[der(s("00")),	[-a,s("<0")), [0,s("00")), [a,s("<0"))]]
[a,	[der(s("00")),	[0,s("<0")), [a,s("00"))]
[a+x,	[der(s([_1,_2])),	[0,_3], [a,s([_4,_5])]]
[a-x,	[der(s([_2,_1])),	[0,s([_6,_7]), [a,s([_5,_4])]]
[dx,	[der(_8),	[0,s([_1,_2])]]
[dy,	[der(s([_2,_1])),	[0,s([_4,_5])]]
[efx,	[der(_9),	[0,_10]]
[fx,	[der(_9),	[0,_10]]
[x,	[der(s([_1,_2])),	[-a,_3], [0,s([_5,_4]), [a,s([_7,_6])]]
[ax-xx,	[der(_11),	[0,_12]]
[y,	[der(s([_5,_4])),	[0,_13]]

Fig.5 共時処理をしたvan der Pol方程式のデータ構造

註 $fx = x(a-x)(a+x)$, $efx = \varepsilon \cdot fx$, $dx = x'$, $dy = y'$

4. おわりに

腎臓における体液調節の仕組みを単純化すると次の水 w とナトリウム n に関する方程式[4]ができる。

$$w' = r \cdot f(n/w - c0) \quad r, c0, w0, w, n > 0$$

$$n' = g(w0 - w) \quad f, g: \text{狭義単調増加関数}$$

これは (x, y) に関する減衰振動の式と2階の微分までの状態遷移図が有向グラフとして同型である。このモデルの第1式はナトリウム濃度によって水分量の調節が行われることを表し、第2式は体液量によってナトリウム量の調節が行われることを表している。この方程式の状態遷移図も (x, y) の時と同じ形をしているが、動物実験によれば振動現象は観測されない。 (x, y) の方程式では a を極めて大きくしたとき過減衰になり振動解は発生しないことが分かっているから、体液調節系でも r を大きくすれば振動しないと類推できる。これは w をつかさどる系が極めて速いことに相当する。実際 w を調節する抗利尿ホルモンADHは、 n を調節するアルドステロンよりはるかに速く作用する。このように定性的な解の振舞いの類似性を利用した推論が考えられる。

参考文献

- [1] Johan de Kleer: How Circuits Work, Artificial Intelligence 24 (1984)
- [2] Johan de Kleer: An Assumption-based TMS, Artificial Intelligence 28 (1986)
- [3] B. Kuipers: The Limits of Qualitative Simulation, Proc. of IJCAI (1985)
- [4] 田中博: 定性的推論とその応用, SICE知識工学研究会資料KE-2, pp.1-6(1986)