

# オントロジーに基づく意味解析を用いた 「化学」正誤問題の自動解法

Automatically Solving True-or-False Questions on Chemistry through Semantic Analysis Based on Formal Ontology

\*1 豊辻 宏旨

Hiroschi Toyotsuji

\*1 松崎 拓也

Takuya Matsuzaki

\*1 佐藤 理史

Satoshi Sato

\*1 名古屋大学大学院 工学研究科 電子情報システム専攻

Graduate School of Engineering, Nagoya University

We developed an automatic solver for true-or-false questions on chemistry. The solver first analyzes the semantics of the question and generates an intermediate representation. The solver then determines whether or not a statement is true based on the intermediate representation. We employ head-driven phrase structure grammar (HPSG) to handle linguistic phenomena such as coordination and relativization. The semantic representation produced through HPSG parsing is based on an ontology for chemistry. It is converted to a prolog query and executed against a knowledge database to derive the answer.

## 1. はじめに

本論文では、化学の正誤問題を対象に開発したソルバについて報告する。これまでの多くの質問応答システムは、ファクトイド型質問や定義型質問に関するものであり、演繹的に回答を行うものは少ない。これに対し、化学の正誤問題では、①問題文から解答に必要な知識は何かを読み取ること②情報源から解答に必要な知識を取得すること③それらを組み合わせで演繹を行い、答えを導くことが必要となる。これを実現するには、問題文中のキーワードなど表層的な情報のみを用いるのは不十分であり、問題の意味をより深く解析する必要がある。本研究では、解答に必要な化学の知識データ（以下、オントロジーと呼ぶ）の作成を行い、それらを利用するために、述語論理形式の中間表現を設計した。提案システムは、自然言語で記述された問題文に対し形式文法を用いた意味解析を行い、中間表現に翻訳し、オントロジーに基づいた正誤判定を行う。本研究の最終目標は、すべての正誤問題に対し、適切な中間表現を生成し、解答することであるが、最初のステップとして、化学反応に関する問題を対象としたプロトタイプを作成した。

化学の問題を対象とした先行研究には Barker らの研究 [1] がある。Barker らは化学を始め、物理、生物の問題に対する自動解法を提案しているが、入力知識表現言語 (KR language) としており、自然言語処理には注力していない。長尾らは、中学理科化学の分野に限定し、意味情報および文脈情報を利用した日本語の解析を行った [2] [3]。彼らは、対象ドメインを限定した上で、上位下位概念をまとめた名詞の意味辞書及び、格文法の考えにより整理した動詞辞書の作成を行った。長尾らの研究では、言語処理に焦点を当てており、解析した結果を用いた計算処理は行われていない。本研究では、対象ドメインを高校化学に限定した上で、長尾らと同様に意味解析のための文法および辞書を作成するが、意味解析の結果を形式化した知識データへと結び付け、演繹的に解を得ることを主眼とする。

以下、2 節では、作成したオントロジーについて述べ、3 節では、問題文に対する意味解析について述べる。4 節では、解析例を示しつつ、解析の流れと解析結果から中間表現を生成するプロセスについて述べる。

問 有機化合物に関する記述として誤りを含むものを一つ選べ。

- ① メタノールにナトリウムを加えると、水素が発生する。
- ② アセトンに酢酸カルシウムを乾留すると生成する。
- ③ アセトンにヨウ素と水酸化ナトリウム水溶液を加えて加熱すると、赤色の沈殿が生成する。
- ④ アセチレンに水を付加させると、ホルムアルデヒドになる。
- ⑤ フタル酸を加熱すると、無水フタル酸が生成する。

図 1: 正誤問題の例

## 2. オントロジー

問題内容の形式的な意味表示を自然言語文から導き、さらにそれを化学知識と対応付けるためには、化学分野における概念間の関係を形式的に整理する必要がある。そこで、化学概念のオントロジーを作成した上で、オントロジー上の各概念を自然言語における表記と対応付けた。正誤問題の解答においては、物質が持つ属性や物質が関わる反応といった化学知識が特に重要となる。オントロジーの葉ノード集合にあたるこれらの知識をデータベースとしてまとめた。オントロジー及びデータベースのインタフェースとしては Prolog を用いた。以下、これらについて詳しく述べる。

### 2.1 化学用語の意味辞書

意味解析を行う際には、問題文中に現れる化学用語が表す概念を同定することが必要となる。例えば、図 1 の③では、「アセトン」や「ヨウ素」が物質を表していること、「赤色」が色を表していることを同定する必要がある。これを実現するために、教科書等を参考に、化学用語を階層的に整理した。図 2 にその一部を示す。高校化学においては、化学物質は混合物と純物質からなるとされており、イオンや元素は化学物質としては扱われない。そのため、イオンや元素については、「化学物質」とせずにそれぞれを独立のクラスとした。「分類用語」は、物質を分類する際に用いられる用語からなる。元素の族あるいは純物質や混合物も物質を分類するクラスとみなせるが、「分類用語」以外のクラスで用いられていない用語を「分類用語」としている。具体的な物質名や個々の反応式など、オントロジーの葉にあたるものを除いたノード数は 116 である。

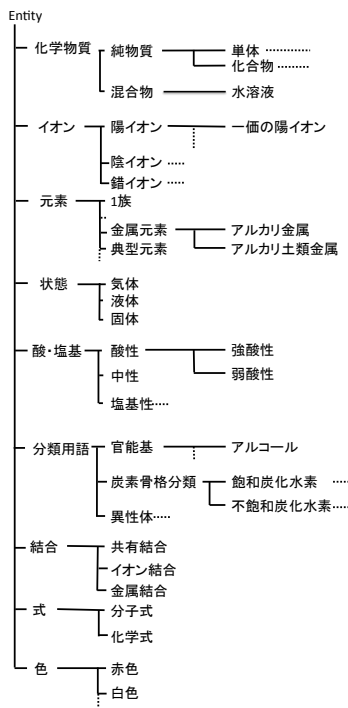


図 2: 化学用語の意味辞書の一部

反応前物質	アクション	反応後物質	反応後の様子	備考
CH3OH, 2, Na, 2	NA	CH3ONa, 2, H2, 1	気体	ナトリウムとアルコールの反応
(CH3COO)2Ca, 1	乾留	CH3COCH3, 1, CaCO3, 1	NA	アセトンの生成
CH3COCH3, 1, I2, 4, NaOH, 6	NA	CHI3, 1, CH3COONa, 1, NaI, 5, H2O, 5	赤色沈殿	ヨードホルム反応
C2H2, 1, H2O, 1	付加	CH3CHO, 1	NA	アセチレンと水の付加反応

図 3: 反応式データの例

物質名	概念	同義表現	状態	色	結合	沸点	融点	匂い	水への特性	酸塩基	性質
水素	単体	H2	気体	無	共有	-252	-259	無	溶けにくい	NA	NA
水酸化ナトリウム水溶液	水溶液	NaOH	液体	無	NA	NA	NA	無	NA	塩基	NA
ヨードホルム	化合物	CHI3	固体	赤	NA	NA	120	NA	溶けにくい	NA	殺菌

図 4: 物質データの例

表 1: 作成した Prolog 述語の一部

述語名	内容
color(A, B)	標準状態で物質 A の色は B
state(A, B)	標準状態で物質名 A の状態は B
reaction(A, B, C)	反応前物質が A を、アクションが B を含み、反応後物質が C であるような化学反応式が存在する

## 2.2 化学の知識ベース

化学の正誤問題の解答には、化学物質の様々な性質に関する知識が必要である。例えば、図 1 の選択肢③では、「アセトン・ヨウ素・水酸化ナトリウムを混合し加熱するとヨードホルムという物質が発生する」という反応に関する情報と「ヨードホルムの色は赤色」という情報が必要となる。このように、高校化学の問題においては特に生じる反応と物質の属性について問われることが多い。そのため、反応式データと物質データの二つを知識ベースとして作成した。作成にあたっては、化学の教科書、資料集、問題集、Wikipedia を参考にした。

図 3 に反応式データの例を示す。NA はその欄には、特に情報が記載されていないことを示す。化学の教科書等では、メタノールにナトリウムを加えた場合の反応式は、 $< 2\text{CH}_3\text{OH} + 2\text{Na} \rightarrow 2\text{CH}_3\text{ONa} + \text{H}_2 >$  と記述される。この反応式は図 3 の最初のエントリに該当する。反応式の左辺と右辺にある物質がそれぞれ図 3 の反応前物質と反応後物質に当たる。反応前物質と反応後物質には、物質名と反応式における係数が記載されている。例えば、反応前物質が 2 種類ある場合は、「(物質 1 の名前) (物質 1 の係数) (物質 2 の名前) (物質 2 の係数)」のように表される。上記の反応式では、気体の水素が発生する。発生した物質が気体であることは、反応式では  $< >$  と表現されるが、このように反応後に特殊な状態が生じる場合は、「反応後の様子」に記述する。また、例えばアセトン ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ) は、酢酸カルシウム ( $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Ca}$ ) に「乾留」という操作を加えることで得られる。このように、反応が起こる上で必要となる条件や操作などを反応の属性「アクション」として記述した。

化学物質データの例を図 4 に示す。「状態」は、その物質が常温・常圧で気体、固体、液体のどの状態で存在しているかを示す。「結合」は、その物質が存在する上でどのような結合状態を持っているかの情報であり、金属結合、共有結合、イオン

結合などを値としてもつ。「性質」は、その物質の特筆すべき性質であり、毒性や昇華性、感光性がある場合は、その情報が記載されている。

## 2.3 オントロジーの利用

本研究では、オントロジーを利用する際にプログラミング言語 Prolog を用いた。作成した Prolog の述語の一部を表 1 に示す。問題文の意味解析結果は Prolog の述語を組み合わせで表現される。それをクエリとして実行することで、オントロジーの情報に基づき解答が導出される。図 1 の①に対応する中間表現は、

?- reaction(['CH3OH', 'Na'], [], X), member('H2', X).

となる。文①では、反応に際しての条件は特に指定されていないため、reaction 述語でアクションを指定する第 2 引数は空リストであり、反応の結果生成する物質のリストが X に渡される。後半の述語 member は、生成物質のリストに 'H2' が含まれることを確かめている。

## 3. 意味解析

問題文を解析するために、主辞駆動句構造文法 (HPSG) [4] [5] を用いた。HPSG は比較的少ない文法規則と多数の語彙項目から成る。文法規則は、一般的な統語規則を記述し、語彙項目は、各単語がもつ統語的制約と意味表現を記述する。

HPSG では、語および句は素性構造を用いて表される。本研究で用いる素性構造の概要を図 6 に示す。SYN 素性は統語的制約を表し、SEM 素性は意味構造を表す。SEM 素性の値のうち、RESTR 素性は語句の意味を predication 型の構造で表される述語のリストとして格納し、INDEX 素性は句全体の

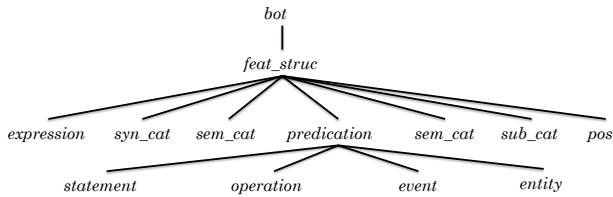


図 5: 型階層の一部

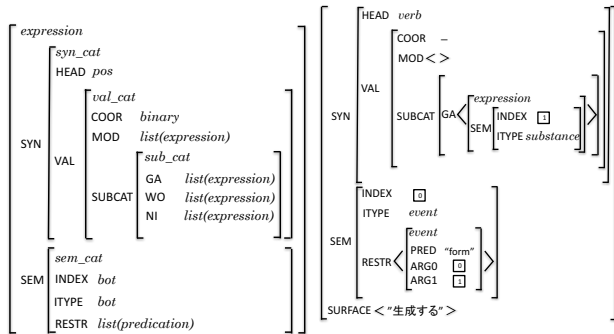


図 6: 素性構造の概要

図 7: 「(物質が) 生成する」の語彙項目

意味に対応する変数を値として持つ。また ITYPE 素性は句の意味タイプを表す。INDEX 素性と別に ITYPE 素性を設定したのは、実体 (エンティティ) としての同一性とエンティティの型の同一性を区別するためである。統語構造と意味構造の関係は構造共有によって指定される。構造共有は、図では四角で囲まれた数字で表されている。

図 5 に型階層を示す。predication は、statement、operation、event、entity の 4 つの派生型に分かれる。entity 以下は、2.1 節で述べたオントロジーの構成と同一であり、entity の種々の派生型は、あるエンティティがオントロジー上で定義されたあるクラスに属することを示す。operation は、操作を表す述語の意味タイプである。例えば、「メタノールにナトリウムを加える」などがこれに当たる。一方、event は、現象を表す述語の意味タイプである。例えば、「水素が発生する」などがこれに当たる。statement はこれら以外の命題を表すタイプである。例えば、「メタノールにナトリウムを加えると水素が発生する」という文は statement に当たる。正誤問題の各選択肢は、意味タイプとして statement 型を持つことが期待される。

図 7 に「(物質が) 生成する」の語彙項目を示す。「生成する」は、event に相当するため RESTR の属性値は、型 event となっている。「(物質が) 生成する」は、ガ格に物質をとる。ガ格部分の ITYPE を substance とすることで、この制約を指定できる。また、「生成する」を表す述語 form は項をとるため、ARG1 を属性に持つ。ARG1 は、ガ格に当たる部分と同一であるから、ARG1 と GA の SEM 中の INDEX が構造共有されている。ARG0 は、「生成する」というイベント自体を表す変数である。

#### 4. 解析例

この節では、図 1 の選択肢③「アセトンにヨウ素と水酸化ナトリウム水溶液を加えると、赤色の沈殿が生成する。」を例として、構文解析から Prolog による中間表現の生成までの過

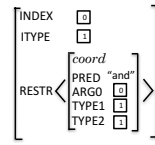


図 8: 「と<sub>1</sub>」の語彙項目

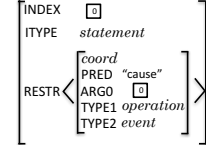


図 9: 「と<sub>2</sub>」の語彙項目

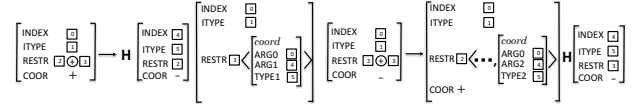


図 10: Coordination-Left

図 11: Coordination-Right

程を説明する。

#### 4.1 解析の流れ

図 12 に例文の導出木を示す。図 8、図 9 はそれぞれ例文中の名詞どうしを接続する「と」(図中の「と<sub>1</sub>」)および節どうしを接続する「と」(図中の「と<sub>2</sub>」)に対応する語彙項目である。「と<sub>1</sub>」は substance 型の 2 つの名詞句を接続し、「と<sub>2</sub>」は左側の operation 型の意味をもつ節と右側の event 型の意味を持つ節を接続し全体として statement 型の意味を持つ文を形成する。導出木の通り、これらの接続は Coordination-Left/Right 規則を用いて行われる。Coordination-Left/Right をそれぞれ図 10 および図 11 に示す。これらのルール・スキーマに従って、「と」の語彙項目で指定された左右の被接続句の意味タイプに関する制約が左右の句の ITYPE 素性を通じチェックされる。図 13 に、例文全体の解析結果として得られる SEM 素性の値、図 14 にそれを通常の述語論理の表記に置き換えたものを示す。

#### 4.2 述語生成の流れ

HPSG 構文解析によって得られる意味表現の個々の要素はオントロジーに即したものとなっている。しかし、全体としての意味表現は、統語構造に従って文の詳細な論理的内容を表示したものとなっており、化学知識ベースの構成とは必ずしも直接対応しない。そこで、構文解析で得られた意味表現を、知識データベースへの問い合わせを表す Prolog クエリに変換する。変換により得られた Prolog クエリを図 15 に示す。この変換は、おおむね RESTR 素性中の個々の predication を Prolog 述語へと置き換えることで実現されるが、predication のタイプによって変換の細部は異なる。以下では、例文から得られる意味表現の場合についてこれを説明する。

まず、「アセトン」などの物質名は、predication としては「あるエンティティ<sub>x</sub> はアセトン (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>CO) である」ことを意味する C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>CO(x) などの 1 項述語として表されているが、知識データベース上では化学物質 (の名前) それ自体がひとつのエンティティとして扱われている。そのため、物質を意味する C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>CO(x) などの形の predication は Prolog 述語としては x = 'C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>CO' という形に変換する。

一方、「沈殿」や「液体」といった普通名詞は、特定の物質名ではなく、ある物理的実体をもつ性質を表す。そのため、例えば「x は沈殿である」ことを表す predication である sediment(x) は prolog 述語としてそのまま使用する。実際の知識ベースとの対応付けは、例えば

sediment(x) :- state(x, '固体').

といった prolog 述語の定義を通じて行われることになる。

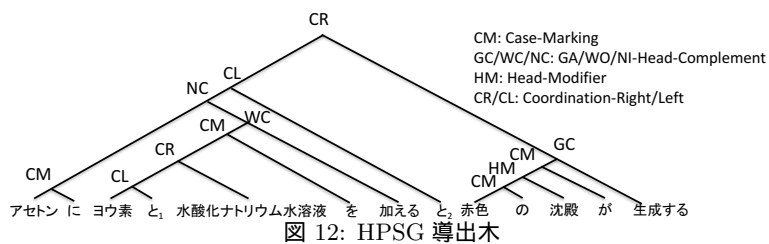


図 12: HPSG 導出木

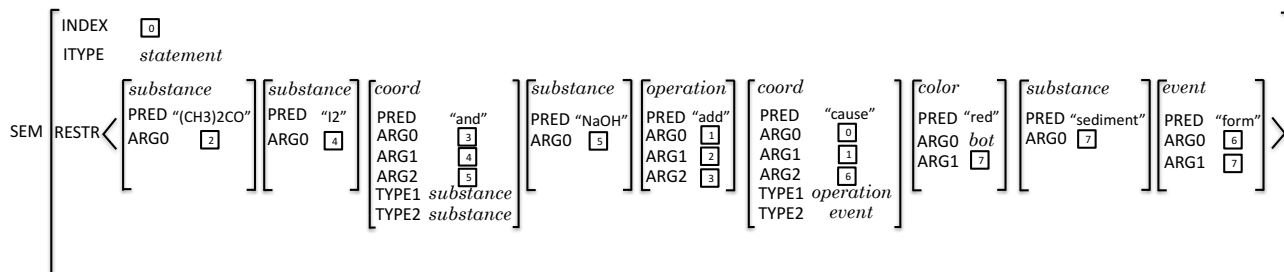


図 13: 問題の解析結果

$C_2H_6CO(X_1) \wedge I_2(X_2) \wedge \text{and}(X_4, X_2, X_3) \wedge NaOH(X_3) \wedge \text{add}(e_1, X_1, X_4) \wedge \text{cause}(e_2, e_1, e_4) \wedge \text{red}(e_3, X_5) \wedge \text{sediment}(X_5) \wedge \text{form}(e_4, X_5)$

図 14: 述語論理形式での表示

?-X2='C2H6CO', X4='I2', mixture(X3,X4,X5), X5='NaOH', add(X1,X2,X3), reaction(X1,--,X6), red(X7), sediment(X7), member(X7,X6).

図 15: Prolog クエリ

「加える」操作を表す predication である  $\text{add}(e_1, X_1, X_4)$  は、第 1 引数が操作自体を表す変数であり、第 2、第 3 引数が加える (混合する) 操作の対象を表している。また、「生ずる」イベントを表す predication である  $\text{form}(e_4, X_5)$  は、 $e_4$  がイベント自体、 $X_5$  が生じた物質を表している。この例題では、「加える」操作  $e_1$  が「(水素が)生成する」イベント  $e_4$  を引き起こしていることが、 $\text{cause}(e_2, e_1, e_4)$  によって表されている。この因果関係は、操作  $e_1$  の結果を反応前物質、イベント  $e_4$  の結果として生じた物質を反応後物質 (の一つ) とする化学反応が存在する、という命題と読み替えることができる。よって、「加える」操作を表すイベント変数  $e_1$  を操作の結果として生じる物理的実体と読み替えて、 $\text{add}(e_1, X_1, X_4)$  を「 $X_1$  と  $X_4$  の混合物が  $e_1$  である」という prolog 述語  $\text{mixture}(e_1, X_1, X_4)$  へと置き換える。同様に、「生成する」イベントを表す predication である  $\text{form}(e_4, X_5)$  におけるイベント変数  $e_4$  を、反応後物質全体と読み替え、「反応後物質  $e_4$  に物質  $X_5$  が含まれる」という prolog 述語  $\text{member}(X_5, e_4)$  へと置き換える。最後に、操作とイベントの因果関係を表す  $\text{cause}(e_2, e_1, e_4)$  を、 $e_1$  および  $e_4$  を反応前/反応後物質とする反応式が存在を表す prolog 述語  $\text{reaction}(e_1, \_, e_4)$  へと置き換える。

以上のような変換の結果得られた prolog クエリを実行することで、operation の対象となる物質が反応前物質であり、event 部の対象となる物質が反応後物質となっている反応式が検索される。対応する反応式があれば、実行結果は true となり、その選択肢を正解とする。例えば、図 15 を入力として実行した場合、 $C_2H_6CO$ 、 $I_2$ 、 $NaOH$  が左辺に含まれる反応式が検索され、右辺に色があかつ固体である生成物が含まれるかがチェックされる。図 3 にあるように、この反応の結果、ヨードホルム  $CHI_3$  が得られる。また図 4 のように、 $CHI_3$  は赤色かつ固体である。よってこの例文の場合 prolog クエリの実行結果は true となる。

## 5. おわりに

本研究では、問題文の解析を行い得られた述語論理式を Prolog クエリに変換した。現在扱える内容は、statement を operation と event から成るものに限定している。つまり「物質

の操作とそれによって得られる物質」に関する問題である。これらの問題については、操作対象と操作後のオブジェクトを取得し、そのオブジェクトが関与する反応式があるかどうかを検索することで正誤を判定できる。本論文では触れていないが、反応式に「アクション」が加わる問題にも同様に処理することができる。今後の課題は、現在のフレームワークでどれほどの問題を解くことができるかを実証することである。また、現在対象としている statement の構成以外にどのようなパリエーションが存在し、それぞれの場合について解析結果からどのようにクエリ生成を行うべきかの調査も必要である。

## 参考文献

- [1] Ken Barker, Vinay K. Chaudhri, Shaw Yi Chaw, Peter Clark, James Fan, David Israel, Sunil Mishra, Bruce W. Porter, Pedro Romero, Dan Tecuci, and Peter Z. Yeh. A question-answering system for AP Chemistry: Assessing KR&R technologies. In *Proceedings of the Ninth International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning*, pp. 488–497, 2004.
- [2] 長尾真, 辻井潤一, 田中一敏. 意味および文脈情報を用いた日本語文の解析 - 名詞句・単文の処理. 情報処理 Vol.17 No.1, pp. 10–18, 1976.
- [3] 長尾真, 辻井潤一, 田中一敏. 意味および文脈情報を用いた日本語文の解析 - 文客を考慮した処理. 情報処理 Vol.17 No.1, pp. 19–28, 1976.
- [4] Ivan A Sag, Thomas Wasow, and Emily M Bender. *Syntactic theory: A formal introduction*. CSLI publications, 2nd edition, 2003.
- [5] Carl Pollard and Ivan A Sag. *Head-driven phrase structure grammar*. University of Chicago Press, 1994.