

センター試験「化学」計算問題の自動解答システムの作成

加藤 汰一[†]

松崎 拓也[‡]

宮田 玲[‡]

佐藤 理史[‡]

[†]名古屋大学工学部電気電子・情報工学科

[‡]名古屋大学大学院工学研究科

[†]kato.taichi@j.mbox.nagoya-u.ac.jp [‡]{matuzaki, miyata, ssato}@nuee.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

本研究は、国立情報学研究所を中心とする研究プロジェクト「ロボットは東大に入れるか」の一環として行なったものである。研究の目標は、大学入試センター試験「化学」のうち、図1のような、ある数量を求める計算問題を解くシステムの開発である。

化学計算問題の構成要素は、実験操作に関する記述、化学の知識に関する記述、求めるべき量に関する記述の三つに分けられる。実験操作に関する記述とは、図1における「液体のメタノール 16g を完全燃焼させたところ、363kJの熱が発生した」のような、実際に行われた操作や起こった事象を表す部分である。化学の知識に関する記述とは、図1における「水 (液体) の生成熱を 286kJ/mol とする」のような、ある物質の生成熱や燃焼熱などの化学知識を記述した部分である。求めるべき量に関する記述とは、「メタノール (液体) の生成熱は何 kJ/mol か」のような、疑問形で記述されている部分である。化学計算問題に解答するためには、これらの三つを形式的にまとめ、そこから求めるべき量を含む数量間の関係を方程式として抽出し、それを解くことが必要である。

化学計算問題の言語処理では、「何をどうした」のような述語-項関係に加え、実験操作とその結果のように複数の事象間の時間関係・因果関係の解析が必要である。特に後者は談話解析における時間関係推定や、含意関係認識に有用と考えられる。

先行研究として、長尾らによる中学校理科化学の意味解析に関する研究 [1][2] があるが、彼らのシステムは解析結果として構文情報を出力するのみで、本研究のように解析結果を用いた演繹・計算までは行っていない。吉田らによる化学計算問題の自動解答に関する研究 [3] では、問題文に対する係り受け解析を基礎としているが、本研究では、統語情報に基づく意味構造を得るために HPSG 構文解析を使用した。豊辻らによる化学正誤問題の自動解答に関する研究 [4] は、HPSG 構文解析器を使用している点は本研究と同様だが、彼らは記述内容の正誤を判断するために述語項構造を

問：液体のメタノール 16g を完全燃焼させたところ、363kJの熱が発生した。二酸化炭素の生成熱を 394kJ/mol、水 (液体) の生成熱を 286kJ/mol とすると、メタノール (液体) の生成熱は何 kJ/mol か。

図 1: 化学計算問題の例

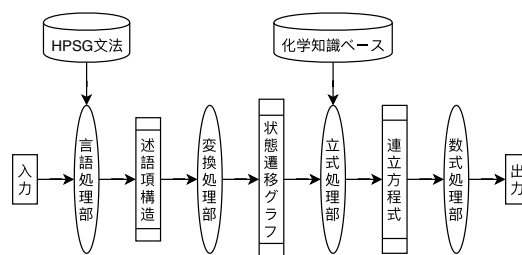


図 2: システムの全体像

prolog クエリに変換している。一方、本研究では述語項構造を、事象間の関係を表すグラフ構造へと変換している。このグラフ構造は吉田ら [3] と同様のものを使用している。

2 化学計算問題の自動解答システム

この節では、まず例を用いて処理全体の流れを説明したのち、問題の意味表現に用いる状態遷移グラフについて述べる。次に、構文解析結果に基づき状態遷移グラフを構成する変換処理および状態遷移グラフから連立方程式を導出する立式処理について説明する。

2.1 全体構成

図 2 にシステムの全体構成を示す。まず、問題文を入力として HPSG 構文解析を行い述語項構造に変換する。図 1 の問題に対する述語項構造の一部を図 3 に示す。各述語は意味タイプ (TYPE) を持ち、操作 (operation) やイベント (event) を表す述語は、おおむね格要素に対応する通常の引数 (ARG1, ARG2, ...) に加え、操作・イベントなどそれ自体を表す引数 (ARG0) を持つ。図 3 では、「完全燃焼させる」を表す述語 burn はその操作自体を表す引数 X5 および燃焼させたメタノールを表す引数 X2 を持つ。また、接続詞「ところ」に対応する述語 cause は原因となった操作 (完全燃

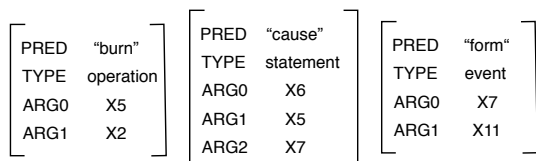


図 3: 述語項構造の例

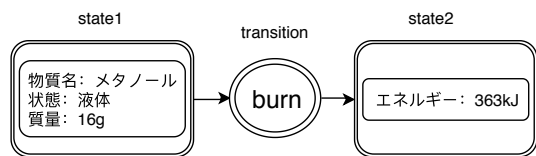


図 4: 状態遷移グラフの例

焼)を表す引数 X5 および結果として起きたイベント(熱の発生)を表す引数 X7 を持つ。

次に、一連の変換規則を適用することで、述語項構造から状態遷移グラフを作成する。図 1 の問題に対しては、図 4 に示す状態遷移グラフが得られる。図 1 の例における「二酸化炭素の生成熱を 394kJ/mol、水(液体)の生成熱を 286kJ/mol とする」の部分は、実験操作ではないため、状態遷移グラフで表現できない。よって、状態遷移グラフとは異なるデータ形式でそれぞれ表す。また、求めるべき量は疑問文「メタノール(液体)の生成熱は何 kJ/mol か」に対する述語項構造によって特定する。

さらに、状態遷移グラフを入力とし、化学反応に関する知識などをまとめた知識ベースを参照しながら方程式を立式する。最後に、方程式を数式処理ソフト maple で処理し解答を導出する。

2.2 状態遷移グラフ

問題文中の実験操作に関する記述は、物理的・化学的な変化を表す。状態遷移グラフとは、このような変化の前後それぞれの状態に存在する物質やエネルギーの情報と、2つの状態間の遷移を引き起こした操作や反応は何か、という情報を表現するデータ構造である。状態遷移グラフは、変化の前後の状態を表す状態ノードと、状態ノード間の遷移関係を表す遷移ノードの 2 種類のノードからなる。2つの状態ノードを1つの遷移ノードが接続する図 4 のような構造が最小の状態遷移グラフとなる。状態ノードには、ある状態に存在する化学物質およびエネルギーを表すデータが格納される。化学物質に関するデータは、物質名・化学式・状態・物質質量・質量・体積・分子量・モル濃度・密度などの属性と属性値のペアの集合として表現され、問題文に記述されている情報によって、それぞれの属性値が定まる。エネルギーを表すデータは単一の属性「エ

表 1: 動詞と遷移タイプ

動詞	遷移タイプ	動詞	遷移タイプ
完全燃焼させる	burn	投入する	mix
加熱する	heat	溶かす	mix
温める	heat	入れる	mix

ネルギー」を持つ。遷移ノードには、状態変化を表す動詞に対応するラベルが格納される。動詞と遷移ノードのラベルの対応関係の一部を表 1 に示す。

述語項構造から直接得られる状態遷移グラフには、問題文から得られる情報のみが記述される。例えば、物質を完全燃焼させるには、酸素が必要であり、結果として、二酸化炭素と水が発生するが、これらの情報は図 1 の問題から直接得られる状態遷移グラフには記述されず、立式処理部において補完される。

2.3 状態遷移グラフの導出

図 1 の問題に対する述語項構造を有向非巡回グラフとして表したものを図 5 に示す。中間ノードが述語名、葉ノードが物質や数量を表す変数に対応し、ノード間のエッジは述語-項の関係を表す。このグラフに以下で述べる変換規則を適用することによって、化学物質やエネルギーに関する情報を集約し、状態ノードに記録するとともに、操作やイベント間の関係から状態遷移グラフの構造を決定する。変換の開始時に、「現在記述の対象となっている状態」を表すグローバル変数 `current_state` に空の状態ノードを設定する。

まず、化学物質に関する情報の集約を行う規則について、図 6 の名詞句「液体のメタノール 16g」を例に説明する。「g」は単位付き数値を示す述語であるので、その変数 X1 の属性「数量」の値が「16」と決定される。「quantify」は物理的実体の数量を示す述語であるので、メタノールを表す変数 X2 の属性「質量」の値が「16g」と決定される。「liquid」は化学物質が液体であることを示す述語であるので、変数 X2 の属性「状態」の値が「液体」と決定される。同様に、図 5 における発生した熱を表す変数 X11 の属性「エネルギー」の値が「363kJ」と決定される。述語項構造のうち、名詞句に対応する部分すべてに対して上記の処理をまず行う。

これらの情報が集約された変数を、動詞・接続詞に対応する述語に対する変換規則において、状態遷移グラフの状態ノードに格納する。動詞・接続詞に対応する述語は、問題文に出現する順に処理する。

動詞は、operation・event・statement の 3 種類に分かれていると考える。operation は操作を表す述語の意味タイプであり、図 1 では「液体のメタノール 16g

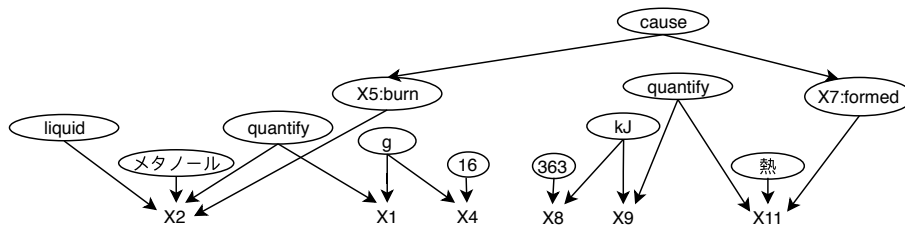


図 5: 述語項構造のグラフの例

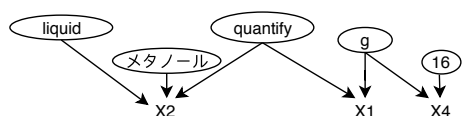


図 6: 名詞句「液体のメタノール 16g」に対する述語項構造のグラフ

```
def burn(ARG1)
  current_state.substance += ARG1
  current_state.out_transition.label = "burn"
end

def cause()
  new_state = State.new
  current_state.out_transition.result = new_state
  current_state = new_state
end

def form(ARG1)
  current_state.energy = ARG1
end
```

図 7: 状態遷移グラフへの変換規則の擬似コード

を完全燃焼させた」がこれに当たる。event は「363kJ の熱が発生した」のような、現象を表す述語の意味タイプである。statement はそれ以外の命題を表す意味タイプであり、接続詞「ところ」で接続された複文全体「X したところ Y が起きた」などがそれに当たる。

問題文における実験操作は、「A に B を入れ、C を加えると、D が発生し、E が生成される」のように一般には複数の operation (この例では「入れる」「加える」と複数の event (この例では「発生する」「生成される」) から構成されている。本研究では、operation によって遷移前の状態および遷移の種類が記述され、event によって遷移後の状態が記述されると考える。そこで、operation をタイプとする述語を処理する際は、引数となっている物質・エネルギーを current_state に格納するとともに、表 1 に示す対応する遷移タイプを状態遷移グラフの遷移ノードに設定する。また、operation が

連続する場合、現在遷移ノードに設定されている遷移タイプを、後から処理する operation に対応する遷移タイプに上書きする。次に、operation と event を結びつける接続詞 (上の例では「と」) の処理において、変化後を表す新たな状態ノードを生成し、current_state をそのノードで置き換える。これにより、後続する event が記述する内容は状態遷移後のノードに格納される。また、event が連続する場合も同様に、current_state、つまり、状態遷移後のノードに、そのイベントが記述する内容が格納される。

図 5 のグラフ中の動詞・接続詞に対応する述語「burn (完全燃焼させる)」「cause (ところ)」「form (発生する)」に対する変換規則を疑似コードとして図 7 に示す。動詞に対応する変換規則 (関数) の引数は、述語の引数 ARG1、ARG2、... となっている物質、エネルギーを表す変数である。接続詞に対応する変換規則は引数を取らない。状態ノード s に対して、s を変化前の状態とする遷移ノードを s.out_transition とする。また、遷移ノード t の結果状態を表す状態を t.result とする。

2.4 立式処理部

生成された状態遷移グラフを入力とした立式処理について、図 4 の状態遷移グラフを例に説明する。まず、状態ノードに格納されている物質のデータそれぞれに対して、不足している属性値の情報を補充する。図 4 のグラフに対しては、メタノールの化学式「CH₃OH」および分子量「32」を知識ベースから取得し、属性値として設定する。その後、遷移ノードのラベルに従って、立式処理を場合分けする。例えば図 4 のグラフの遷移ノードのラベル burn は「完全燃焼」という反応を示しており、これは物質と酸素を反応させて二酸化炭素と水と熱を得るものである。よって、変化前の状態ノードに格納されている物質と酸素を反応させ、二酸化炭素と水、および変化後の状態ノードに格納されている熱が発生することを表す方程式を立式する。ラベル mix は、「物質の混合」を示しており、変化前の

表 2: 評価結果

問題	正解率
開発データ	24 問/47 問
テストデータ	15 問/59 問

表 3: エラー分類

データ	エラー箇所	内容	該当数
開発データ	言語処理部	語彙項目の不足	13 問
		解析が困難なもの	1 問
		その他	7 問
	変換処理部	変換規則の不足	0 問
立式処理部	立式処理の不備	2 問	
テストデータ	言語処理部	語彙項目の不足	25 問
		解析が困難なもの	6 問
		その他	10 問
	変換処理部	変換規則の不足	2 問
	立式処理部	立式処理の不備	1 問

状態ノードに格納されている化学物質を左辺にもつ化学反応式を、知識ベースから取得する。そして、そのデータから反応後の物質および反応熱を抽出し、その反応を表す方程式を立式する。

3 実験

センター試験形式の計算問題のうち、「化学反応とエネルギー」の単元の内容に相当するものを用いてシステムの評価を行った。この単元に相当する問題は毎年のセンター試験中の計算問題のうちおよそ 15%~20%の配点を占める。

3.1 実験設定

センター試験過去問・予備校模試から上記の単元に対応する計算問題を収集し、開発データ・テストデータとしてそれぞれ 47 問・59 問を用いた。問題のうち、解答システムが問題を解く上で必要な情報を含む文のみを入力とした。例えば、図 8 の問題における「黒鉛と二酸化炭素を反応させて一酸化炭素を得る反応の熱化学方程式は次のように表される。」のような記述はあらかじめ削除した。

3.2 実験結果およびエラーの分析

評価結果を表 2 に示す。開発データに対しては約 50%、テストデータに対しては約 25%の問題に対して正解が得られた。また、開発データ・テストデータで状態遷移グラフを生成する必要がある問題で、正しい解答が得られたものはそれぞれ 8 問・1 問であった。その他の正解した問題は、図 8 の例のように、実験操作の記述を含まないため状態遷移グラフを生成する必要がない問題だった。

問：黒鉛と二酸化炭素を反応させて一酸化炭素を得る反応の熱化学方程式は次のように表される。

$$\text{C(黒鉛)} + \text{CO}_2(\text{気}) = 2\text{CO}(\text{気}) - 172\text{kJ}$$
 二酸化炭素の生成熱を 394kJ/mol とすると、一酸化炭素の燃焼熱は何 kJ/mol か。

図 8: 不要な文を含む計算問題の例

システムが正しい解答を出力できなかった問題について原因を分類した結果を表 3 に示す。全てのエラーのうち、最も多いのが語彙項目の不足であった。例えば、「(エネルギー)が発生した」という語彙項目は存在したものの、それと同義の「(エネルギー)が観測された」という語彙項目を用意していなかった。次に多いのが言語処理部における「その他」のエラーであった。図 8 における「 $\text{C(黒鉛)} + \text{CO}_2(\text{気}) = 2\text{CO}(\text{気}) - 172\text{kJ}$ 」のような熱化学方程式を解析する仕組みは存在するが、「 $\text{HCl} + \text{NaOH} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$ 」のような、化学反応式やイオン反応式などを解析する仕組みを作成していないため、そのような問題は正しく解析されなかった。解析が困難なものには、比を表す「エタンの物質質量:プロパンの物質質量」や化学式に変数が含まれる「分子式 C_3H_n 」のような、出現頻度が小さく、かつ語彙項目として表現しにくいものがあった。

4 おわりに

本研究では、センター試験「化学」の計算問題に対する自動解答システムを作成した。HPSG 構文解析から得られる述語項構造を、実験操作やその結果を表現する状態遷移グラフに変換し、それを入力として方程式を立式するアプローチをとった。今後は、エラー分析で見出された課題一つ一つに対して対策を行い、システム全体を頑健なものにしていく。

参考文献

- [1] 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.
- [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-文客を考慮した処理. 情報処理, Vol.17, No.1, pp.19-28, 1976.
- [3] 吉田達平, 松崎拓也, 佐藤理史, 大学入試化学の計算問題の自動解答システム. 2015 年度人工知能学会全国大会, 2015.
- [4] 豊辻宏旨, 古瀬弘樹, 松崎拓也, 佐藤理史, HPSG 構文解析を利用した化学正誤問題の自動解答. 第 4 回自然言語処理シンポジウム, 2017.