

Wydział Filozofii i Socjologii UMCS

PIOTR GIZA

*Filozoficzne i metodologiczne aspekty
komputerowych systemów odkryć naukowych*

Philosophical and Methodological Aspects
of Computer Discovery Systems

1. WSTĘP

W latach siedemdziesiątych kilku badaczy sztucznej inteligencji w USA zwróciło swoje zainteresowania na obszar uważany jak dotąd jedynie za domenę geniuszu – odkrycia naukowe. Chodziło o zaprojektowanie i uruchomienie systemów komputerowych, które miały modelować rzeczywisty historyczny proces odkrycia naukowego w dziedzinach takich jak matematyka, fizyka, chemia, czy biologia. Teoria odkryć maszynowych leży na obszarze zainteresowań zarówno filozofii nauki, jak i samej nauki. Jest formą ścisłego uprawiania filozofii nauki zmuszającą do dbałości o szczegóły i precyzyjnego wyartykułowania swoich idei. Współczesne systemy odkryć mają też coraz większe znaczenie dla samej nauki: Są one w stanie znaleźć równania empiryczne pasujące do danych wejściowych w laboratorium, przeanalizować bazy danych pod kątem użytecznej wiedzy, formułować i uzasadniać hipotezy na temat ukrytej struktury materii wyjaśniającej zjawiska obserwowalne. W idealnym, docelowym przypadku możemy sobie takiego maszynowego odkrywcy wyobrazić jako robota, który przeprowadza eksperymenty i rozwija teorie na podstawie analizy uzyskiwanych danych¹.

¹ Patrz J. M. Żytkow, *Automatyzacja odkrycia naukowego: stan i perspektywy*, „Filozofia Nauki” 1993, 4, s. 38-54. Jest to, o ile wiem, pierwsza opublikowana w Polsce praca poświęcona

Teoria odkryć maszynowych nigdy nie ograniczała się do konstruowania systemów dokonujących odkryć o charakterze empirycznym bądź teoretycznym w dziedzinie nauk przyrodniczych. Od samego początku równoległe z nimi powstawały systemy dokonujące odkryć w dziedzinie matematyki (głównie arytmetyki liczb naturalnych i teorii zbiorów)². Ponadto, w ciągu ostatnich kilku lat można zaobserwować gwałtowny wzrost zainteresowania badaczy konstruowaniem systemów dokonujących odkryć w bazach danych³. Odkrycia dokonywane w bazach danych są interesujące z kilku powodów.

Wielkie (rzędu giga- i terabajtów) bazy danych są powszechnie spotykane w biznesie, nauce, służbie zdrowia czy technice. Interesujące historycznie informacje, np. dotyczące wahań giełdowych, czy pogody są dostępne właśnie w postaci baz danych. Każda duża firma wkłada wiele wysiłku w zaprojektowanie i aktualizowanie baz danych. Wielkie bazy danych nie zostały nigdy systematycznie zbadane pod kątem znalezienia interesujących prawidłowości. Ze względu na ich rozmiar, odkrycie takich prawidłowości przez ludzkiego badacza jest po prostu niemożliwe.

Zbadanie tych baz danych i wykrycie w nich ciekawych regularności stanowi interesujące wyzwanie dla systemów odkryć maszynowych. Nie bez znaczenia jest fakt, do którego badacze raczej niechętnie się przyznają, że odkrycia w bazach danych są źródłem dużych pieniędzy. Wiele firm czy agencji rządowych jest gotowych wydać znaczne fundusze na wspieranie badań nad konstruowaniem systemów dokonujących takich odkryć. Co więcej, ponieważ operowanie gotowym systemem jest skomplikowane i wymaga znajomości specyfiki zarówno samego systemu, jak i środowiska, w którym on funkcjonuje⁴, pojawia się intratna profesja „operatora” systemów dokonujących odkryć w bazach danych.

W pracy niniejszej koncentruję się na systemach dokonujących odkryć w naukach przyrodniczych, głównie w fizyce. O ile odkrycia w bazach danych

systemom odkryć maszynowych, napisana przez jednego z najwybitniejszych badaczy zajmujących się tą dziedziną. Praca zawiera bogatą bibliografię.

² Jednym z pierwszych takich systemów był AM (*Artificial Mathematician*). Patrz D. B. Lenat, *Automated Theory Formation in Mathematics*, „Proceedings of the Fifth International Joint Conference on Artificial Intelligence” 1977, s. 833-842.

³ Patrz np. prace zbiorowe: G. Piatetsky-Shapiro, (ed.), „Proc. of AAAI-91 Workshop on Knowledge Discovery in Databases” 1991, San Diego, CA.; J. M. Żytkow, (ed.), „Proc. of the ML-92 Workshop on Machine Discovery, National Institute for Aviation Research”, 1992, Wichita, KS.

⁴ System odkrycia (*discovery system*) to z reguły program napisany w języku LISP, którego uruchomienie i użycie wymaga umiejętności posługiwania się interpreterem LISP w środowisku systemu operacyjnego UNIX.

mają ogromne znaczenie praktyczne, o tyle zastosowanie systemów odkryć do nauk przyrodniczych jest interesujące zarówno z punktu widzenia filozofii nauki, jak i samej nauki.

W części 2 przedstawiam systemy odkryć empirycznych. Część 3 poświęcona jest systemom odkrywającym strukturę materii. Wreszcie w części 4 podsumowuję rozważania na temat systemów odkryć wskazując na perspektywy ich rozwoju oraz implikacje dla nauki i filozofii nauki.

2. SYSTEMY ODKRYĆ EMPIRYCZNYCH

Systemy odkryć naukowych pojawiły się w latach siedemdziesiątych. Początkowo były to proste systemy, których zadaniem było poszukiwanie regularności typu numerycznego w sztucznie spreparowanych „danych” empirycznych. Stopniowo, w miarę doskonalenia stosowanych metod heurystycznych, zaczęto tworzyć systemy, które były w stanie sformułować proste prawa fizyki takie jak np. równanie stanu gazu doskonałego, prawo załamania światła, prawo Coulomba, prawo spadku swobodnego Galileusza, czy prawo Blacka (bilans cieplny). Kolejne systemy stawały się coraz doskonalsze przechodząc swego rodzaju ewolucję.

Można podać kilka kryteriów oceny takich systemów wskazujących na wyraźny postęp w tej dziedzinie. Pierwsze z nich związane jest z formą odkrywanych praw i proponowanych „terminów teoretycznych”. Drugie dotyczy możliwości określenia przez system zakresu stosowalności odkrytych praw. Trzecie wreszcie, związane jest z projektowaniem i wykonywaniem przez system nowych eksperymentów.

Również mechanizmy heurystyczne wbudowane w większość systemów odkryć empirycznych posiadają pewne wspólne cechy, takie jak definiowanie nowych terminów, dostosowanie metod przeszukiwania do charakteru napotkanych regularności, czy rekurencyjne stosowanie tych samych metod do nowych przypadków. Szerzej o ewolucji metod heurystycznych na przykładach kolejnych systemów i o kryteriach ich oceny piszę w innej pracy⁵. W tym miejscu ograniczę się do pobieżnego omówienia kilku historycznie ważnych systemów starając się uwypuklić aspekty filozoficzne bez wdawania się w szczegóły techniczne.

Pierwszym historycznie systemem odkryć empirycznych, działającym zgodnie ze wspomnianymi metodami heurystycznymi, był System Indukcji Zależności

⁵ P. Giza, *O systemach odkryć naukowych*, „Zeszyty Lubelskiego Towarzystwa Sztucznej Inteligencji”, 1995, (w przygotowaniu).

Funkcyjnych (*Function Induction System*) opracowany przez Gerwina⁶. Zadaniem, jakie postawił sobie Gerwin była rekonstrukcja mechanizmów heurystycznych rozumowania ludzkiego w sytuacji problemowej polegającej na odgadnięciu skomplikowanych zależności funkcyjnych jednej zmiennej na podstawie danych obarczonych pewnym błędem statystycznym. Gerwin zastosował w swoim systemie reguły poszukiwań heurystycznych wzorowanych na zachowaniu się ludzkich naukowców-eksperymentatorów, których poddał skrupulatnemu badaniu w analogicznej sytuacji problemowej. Stwierdził on przede wszystkim, że eksperymetatorzy z reguły stosują reguły heurystyczne wykrywania prawidłowości funkcyjnych (takich jak np. monotoniczność, okresowość itd.) zamiast statystycznych algorytmów dopasowania krzywych do danych. Był to istotny krok definiujący w pewnym sensie zadania systemów odkryć empirycznych.

Chociaż system Gerwina miał poważne ograniczenia⁷, to wytyczył kierunki dalszych badań w dziedzinie odkryć praw numerycznych. Przede wszystkim, pokazał że problem ten poddaje się heurystycznym metodom przeszukiwania, które już wcześniej z powodzeniem stosowane były przy próbach wyjaśniania przejawów inteligentnego ludzkiego zachowania.

Następnym krokiem rozwojowym w dziedzinie odkryć empirycznych był system BACON⁸. Dostawał on na wejściu zbiór niezależnych zmiennych o wartościach mierzalnych i żądał podania wartości zmiennych zależnych. Przykładowo, zmiennymi niezależnymi mogły być ciśnienie P , temperatura T i masa gazu M , a zmienną zależną – objętość V . Wielkości niezależne mogły w systemie przyjmować zarówno wartości liczbowe, jak i symboliczne, natomiast wielkości zależne, jedynie wartości liczbowe.

BACON ponownie odkrył wiele praw znanych z historii fizyki i chemii eksperymentalnej, o których wspominałem na wstępie tej części pracy. Podobnie jak w systemie Gerwina, podstawą działania systemu było odkrywanie zależności funkcyjnej pomiędzy dwiema wielkościami liczbowymi. BACON dokonywał tego poprzez zastosowanie trzech prostych dyrektyw heurystycznych.

⁶ D. G. Gerwin, *Information Processing, Data Inferences, and Scientific Generalization*, "Behavioral Sciences" 1974, 19, s. 314-325.

⁷ System mógł odkrywać jedynie funkcje jednej zmiennej, a definiowane przez niego terminy miały bardzo prostą postać. Przede wszystkim jednak, system był testowany jedynie na sztucznie wygenerowanych zbiorach danych. Tym samym jego przydatność do dokonywania odkryć w realnym świecie pozostaje niejasna i raczej wątpliwa.

⁸ G. L. Bradshaw, P. Langley, and H. Simon, *H. BACON.4: The Discovery of Intrinsic Properties*, "Proceedings of the Third Biennial Conference of the Canadian Society for Computational Studies of Intelligence" 1980, s. 19-25.

Reguła 1.

Jeśli wraz ze wzrostem Y wzrasta X – zdefiniuj stosunek X/Y i zbadaj, jak zachowują się jego wartości.

Reguła 2.

Jeśli wraz ze wzrostem Y maleje X – zdefiniuj iloczyn XY i zbadaj, jak zachowują się jego wartości.

Reguła 3.

Jeśli wartości X są bliskie stałej, to wysuń hipotezę, że wartość X jest zawsze stała.

Mimo swej prostoty, powyższe reguły heurystyczne działając razem decydują o poważnym potencjale odkrywczym systemu. BACON wspaniale „radzi” sobie z prostymi prawami w rodzaju prawa spadku swobodnego Galileusza. Analiza danych wejściowych i kolejne zastosowanie tych reguł pozwalają mu sformułować to prawo w postaci: $D/T^2 = const$, gdzie D jest odległością przebywaną przez swobodnie spadające ciało, a T czasem spadania.

Znacznie bardziej skomplikowane jest funkcjonowanie systemu w przypadku zależności z wieloma zmiennymi, takimi jak wspomniane już prawo bilansu cieplnego (prawo Blacka)⁹:

$$(c_1M_1 + c_2M_2)T_f = c_1M_1T_1 + c_2M_2T_2$$

gdzie: $c_1 M_1 T_1$ i odpowiednio $c_2 M_2 T_2$ oznaczają ciepła właściwe, masy i temperatury dwu cieczy (np. wody i rtęci) zmieszanych w kalorymetrze, a T_f – temperaturę końcową mieszaniny.

W świetle przytoczonych na wstępie tej części pracy kryteriów oceny systemów odkryć empirycznych BACON stanowi znaczny postęp w porównaniu z systemem Gerwina szczególnie pod względem formułowania praw i definiowania nowych terminów, w tym również terminów reprezentujących wewnętrzne własności substancji takich jak ciepło właściwe.

System nie ma jednak wbudowanych mechanizmów analizy zakresu stosowalności odkrywanych zależności numerycznych. Przykładowo, prawo Blacka w przytoczonej tu postaci, choć słuszne w szerokim zakresie temperatur, nie uwzględnia jednak przejść fazowych (np. topnienia lub krzepnięcia). Co więcej, możliwości systemu związane z przeprowadzaniem eksperymentów są poważnie

⁹ Szerzej omawiam to zagadnienie w pracy P. Giza, *O systemach...*

ograniczone i niedoskonałe. Sprowadzają się one do wbudowanych mechanizmów kombinatorycznego generowania danych wejściowych na podstawie znanych systemowi wartości zmiennych niezależnych. Poważną wadą systemu jest brak możliwości „adaptacji do danych” – inteligentnego generowania eksperymentów w zależności od charakteru dokonanych obserwacji.

Wspomnianych wad nie ma już następca BACONA – FAHRENHEIT¹⁰, który jak przyznaje jego twórca, jest w istocie znacznie zmodyfikowaną wersją BACONA. Podobnie jak jego poprzednik, system formułuje prawa empiryczne i definiuje terminy „teoretyczne” przy pomocy wielkości obserwowalnych. Zasadnicza różnica polega natomiast na postaci formułowanych przez system praw.

Formułując zależności liczbowe FAHRENHEIT wyposaża je w warunki graniczne: minimalne i maksymalne wartości zmiennych niezależnych, dla których dane prawo jest słuszne. Te dodatkowe zmienne traktowane są przez system na równi z pozostałymi zmiennymi. Oznacza to, że system stara się ustalić ich zależność od pozostałych zmiennych niezależnych.

Jeśli system w trakcie przeprowadzania eksperymentów znajdzie wartości graniczne, dla których prawo przestaje być słuszne, to rekurencyjnie stosuje procedurę polegającą na dzieleniu przez dwa przedziału pomiędzy najmniejszą znaną wartością, dla której prawo nie jest już słuszne, a największą znaną wartością, dla której jest ono jeszcze słuszne. Ta procedura generowania eksperymentów jest kontynuowana aż do osiągnięcia wymaganej dokładności.

Postępując w naszkicowany sposób FAHRENHEIT jest w stanie odkryć skomplikowane prawa z wieloma zmiennymi oraz podać zakres ich stosowalności.

Podsumowując rozważania na temat omawianego systemu, należy stwierdzić, że wprowadza on kilka istotnych ulepszeń w porównaniu ze swym poprzednikiem – BACONEM. Przede wszystkim FAHRENHEIT jest w stanie reprezentować zakres słuszności odkrywanych praw przy pomocy wbudowanych reguł heurystycznych. Wymaga to między innymi selektywnego procesu przeprowadzania eksperymentów i „inteligentnego” gromadzenia danych. Ponadto system może zmieniać kolejność rozważanych zmiennych niezależnych, co w pewnych przypadkach pozwala mu odkryć regularności niedostrzegane przez BACONA oraz może pomijać w dalszej analizie zmienne nieistotne, nie mające wpływu na badane parametry.

Niemniej jednak, jak przyznają twórcy FAHRENHEITA, reprezentacja którą się on posługuje (przede wszystkim przy określaniu zakresu stosowalności praw)

¹⁰ J. M. Żytkow, *Combining many searches in the FAHRENHEIT discovery system*, „Proceedings of the Fourth International Workshop on Machine Learning” 1987, s. 281-287.

przypomina raczej zabawę w liczby (*number games*) i niewiele mówi o jakościowej strukturze realnych fizycznych układów, do których odnoszą się odkrywane prawa.

Następnym istotnym krokiem rozwojowym w dziedzinie systemów odkryć empirycznych jest system IDS¹¹ (*Integrated Discovery System*) po raz pierwszy opisany w 1986 r. Stanowi on właściwie program badawczy będący w ciągłym rozwoju, oparty na zupełnie innym, znacznie bogatszym od poprzednich systemów, sposobie reprezentowania badanych układów fizycznych.

IDS reprezentuje układy fizyczne przy pomocy tzw. schematów jakościowych, które określają zmiany w czasie atrybutów jednego lub kilku obiektów. Schemat składa się ze skończonej liczby stanów, w jakich układ znajduje się w kolejnych przedziałach czasowych. Dla analizowanej już sytuacji wymiany ciepła między dwoma ciałami (prawo Blacka) schemat składa się z trzech stanów. Każdy z nich opisywany jest przez wartości określonych atrybutów i ich zmian w czasie (tzw. pochodnych jakościowych). Pierwszy opisuje ciała o stałych w czasie temperaturach przed ich zetknięciem. Odległość ciał jest większa od zera a ich stałe w czasie temperatury różnią się od siebie. Drugi stan opisuje układ po zetknięciu ciał, lecz przed wyrównaniem się temperatur. Odległość ciał równa się zero, przyrosty temperatury ciała cieplejszego są ujemne, a zimniejszego dodatnie. Wreszcie trzeci stan opisuje układ po wyrównaniu się temperatur: odległość ciał równa się zero, ich temperatury są równe i stałe w czasie.

Powyższy sposób opisu układów fizycznych pozwala systemowi IDS zrelatywizować odkrywane prawa do konkretnego obiektu i konkretnej chwili czasu. Daje to podwójne korzyści:

Po pierwsze, schematy jakościowe definiują kontekst, w którym odkrywane prawa nabierają sensu – jeśli układ nie pasuje do opisanego schematu, to nie ma sensu mówić o prawie Blacka. Co więcej, reprezentacja taka jest w stanie zdać sprawę z przejść fazowych, a więc wychwycić temperatury topnienia i wrzenia oraz czasy trwania przejść fazowych, co pozwala określić odpowiednio ciepło topnienia i parowania. Tym samym pozwala w naturalny, jakościowy sposób sformułować warunki ograniczające słuszność prawa Blacka, podczas gdy FAHRENHEIT uchwycił te ograniczenia czysto ilościowo.

Po drugie, schematy jakościowe zawężają przestrzeń poszukiwań dla praw ilościowych. określając masy, początkowe temperatury i własności wewnętrzne substancji biorących udział w wymianie ciepła.

¹¹ P. Langley, B. Nordhausen, *A framework for empirical discovery*, „Proceedings of the International Meeting on Advances in Learning” 1986, Les Arcs, France.

System IDS znajduje się ciągle we wczesnej fazie rozwojowej, choć jest ciągle wzbogacany i udoskonalany. Nie posiada on tak wyrafinowanych mechanizmów badania granic stosowalności praw jak np. FAHRENHEIT. Niemniej jednak jest oceniany jako najbardziej obiecujący spośród systemów odkryć empirycznych, a to ze względu na fakt integrowania w sobie możliwości odkrywania zarówno praw jakościowych, jak ilościowych, co jest podstawowym zadaniem przyszłych systemów odkryć.

3. SYSTEMY ODKRYWAJĄCE STRUKTURĘ MATERII

Równoległe z rozwojem systemów dokonujących odkryć empirycznych trwały prace nad komputerową rekonstrukcją odkrywania ukrytej struktury materii. Zaowocowały one powstaniem już na początku lat osiemdziesiątych pierwszych systemów dokonujących odkryć w dziedzinie chemii, fizyki i genetyki. Systemy te, jak postaram się wykazać, są znacznie bardziej interesujące z punktu widzenia filozofii nauki niż systemy odkryć empirycznych.

Pierwszym z tych systemów był DENDRAL¹². Zajmował się on rekonstrukcją struktury molekuł związków organicznych tworząc dla danego wzoru sumarycznego związku chemicznego wszystkie możliwe izomery.

Kolejny system, STAHL¹³ opracowany w 1986 roku analizował reakcje chemiczne i stwierdzał, które substancje są pierwiastkami, a które związkami chemicznymi oraz starał się ustalić ich skład. Ta sama grupa badaczy, w rok później, dokonała kolejnego kroku na drodze komputerowej analizy ukrytej struktury – opracowany przez nich system DALTON¹⁴ był już w stanie zaproponować skład atomowy molekuł substancji chemicznych.

Metody wypracowane przy konstrukcji tych systemów zostały następnie zastosowane do fizyki cząstek elementarnych. Udoskonalona wersja STAHLa oraz system REVOLVER¹⁵ zajmowały się odkrywaniem struktury kwarkowej

¹² R. Lindsay, G. M. Buchanan, E. A. Feigenbaum, R. Lederberg, *Applications of Artificial Intelligence for Organic Chemistry: The DENDRAL Project*, 1980, New York, McGraw-Hill.

¹³ J. M. Żytkow, H. A. Simon, *A Theory of Historical Discovery: The Construction of Componential Models*, „Machine Learning” 1986, 1, s. 107-136.

¹⁴ P. Langley, H. Simon, G. L. Bradshaw, J. M. Żytkow, *Scientific Discovery: Computational Explorations of the Creative Processes*, 1987, MA, the MIT Press.

¹⁵ D. Rose, *Using Domain Knowledge to Aid Scientific Theory Revision*, „Proceedings of the Sixth International Workshop on Machine Learning” 1989, San Mateo, CA, Morgan Kaufmann Publishers, s. 272-277.

cząstek elementarnych. Jednak najdoskonalszym oraz najważniejszym poznawczo systemem generującym modele kwarkowe jest, opracowany w 1990 r. system GELL-MANN¹⁶, któremu ze względu na jego znaczenie poznawcze poświęcę nieco więcej miejsca.

System ten wyróżnia bogactwo reprezentowania modeli kwarkowych. Jako jedyny wprowadza on bowiem atrybuty dla postulowanych cząstek sub-elementarnych. Przede wszystkim jednak, system dokonuje wyczerpującego przeszukiwania wszystkich możliwych modeli kwarkowych w poszukiwaniu najprostszego modelu, adekwatnego do danych. Tym samym możemy tu mówić nie tylko o poszukiwaniu, ale i *uzasadnieniu* słuszności znalezionej modelu kwarkowego.

Zadaniem GELL-MANNA było zanalizowanie danych na temat cząstek elementarnych (dokładniej: *hadronów*) znanych w 1964 roku i sformułowanie na tej podstawie hipotezy (lub hipotez) na temat istnienia prostszej, ukrytej w nich struktury materii. Jednak pomimo całkowitej zgodności wyników, GELL-MANN dochodzi do hipotezy o istnieniu kwarków na zupełnie innej drodze, niż zrobili to fizycy-teoretycy w roku 1964¹⁷.

Rozważania, które doprowadziły fizyków do modelu kwarkowego były przeprowadzane na poziomie modeli teoretycznych. Chodziło o znalezienie najprostszej reprezentacji tzw. grupy symetrii $SU(3)$, przy pomocy której udało się uporządkować odkryte hadrony. Ustalenie liczb kwantowych kwarków było już sprawą względnie prostą, podyktowaną wymogami formalizmu teorii.

GELL-MANN „rozumuje” natomiast na poziomie praw fenomenologicznych. Zamiast stosować wyrafinowany formalizm relatywistycznej, kwantowej teorii pola i teorii grup, system przeszukuje ogromną przestrzeń możliwych

¹⁶ P. Fisher, J. M. Żytkow, *Discovering Quarks and Hidden Structure*, 1990, 5, s. 362-370. [w:] Z. Ras, M. Zemankova, and M. Emrich, (ed.), *Methodologies for Intelligent Systems*, New York, Elsevier Science Publishing Co.

¹⁷ Jak argumentuję w pracy P. Giza, *Intelligent Computer Systems and Theory Comparison*, [w:] L. Koj, (ed.) *On Theory Comparison*, 1995, Rodopi Publishing House, Austria (w przygotowaniu), nawet najbardziej zaawansowane współczesne systemy odkrywające strukturę materii „rozumują” na innym poziomie niż ludzcy odkrywcy teoretycy. Podział ten odpowiada rozróżnieniu pomiędzy *teoriami* i *prawami fenomenologicznymi* wprowadzonemu przez N. Cartwright w książce *How the Laws of Physics Lie?*, 1983, Oxford, Clarendon Press. Te pierwsze (jak np. relatywistyczna, kwantowa teoria pola) mają za zadanie *wyjaśnić* szerokie klasy zjawisk, kosztem adekwatności opisu. Te drugie natomiast, *opisują* konkretne zjawiska i obiekty (np. własności cząstek elementarnych). Rozróżnienie wprowadzone przez Cartwright ma istotne znaczenie dla problematyki realizmu w filozofii nauki, o czym piszę obszerniej w pracy P. Giza, *Realizm I. Hackinga a konstruktywny empiryzm Bas C. van Fraassena*, RRR, 1991, t. 23, Lublin, Wyd. UMCS. W tym miejscu jednak chodzi mi jedynie o jego znaczenie metodologiczne dla analizy działania systemów odkryć.

modeli kwarkowych starając się znaleźć *najprostszy* model pasujący do danych wejściowych, tzn. liczb kwantowych „symetrycznych” rodzin cząstek elementarnych.

Opiszę teraz pokrótce wejście, wyjście i funkcjonowanie systemu oraz rezultaty, które udało się przy jego pomocy uzyskać¹⁸.

Wejście. Na wejściu system wymaga podania listy obiektów scharakteryzowanych przez te same atrybuty. W klasycznym przypadku wejście systemu stanowią „symetryczne rodziny” cząstek elementarnych (hadronów) znane w roku 1964.

Wyjście. Na wyjściu system generuje listę modeli kwarkowych. Każdy model składa się z listy kwarków, ich własności (liczb kwantowych) oraz unikalnej kompozycji kwarkowej dla każdej wejściowej cząstki elementarnej.

Funkcjonowanie. GELL-MANN rozumuje w kilku krokach poprzez kolejne stosowanie pięciu operatorów, z których każdy wnosi konkretny wkład w konstrukcję ostatecznego modelu kwarkowego:

Pierwszy z nich postuluje istnienie N rodzajów kwarków, z których składałyby się wszystkie cząsteczki z rodziny danej na wejściu. Drugi operator postuluje istnienie struktury kwarkowej hadronów, zakłada on, że każdy z hadronów w rodzinie wejściowej składa się z M kwarków, poczynając od najprostszej, nietrywialnej hipotezy dla $M=2$. Kolejny, trzeci operator, generuje wszystkie możliwe struktury kwarkowe, czyli kombinacje $C(N, M)$. W jego funkcjonowanie ingerują dwie istotne reguły heurystyczne ograniczające przestrzeń poszukiwań. Pierwsza z nich wprowadza wymaganie jednoznacznej dekompozycji cząstek wejściowych na kwarki, druga odrzuca te rozwiązania, dla których liczba potencjalnych kombinacji kwarkowych byłaby zbyt duża. Jako graniczną wartość autorzy przyjmują (być może nieco *ad hoc*) wartość $2K$. Niemniej warunek ten wystarcza, jak się okazuje, by system znalazł unikalny, najprostszy model kwarkowy. Operator trzeci opiera się na wynikach uzyskanych przez dwa poprzednie.

Czwarty operator jest najbardziej skomplikowany w całym systemie. Postuluje on wartości atrybutów dla kwarków, dokonując przeszukiwania w przestrzeni wyznaczonej przez iloczyn kartezjański trzech list: kwarków, atrybutów i możliwych wartości dla każdego atrybutu. Lista kwarków wyznaczona jest przez operator pierwszy, atrybuty ograniczają się wyłącznie do występujących cząstek wejściowych. Zakres wartości dla każdego atrybutu wyznaczony jest przez war-

¹⁸ Bardziej wyczerpujący opis systemu GELL-MANN oraz historyczne wprowadzenie do problemu odkrycia kwarków zawarłem we wspomnianej wyżej pracy P. Giza, *Intelligent...* Tam też porównuję kryteria oceny i wyboru hipotez stosowanych przez fizyków teoretyków i przez maszynowego odkrywcę — GELL-MANN'a. W tej pracy ograniczam się jedynie do pobieżnego naświetlenia wspomnianych zagadnień.

tości dla cząstek wejściowych oraz wartości „odziedziczone” z poprzednio znalezionych modeli kwarkowych. Ilość możliwych sposobów, na jakie różnym kwarkom można przyporządkować wartości ich atrybutów staje się, już przy niewielkiej nawet ich liczbie, na tyle duża, że bezpośrednie, pełne przeszukiwanie jest praktycznie niewykonalne. Stąd też autorzy stosują skomplikowany układ reguł heurystycznych umożliwiający oddzielne przeszukiwanie przestrzeni wyznaczonych przez poszczególne atrybuty, a następnie unifikację tak znalezionych modeli.

Ostatni wreszcie, piąty operator, przyporządkowuje każdej cząstce na wejściu jedną i tylko jedną kombinację kwarkową. Modele generowane przez ten operator podlegają weryfikacji przy użyciu zasady addytywności: wartość danego atrybutu dla każdej cząstki jest równa sumie odpowiednich wartości dla kwarków składowych.

Rezultaty. GELL-MANN może pracować na dwa sposoby. W zwykłym trybie pracy system rozważa każdą rodzinę hadronów oddzielnie, za każdym razem budując model kwarkowy od zera. W trybie działania stopniowego (*incremental mode*) system rozważając kolejno rodziny hadronów dane mu na wejściu stopniowo uzupełnia i modyfikuje poprzednio otrzymane modele kwarkowe oraz odrzuca modele, które nie pasują do nowych danych.

Fisher i Żytkow testowali GELL-MANNA na trzech rodzinach hadronów: oktecie barionowym, dekaplenie rezonansów barionowych i oktecie mezonowym. Program automatycznie kończy działanie dla pierwszych liczb N i M , dla których znajdzie on model kwarkowy zgodny z danymi wejściowymi. Nie jest to w sposób automatyczny równoznaczne z sukcesem. Twórcy GELL-MANNA piszą:

[...] nie w każdym przypadku znalezienie modelu jest równoznaczne z sukcesem. Jeśli GELL-MANN [...] znajdzie wiele modeli, lub jeśli zakończy pracę nie znajdując żadnego modelu, to musimy przyznać, że poniósł on porażkę. [...] Jeżeli otrzymujemy wiele równie skomplikowanych hipotez kwarkowych w jednakowym stopniu zgodnych z danymi wejściowymi to nie mamy powodu wybrać jednej z nich, gdyż nie możemy orzec, że którakolwiek z nich jest bliższa rzeczywistości niż pozostałe. (Fisher i Żytkow, 1990, s. 367).

Dla oktetu barionowego i dekapletu rezonansów barionowych system znalazł jedno rozwiązanie: model składający się z trzech kwarków w grupach po trzy. Rozwiązanie to dokładnie odpowiada modelowi kwarkowemu zaproponowanemu przez fizyka Gell-Manna w r. 1964. Jest on jedynym modelem w swojej klasie prostoty (*simplicity class*).

System miał natomiast poważne problemy z oktetem mezonowym. Zgodnie z zaakceptowanym przez fizyków modelem mezony składają się z pary

kwark – anty-kwark. GELL-MANN powinien więc poprzez kolejne zwiększanie liczb N i M dojść do modelu składającego się z sześciu kwarków w grupach po dwa. Jednak przy takiej liczbie kwarków przestrzeń możliwych modeli była zbyt duża i autorzy musieli wyłączyć program po około pięciu dniach bezowocnych poszukiwań jednoznacznego rozwiązania.

W przypadku działania stopniowego, a więc udoskonalania i uzupełniania kolejnych modeli, system, po znalezieniu jednoznacznego modelu dla oktetu barionowego i dekwpletu rezonansów barionowych, próbował zastosować go do oktetu mezonowego. Uzupełnił on model do czterech, pięciu, a następnie sześciu kwarków. Tym razem przestrzeń poszukiwań była już znacznie mniejsza, gdyż dotyczyła jedynie atrybutów trzech nowych kwarków i w krótkim czasie GELL-MANN znalazł jednoznaczne, najprostsze rozwiązanie dokładnie odpowiadające modelowi zaakceptowanemu w fizyce.

Z powyższej, pobieżnej analizy wynika, że GELL-MANN przy uzasadnianiu sformułowanych przez siebie hipotez posługuje się jedynie kryteriami prostoty i zgodności z danymi. System nie jest w stanie rozumować na tak wysokim poziomie abstrakcji i zaawansowanego formalizmu matematycznego, jak twórcy modelu kwarkowego. Jednak nawet tak „ubogi” warsztat teoretyczny wystarczy mu do znalezienia jednoznacznego modelu kwarkowego, całkowicie zgodnego z przyjętym przez fizyków. Człowiek nie miałby raczej szans na uzasadnienie tą drogą jakiegokolwiek modelu kwarkowego. Przeszukanie tak ogromnej przestrzeni wszystkich możliwych modeli byłoby dla ludzkiego badacza nie do pomyslenia. Dlatego też, jak wspomniałem GELL-MANN i podobne mu systemy dostarczają *dotatkowego* uzasadnienia dla teoretycznie wyprowadzonych hipotez na temat mikroskopowej struktury materii. Do kwestii tej powrócę w następnej części pracy.

4. KONKLUZJE

Systemy odkryć maszynowych przechodzą, od czasów swego powstania w latach siedemdziesiątych burzliwy rozwój. Liczba prac opublikowanych w tej dziedzinie podwaja się co około 3-4 lata (Żytkow, *Automatyzacja...* s. 42). Dziedzina ta może się już pochwalić sporymi osiągnięciami i jeszcze większymi potencjalnymi możliwościami w niedalekiej, jak sądzę przyszłości. Nasuwa się pytanie, jakie znaczenie ma ona dla filozofii nauki i samej nauki?

Na systemy odkryć, podobnie jak na każdy inny przejaw działalności naukowej, można spojrzeć z dwu perspektyw: jako na próby mniej lub bardziej wiernej

rekonstrukcji komputerowej historycznego procesu odkrycia oraz jako na program jego normatywnej analizy. Historycy nauki przyjmują pierwszy punkt widzenia, a filozofowie nauki drugi.

Historia nauki zajmuje się opisem rzeczywistej drogi, jaką przeszli naukowcy na przestrzeni pewnego czasu, starając się zrozumieć kolejne kroki oraz motyw postępowania naukowców, które doprowadziły ich do konkretnego odkrycia. Tradycyjnie, historycy nauki zadowalali się opisem werbalnym, jednakże wraz z pojawieniem się systemów odkryć powstała alternatywna metoda uprawiania historii nauki. W tym kontekście na systemy odkryć można spojrzeć jako na komputerowe modele historycznego procesu odkrycia. Powstają pytania, czy systemy odkryć stanowią *adekwatny* model tego procesu i jakie kryteria owej adekwatności przyjąć?

Bliższa analiza pokazuje, że historycznie udokumentowane zachowanie się badaczy, takich jak Ohm, Coulomb, Black, odbiega od zachowania się programów w analogicznych sytuacjach problemowych. Niemniej jednak systemy komputerowe są w stanie odkryć te same prawa co ludzcy badacze, a to stanowi obiecujący punkt wyjścia dla dalszych, doskonalszych rekonstrukcji. Stąd też wielu badaczy sztucznej inteligencji od dawna skłonnych jest poprzestać na słabszych wymaganiach stawianych wobec adekwatności modelu odkrycia, żądając na przykład, aby system odkrycia stanowił jedynie model *wystarczający*¹⁹. Model taki nie odtwarza postępowania badaczy we wszystkich detalach a jedynie dysponuje podobnymi do nich możliwościami poznawczymi. W każdym razie kwestia, czy należy przy konstruowaniu nowych systemów dążyć do jak najwierniejszej reprodukcji zachowań badaczy, czy też poprzestać na słabszych, bardziej pragmatycznych wymogach, pozostaje nadal otwarta.

Jeśli idzie o filozofię nauki, to wypada stwierdzić, że systemy odkryć stanowią swoisty przełom i poważne wyzwanie dla niektórych poglądów na temat odkrycia naukowego. Większość twórców tych systemów, poza wykształceniem w dziedzinie nauk przyrodniczych, żywo interesowało się filozofią nauki. Zdawali oni sobie sprawę z faktu, że sam zamiar konstruowania algorytmów dokonujących odkryć naukowych stanowi zerwanie z tradycyjnymi, utartymi poglądami głoszącymi, że filozofia nauki powinna się zajmować kontekstem uzasadniania gotowych teorii, a nie procesem ich tworzenia, czy dokonywaniem odkryć. Ten ostatni – głosi ów tradycyjny pogląd – może stanowić co najwyżej przedmiot badań psychologii czy socjologii nauki²⁰.

¹⁹ A. Newell, H. A. Simon, *Human Problem Solving*, 1972, NY, Prentice Hall.

²⁰ Patrz, na przykład, klasyczna praca K. Popper, *The Logic of Scientific Discovery*, 1961, New York, Science Editions.

Konstrukcja systemów odkryć stanowi program normatywnej analizy procesu odkrycia naukowego, dający większe możliwości praktyczne, niż program tradycyjny. Integruje on odkrywanie i uzasadnianie w funkcjonalną całość. Zmusza badacza do precyzyjnego wyartykułowania założeń metodologicznych koniecznych przy konstruowaniu działającego systemu. Z drugiej strony, eksperymenty nad gotowymi systemami ujawniają wiele istotnych cech tkwiących w tych założeniach. W dziedzinie rozwoju metod heurystycznych stosowanych przez systemy odkryć dokonuje się widoczny, wymierny postęp. Jego wykładnią jest efektywność systemów, możliwość „radzenia sobie” z coraz bardziej skomplikowanymi sytuacjami problemowymi. Można tu więc mówić o doskonaleniu metody odkrycia naukowego²¹.

Tak więc, na teorię odkryć maszynowych można w pewnym sensie spojrzeć jak na ściśłą formę uprawiania zarówno historii, jak i filozofii nauki, o dużym znaczeniu praktycznym.

Znaczenie systemów odkryć dla samej nauki jest niemniej ważne i, jak sądzę, będzie ono coraz większe.

Współcześnie konstruowane systemy dokonujące odkryć empirycznych pozwalają zautomatyzować i ogromnie przyspieszyć proste, lecz żmudne prace laboratoryjne. Są one w stanie wychwycić istotne prawidłowości numeryczne z chaosu danych obarczonych błędem pomiaru. Dzięki zastosowaniu sprzężonych z komputerem manipulatorów i sensorów, systemy takie są już w stanie same sterować wykonywaniem prostych eksperymentów. Można się więc spodziewać, że w niedalekiej przyszłości systemy odkryć będą w stanie przejąć funkcję technika-laboranta, polegającą na żmudnym powtarzaniu rutynowych eksperymentów i przeglądaniu ogromnej liczby danych w celu znalezienia ciekawych prawidłowości. Tyle tylko, że funkcją tę będą one spełniać wielokrotnie szybciej i dokładniej od człowieka.

Co ważniejsze, systemy ujawniające jak GELL-MANN ukrytą, mikroskopową strukturę materii nie tylko ponownie dokonują ważnych dla nauki odkryć o charakterze teoretycznym, lecz zarazem dostarczają dodatkowych, niezależnych argumentów na rzecz konkretnej koncepcji takiej struktury. Jak pisałem w poprzedniej części tej pracy, fizycy-teoretycy sformułowali hipotezę kwarkową na drodze rozważań teoretycznych o dużym

²¹ Wszelkie działania podejmowane przez „inteligentne” systemy związane są z przeszukiwaniem ogromnych z reguły przestrzeni kombinatorycznych. Bardzo rzadko możliwe jest pełne, wyczerpujące wszystkie przypadki, przeszukiwanie. Stąd, aby ograniczyć przestrzeń poszukiwań stosuje się metody heurystyczne, które w efekcie nie mogą zagwarantować uzyskania optymalnych w danych warunkach, rozwiązań, a jedynie rozwiązania efektywne.

stopniu abstrakcji, posługując się teorią grup i relatywistyczną, kwantową teorią pola. Z drugiej strony, system GELL-MANN doszedł do identycznego, zaakceptowanego przez fizyków modelu kwarkowego „rozumując” na zupełnie innym poziomie, który wspomniana przeze mnie w przypisie 17 N. Cartwright określiłaby jako poziom praw fenomenologicznych.

Owa dziwna koincydencja wyników uzyskanych na dwu zupełnie różnych drogach stanowi jeden z koronnych argumentów na rzecz realizmu wysuwanych przez innego, znanego filozofa nauki, Iana Hackinga. Hacking jest wprawdzie realistą w odniesieniu do niektórych przedmiotów teoretycznych, takich jak przedmioty mikroskopowe czy tzw. przedmioty eksperymentatora (jak np. elektrony), i przynajmniej na obecnym etapie rozwoju nauki nie uznałby za wystarczające argumenty przemawiające za istnieniem kwarków²². Sądzę jednak, że jego argumentację można by rozszerzyć tak, aby przynajmniej dawała dodatkowe wsparcie hipotezie kwarkowej, jeśli już nie pozwalałaby na uzasadnienie realności kwarków).

„Argument o koincydencji” Hacking odnosi przede wszystkim do przedmiotów mikroskopowych. Twierdzi mianowicie, że byłoby nieprawdopodobnym zbiegiem okoliczności, gdyby dwa przyrządy, działające na zupełnie różnych zasadach, (np. mikroskop optyczny i mikroskop elektronowy) ujawniły w preparacie tę samą strukturę mikroskopową, a mimo to struktura ta byłaby jedynie zniekształceniem (artefaktem), a nie czymś, co w preparacie realnie istnieje. Podobny, choć oczywiście słabszy argument można by, moim zdaniem, przytoczyć na rzecz hipotezy kwarkowej: Jeśli dwa, prowadzone na zupełnie różnych poziomach, rozumowania teoretyczne doprowadzają nas do zbieżnych wyników dotyczących zarówno kompozycji kwarkowej hadronów, jak i liczb kwantowych samych kwarków, to stanowi to znacznie mocniejsze potwierdzenie hipotezy kwarkowej, niż każdy argument z osobna. Ponadto, hipoteza kwarkowa jest tym lepiej uzasadniona, im bardziej owe dwa argumenty są od siebie niezależne.

W przypadku fizyków-teoretyków i systemu GELL-MANN mamy do czynienia z dwoma niezależnymi rozumowaniami przeprowadzonymi na poziomach wyraźnie rozgraniczonych przez N. Cartwright: to pierwsze – na poziomie abstrakcyjnych teorii wyjaśniających – a drugie – na poziomie praw fenomenolo-

²² Patrz I. Hacking, *Representing and Intervening*, 1983, Cambridge, Cambridge Univ. Press. Hacking twierdzi, że mamy wystarczające powody, by uważać za realne jedynie te spośród przedmiotów submikroskopowych, które jak elektrony stały się naszymi narzędziami służącymi do manipulowania w świecie do poznania innych, bardziej hipotetycznych obiektów. Realizm Hackinga analizuję obszernie w pracy Giza, *Realizm...* W tym miejscu eksponuję jedynie te ich aspekty, które wydają się mieć znaczenie dla systemów odkryć.

gicznych. O znaczeniu poznawczym systemów takich jak GELL-MANN przesądza fakt, o którym pisałem w poprzedniej części pracy, a mianowicie, że trudno sobie wyobrazić, aby ludzcy badacze byli kiedykolwiek w stanie przeprowadzić rozumowanie na takim samym, niskim poziomie teoretyczności.

Rzecz jasna powstaje pytanie, czy systemy komputerowe są w stanie odkryć w nauce coś nowego, coś, o czym wcześniej badacze nie wiedzieli? Sceptycy twierdzą, że jak dotąd systemy, nawet te najdoskonalsze, dokonywały jedynie ponownego odkrycia znanych praw i to w warunkach jak najbardziej sprzyjających, sztucznie stworzonych przez ich twórców.

To prawda, że systemy odkryć są mniej autonomiczne niż ludzcy odkrywcy, że nie doskonalą one metody a jedynie rozszerzają wiedzę o odkrywanym świecie. Niemniej jednak trzeba przyznać, że konkretni uczeni też nie dokonywali swoich odkryć w próżni. Opierali się oni na wiedzy gromadzonej często całe lata przez ich poprzedników. Jest do pomyślenia sytuacja, gdy system dokona w laboratorium odkrycia prawa, którego przy obecnym stanie wiedzy nie będziemy mogli właściwie ocenić i zinterpretować, i które być może odrzucimy, jak to miało miejsce z wieloma odkryciami znanymi z historii nauki. Bezspornie jednak najbliższe badania w tej dziedzinie muszą podążać w kierunku zwiększania autonomii systemów.

Jeszcze trudniejszym zadaniem będzie stworzenie systemów, które mogłyby rozumować na poziomie abstrakcyjnych, fundamentalnych teorii wyjaśniających szerokie klasy zjawisk i samodzielnie takie teorie rozwijać.

Tak więc droga do idealnego robota-odkrywcy, o którym wspomniałem na wstępie tej pracy jest jeszcze dosyć daleka.

SUMMARY

The present paper discusses a fairly new and dynamic field of research in artificial intelligence: the Theory of Computer Discovery. The study outlines the historical development of discovery systems and their division with respect to the field of application. Finally, perspectives of their development and importance both for science itself and philosophy of science were presented.