

分子ミュージック: 構造類似性を反映した楽譜生成

Molecular Music: Score Generation Taking Account of Structural Similarity

寺西 央志
Hiroshi Teranishi

高橋 由雅
Yoshimasa Takahashi

豊橋技術科学大学工学部 知識情報工学系
Department of Knowledge-based Information Engineering, Toyohashi University of Technology

We have been studying “molecular music” as a new expression of molecular structure feature with music. In this work, the goal is the development of an algorithm of score generation that makes it possible to take into consideration structural similarity of molecules. Here, we proposed a method that divides a molecular graph into a NTG (Non-Terminal vertex Graph) and a set of side chains and it is followed by numbering of the atoms of each moiety individually. The computational trial suggested that the present approach successfully works for generating similar music scores from similar molecular structures or molecular graphs. The algorithm is discussed with illustrative examples.

1. はじめに

化合物分子は、それぞれ固有の化学構造を有している。この化学構造の違いが種々の分子特性の違いとして観測されることは周知のとおりである。当研究室では、分子構造情報の表現手段のひとつとして、化学構造からの音楽生成を目的とした分子ミュージックに関する研究を進めている。先に富士本は、化学構造の符号化、符号列の楽譜化という 2 段階を踏む楽譜生成と、その自動演奏とを行うシステムを開発した[富士本 03]。ところが、ここで用いた符号化法および楽譜変換法は、化合物分子の構造類似性を符号列または楽譜に反映するものではなかった。

本研究では、化学構造の類似性を反映した楽譜生成のためのアルゴリズムの検討および、その計算機への実装を試みたので報告する。

2. 番号付けアルゴリズムの検討

富士本は、符号化に Morgan の化学構造式符号化アルゴリズム[Morgan 65]を用いた。このアルゴリズムは、対象構造の原子に一意的順序(規範番号)を付ける「規範番号付け」と、規範番号を基にした「符号列生成」からなる。規範番号は、符号列に現れる情報の順序を決定するので、符号列へ構造類似性を反映することに大きく関係する。このため、まず規範番号付けのアルゴリズムを変更することにより構造類似性を反映した楽譜生成について検討を試みた。

2.1 アルゴリズムの概要

富士本は、対象構造全体に Morgan の規範番号付けを適用した。これに対し本研究では、対象構造を NTG(Non-Terminal vertex Graph)[大野 02]とその側鎖に分解し、個別に番号付けを行った後に併合して通し番号とする手法をとる(図 1)。NTG は、環を中心とする基本骨格である。そのため、この手法を用いることで、同じ骨格を持つ化学構造群から、類似した規範番号と符号列を得ることが容易になると考える。

ここで、NTG には Morgan の規範番号付けを行い、側鎖と非環式構造には後述するアルゴリズムで番号付けを施す。

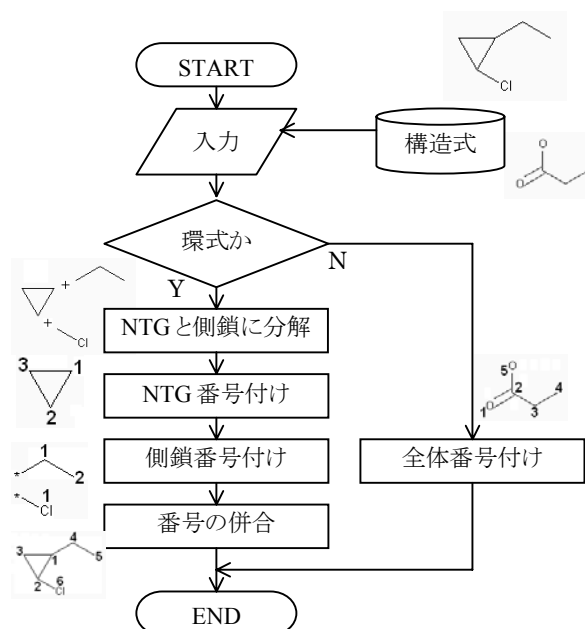


図 1 番号付けアルゴリズムの概要

2.2 側鎖と非環式構造の番号付け

環を持たない構造に対しては、IUPAC 命名法の規則[ACD 97]を利用した番号付け法を適用する。この手法では、化学構造が、ある直鎖(主鎖)とそれに付随する側鎖からなり、側鎖もまた主鎖と側鎖からなるといった階層的な構造を持つと考える。そして、根幹の主鎖からその側鎖へと順番に規範番号を振る。主鎖の選択手順は、大きく分けて次の 3 つからなる。

- ① 骨格(結合や原子の種類を考慮しない)で選択
- ② 結合の種類で選択
- ③ 原子の種類で選択

まず、①の基準で主鎖候補の直鎖を絞り込む。これは、IUPAC 命名法の主鎖選択規則を基にした基準である。ここで、複数の候補が残った場合は、候補の側鎖を①の基準で再帰的に評価して絞り込む。骨格だけでは絞り込めなかった場合、②と③で絞り込む。ここでも、複数の候補が残った場合は②と③で側鎖を再帰的に評価する。詳細な流れを図 2 に示す。

連絡先: 高橋 由雅, 豊橋技術科学大学 知識情報工学系, 〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1, Tel: 0532-44-6878, taka@mis.tutkie.tut.ac.jp

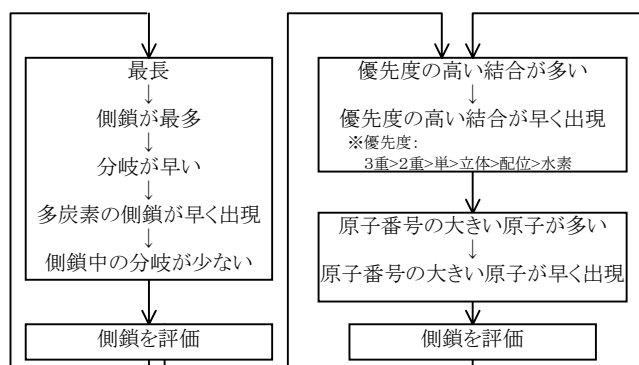


図2 非環式構造の主鎖選択基準

2.3 環を含む構造の番号付け

NTG と側鎖に個別に番号が割り当てられたら、それを通し番号に変換する。このとき、NTG の番号はそのまま規範番号として用い、側鎖の番号をその後に続ける。変換の様子を図 3 に示す。側鎖は、規範番号の小さな原子に結合しているものから順に取り扱う。

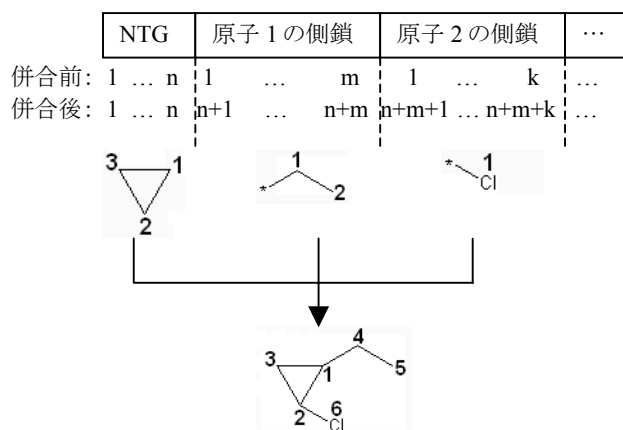


図3 個別の番号と通し番号との対応

3. 従来法との比較

従来法と提案法との比較実験を以下の要領で行った。

3.1 実験方法

次節に示すような用意した分子グラフを各手法で番号付けし、従来の符号化・楽譜化法により、それぞれから楽譜を得た。その演奏を試聴し、主観的評価を行った。楽譜化のアルゴリズムには、ブロック法[富士本 03]を用いた。

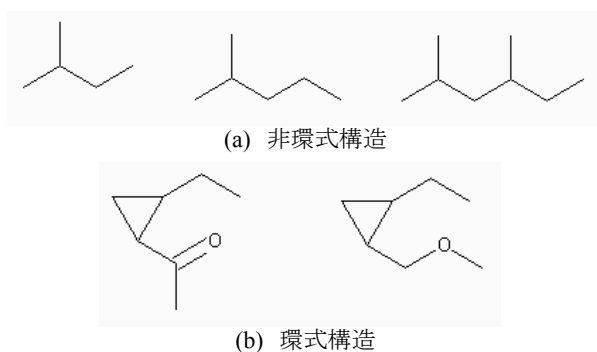


図4 使用データの一例

3.2 データセット

非環式構造として、炭素数が 4~8 の鎖状飽和炭化水素の構造異性体 36 種を用いた。環式構造としては、12 種の NTG と 10 種の側鎖とを組み合わせた分子グラフ 32 種を用いた(図 4)。

3.3 結果

生成された楽譜を図 5 に示す。それぞれ、①は図 4(b)の左の構造から、②は右の構造から得られた楽譜である。提案法を用いて得られた楽譜は、NTG, 側鎖 1, 側鎖 2 の順にフレーズが並んでいる。ブロック法では原子ひとつに 1 小節が割り当てられるので、はじめ 3 小節が NTG, 次の 3 小節が側鎖 1, 終わりの 2 小節が側鎖 2 を表す。図 4(b)の構造は側鎖 1(下側の側鎖)のみが異なるので、楽譜もそれに対応する小節のみが異なっている。他の例でも、同じ NTG や側鎖をもつ分子グラフからは、ほぼ同じフレーズをもつ楽譜が生成されている。従来法から生成された楽譜からは、構造のどの部分が異なっているかを読み取るのは困難である。したがって、従来法より構造の異なる部分がわかりやすくなったと考える。

図5 生成された楽譜

4. おわりに

新たな番号付けの導入により、対象構造全体に Morgan の規範番号付けを使用した場合に比べ、より構造類似性を反映した分子ミュージックを生成することができた。しかしながら、本提案手法は、符号化に際して構造の対称性などに起因するいくつかの問題が残されている。これらの問題の解決も含め、より効果的な楽譜変換アルゴリズムの開発に向けて引き続き検討を進めて行きたい。

参考文献

[富士本 03] 富士本貴行, 高橋由雅: 分子ミュージック: 分子が奏でる音を聴く, 2003 年度人工知能学会全国大会 (第 17 回) 論文集, 1B4-04 (2003)

[Morgan 65] Morgan H. L.: The generation of a unique machine description for chemical structures, *J. Chem. Doc.*, **5**, 107-113 (1965)

[大野 02] 大野貴生, 高橋由雅: Non-terminal Vertex Graph(NTG)を利用した薬物の構造特徴解析, 第 30 回構造活性相関シンポジウム, pp.41-42(2002)

[ACD 97] Advanced Chemistry Development, Inc.: IUPAC Nomenclature, <http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/> (1997)