

音楽理論と構造類似性を反映した分子ミュージック

Molecular Music Based on Music Theory and Structural Similarity

荒井 研介
Kensuke Arai

高橋 由雅
Yoshimasa Takahashi

豊橋技術科学大学 工学部 情報・知能工学系
Department of Computer Science and Engineering, Toyohashi University of Technology

We have been studying on “molecular music” as one of the expressions of molecular information. Aim of the present work is in developing an algorithm of score generation that is able to reflect structural similarity of molecules as much as possible. The preceding approach reported by Teranishi et al. often produces quite different results in generating the music scores even for the case of molecules that have very similar chemical structures. Then, we propose a score generation algorithm based on music theory that can express structure similarity between molecules more clearly. The computational trial suggested that the present approach successfully works for generating similar music scores from similar molecular structures.

1. はじめに

現在、化学の分野におけるコンピュータの利用は数値計算のみならず様々な領域でその応用が工夫され多大な成果を収めている。先に本研究室では、分子構造情報の符号化をもとに分子構造に固有な情報を、楽譜生成アルゴリズムを用いることで音楽として表現する分子ミュージックシステムを報告している[富士本 03]。一方、一般に構造が類似した化合物は種々の特性も類似していることが経験的に知られている。そこで、寺西ら[寺西 06]は構造類似性を分子ミュージックに反映するためのアルゴリズムを提案した。しかしながら、これにより構造類似性を反映した分子グラフの規範化ができるようになったが、生成される楽曲について、聴取印象として構造類似性を反映したものはならなかった。

そこで本研究では、単純グラフ同型な分子グラフ間の違いを明確に表現でき、かつ聴取印象として構造類似性を反映した楽曲を生成するアルゴリズムを提案し、システムへの実装、従来手法との比較実験を行い、その有用性について議論する。

2. 分子構造情報と音楽理論の対応付け

分子構造情報を示す分子グラフは、以下に示す二つに大別することができる。

- NTG(Non-Terminal vertex Graph)[大野 02]
- 鎖状グラフ

これらの大きな違いは環構造の有無であり、それぞれが固有の基本骨格を持ち、また、各原子の情報(原子番号、結合数、結合タイプなど)を持っている。

音楽理論には、楽曲の規則を決定するために調(キー)があり、長調(メジャー)と短調(マイナー)の二つに大別され、各調の規則に則った旋律(メロディー)や和音(コード)の要素を持たせることで楽曲を形成している。

本研究ではこれらの要素を対応付けすることで、楽曲の聴取印象に安定感を与えるアルゴリズムを提案する。

2.1 符号化アルゴリズム

寺西は、鎖状グラフと NTG でそれぞれ固有の番号付けを提案することで、構造類似性を反映した符号化を実現してきたが、

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

特に NTG の番号付けにおいて、構造が類似しているにも関わらず大きく異なる番号付けがされてしまうという問題点があった。

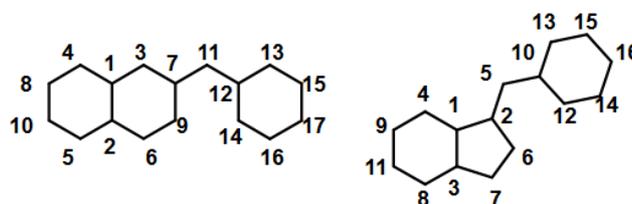


図1 類似骨格間の番号付けが大きく違う場合

そこで本研究では、NTG の新たな番号付け手法を提案する。

(1) 番号付け

番号付けの概要は、まず環システムとリンカーに分割し、それぞれに識別番号を設定し、各要素を番号付けするというものである。図2に、新規番号付け手法を用いたグラフを示す。

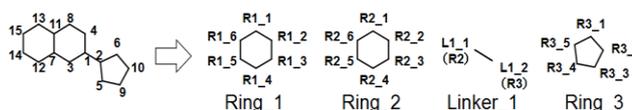


図2 NTG の新規番号付け手法

なお、鎖状グラフは従来手法によって番号付けを行う[寺西 06]。

(2) 符号化

従来までは、番号付けされたグラフをもとに、Morgan 符号列[Morgan 65]を生成していたが、本研究では Morgan 符号列に結合数リストを追加する。以下に本研究で用いる Morgan 符号列の各リストとその意味を示す。

- 親リスト: そのノードの結合相手で最小番号のもの
- 閉環リスト: 閉環の番号対(親リストでは表現されない)
- 原子型リスト: ノードの原子番号
- 結合型リスト: 親リストおよび閉環リストに並べた辺に対する結合多重度
- 修飾リスト: 電荷, 同位体質量などの付加的情報
- 結合数リスト: そのノードに隣接する辺の数

2.2 楽譜生成アルゴリズム

符号化アルゴリズムにより生成された符号列をもとに、分子構造情報と音楽理論の対応表を用いて楽譜データを生成する。次項に各分子構造情報と音楽理論の対応表を示す。

表 1 和音対応表

mod(Cn[i], 3)	和音
1	トニック
2	サブドミナント
0	ドミナント

表 1 は、各小節に出現する和音を決定するための対応表である。ここで、Cn[i]は各ノードの結合数に対応し、一つのノードに対して楽譜の 1 小節が生成される。また、mod(Cn[i], 3)は Cn[i]の 3 の剰余を表す。以下に各和音の意味を示す。

- トニック…調の中心となり、最も安定感があり、曲のはじめとおわりは基本的にこの和音を用いられる
- サブドミナント…ドミナントの働きを補助する。やや不安定でトニックやドミナントに進行する和音として用いられる
- ドミナント…緊張感があり、また不安定な和音で、トニックへ進行しようとする

表 2 律動(リズム)対応表

結合の種類	単結合	2重結合	3重結合	芳香族結合	その他
1小節内の律動	全音符	2分音符×2	4分音符×4	8分音符×8	16分音符×16

表 2 は、結合の種類によって、辺に隣接する頂点と対応した小節間の和音のつながり方に律動的变化を与えるための対応表である。

表 3 旋律対応表

原子の種類	C	O	N	S	P	F, Cl, Br, I
1小節内の旋律パターン	a, b, c	a, c, b	b, a, c	b, c, a	c, a, b	c, b, a

表 3 は、原子の種類によって、対応する小節の旋律を決定するための対応表である。ここで、パターン a, b, c は、3 和音を構成する音(例: 和音がドミソで構成される場合、ドは a, ミは b, ソは c に対応する)を表す。

これらの対応表を用いて楽譜データを生成する。

3. 従来法との比較

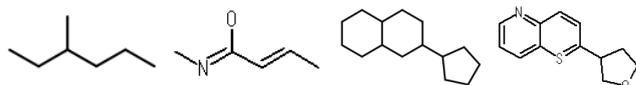
従来法と提案法との比較実験を以下の要領で行った。

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符号化・楽譜化し、それぞれから楽譜を得た。その演奏を視聴し、主観的評価を行った。なお、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。

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 種について、構造情報に違いがある分子グラフを用いた。環式構造としては、12 種の NTG を基本骨格とし、各骨格の構造情報に違いがある分子グラフ 10 種を用いた(図 3)。



(a) 非環式構造 (b) 環式構造

図 3 使用データの一例

3.3 結果

図 3 の構造から生成された楽譜を図 4 に示す。それぞれ、①は図 3(a)の左の構造から、②は右の構造から得られた楽譜である。従来法を用いて得られた楽譜には調がないため不安定な印象を与える楽曲が生成されたが、提案法を用いることで、調があることで楽曲も安定し、また、和音があることで音楽的により豊かな表現力があると考えられる。また、従来法の問題点として、一つの頂点を持つ情報の影響範囲が広く、頂点や辺の違いが一つ違うだけで、楽曲の多くの小節に影響を与えてしまうという問題点があった。しかし、提案手法を用いることで、頂点や辺の違いが楽曲に与える影響範囲を局所的にでき、より構造類似性を反映した楽曲が生成できると考える。

(a) 従来法を用いた結果

(b) 提案法を用いた結果

図 4 生成された楽譜

4. おわりに

本提案法を導入することで、従来法を使用した場合と比較して、頂点の持つ情報の影響範囲を局所的なものとする事で基本骨格ごとの違いを明確に表現でき、かつ楽曲として安定した印象を与えることができると考える。しかしながら、本提案法は主観的な考察によるものであるため、第三者による視聴実験が必要であると考えられる。また、旋律に関してパターンが極少であるため、生成される楽曲のパターンが単調なものとなるのが考えられる。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いきたい。

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).

[寺西 06] 寺西央志, 高橋由雅: 分子ミュージック: 構造類似性を反映した楽譜生成, 2006 年度人工知能学会全国大会(第 20 回)論文集, 3G3-05(2006).

[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)

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