

分子ミュージック: 分子が奏でる音を聴く

Molecular Music: Listen to the Sounds from Molecules

富士本 貴行
Takayuki Fujimoto

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

Every molecule has its own unique chemical structure. This paper describes an algorithm for making a piece of music from a molecular structure. The chemical structure was described with a series of symbols by Morgan algorithm. On the basis of the Morgan's code, algorithms for encoding the structural information into music notes have been developed. It can be played automatically with a music sound device. The detail of implementation will be discussed with an illustrative example.

1. はじめに

現在、コンピュータは化学の分野においても数値計算のみならずさまざまな領域でその応用が工夫され多大な成果を収めている。量子化学計算などに代表される数値計算以外にも化学文書作成に不可欠な化学構造式エディタ、化学物質データベースシステム、分子グラフィックスさらにはロボットを利用した新薬候補物質の自動合成など技術も開発され実用に供されるようになってきた。これらを今日の「マルチメディア」の視点から見ると、数値情報、テキスト情報、画像情報といった捉え方もできる。しかし、分野固有の問題における音声あるいはサウンド情報の積極的な活用についてはここに挙げる例を見出せない。

情報表現には様々なメディアが利用可能であることは前述のとおりである。化合物分子は、それぞれ固有の化学構造を有しており、この構造の相違が、物質分子のもたらす様々な特性や機能の違いとなって現れる。そこで、本研究では構造情報の符号化の考えをもとに、「化学構造符号化 楽譜生成」の変換アルゴリズムを考案し、分子の構造に固有の情報を音楽として表現することを試みた。

2. 化学構造の符号化

本研究では分子の構造情報(以下、構造情報)の符号化とサウンド情報への変換アルゴリズムについてはそれぞれ独立のプロセスとして開発を行った。構造情報の符号化に際しては対応する化学構造式を原子や結合の種類が区別可能な化学グラフ

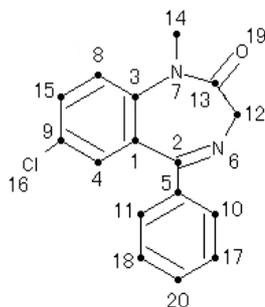


図1 Diazepamの化学グラフとMorgan ID

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 知識情報工学系, Tel: 0532-44-6878, taka@mis.tutkie.tut.ac.jp

として表す。化学グラフの符号化には Chemical Abstract Services など化学物質データベースの構造データの符号化に用いられている Morgan アルゴリズム[Morgan 65]を応用し、記号列(以下、Morgan 記号列)の生成を図った。Morgan 法では与えられた化学グラフの各ノードが一意的に番号付けされる。Morgan 記号列は、この番号付け手順によって付与された番号を各ノードの ID(Morgan ID)として、その結合関係を5種類のリスト{親リスト、閉環リスト、原子型リスト、結合型リスト(親リストに対する結合、および閉環リストに対する結合)、修飾リスト}で表現する。例として、Diazepam の化学グラフとその Morgan ID を図1に、その記号列を図2にそれぞれ示す。

```

- 1 1 1 2 2 3 3 4 5 5 6 7 7 8 9 10 11 13 17
[9 15] [12 13] [18 20]
6 6 6 6 6 7 7 6 6 6 6 6 6 17 6 6 8 6
- 1 4 4 1 2 1 4 4 4 4 1 1 1 4 1 4 4 2 4
4 1 4
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

図2 DiazepamにおけるMorgan記号列

なお、Morgan 記号列における各リストの意味は、以下の通りである。

- 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: 結合多重度
(上段: 親リスト, 下段: 閉環リストについて)
- 修飾リスト: 電荷、同位体質量などの修飾

3. 変換アルゴリズム

サウンド情報の変換には原子や結合環境別に記述した look up table の参照を基礎とする方法を用いた。

音符情報は、音の高さや強さ、そしてリズムを作り出す音符の種類(例: 4分音符や8分音符)などから構成されており、この音符情報のつながりが音楽情報となる。以下に、Morgan 記号列から音楽情報へと変換するためのアルゴリズムについて述べる。

3.1 ブロック法

結合情報を樹系表現し、各ノードとそれに隣接するノードからブロックを形成させ、これを小節と対応付けることで音楽表現を実現する方法を「ブロック法」と命名する。

(1) ブロック化

親リストおよび閉環リストから樹系図を形成する。そして各ノードに対し、おのおのブロックを決定する。このときブロックは基点となるノード ID を”Node”、それに隣接する若い方の ID 番号(親ノード)を”Root”、他の隣接ノード(子ノード群)を番号の若い順に”Leaf1, Leaf2, ...”と名づけた各要素で構成する。

図 2 を樹系図に表したものを図 3(a)に、さらにこの図において ID2 を中核とするときのブロック図を図 3(b)に示す。この図 3(b)において、ブロックの中核となる ID2 を Node(図中の四角)、その上位ノードである ID1 を Root(図中の楕円)、Node の下位ノード ID5,6 がそれぞれ Leaf1, Leaf2 に相当する。これをもって ID2 のブロック(すなわちブロック 2)が完成する。

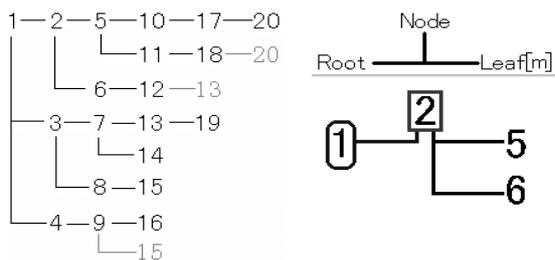


図 3(a) 樹系図

図 3(b) ブロック図

(上：基本構造, 下：ID=2 のとき)

上記のようなブロック化の処理を、すべてのノードについて行なう。

(2) 小節変換

各ブロックにそれぞれ小節を割り当てる。音階は Node, Root, Leaf1, Leaf2...と重ねていき、その高さは原子型リストの値を相対値として割り付ける。このとき Node 音をブロックの基準音として全音符として表現し、その小節内のベースラインとして機能させる。他の音は、4 分音符分の長さで順に配置し、結合型リストの値でおのおの等分割したものを採用した。

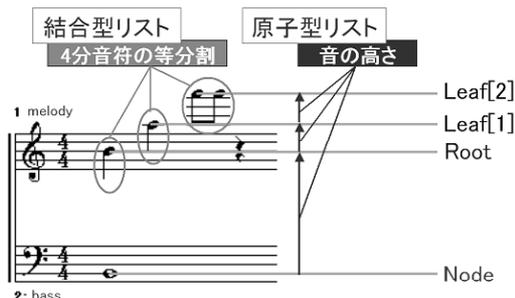


図 4 ブロック 2 における小節変換

図 4 は、ブロック 2 における小節変換の概念を示したものである。全ブロックについて、ブロックの ID 順に、上記の作業を行なうことで、ブロック法による音楽情報変換は完了する。

4. 化学構造からの変換例

上記アルゴリズムにもとづき、Diazepam の構造情報(図 1 参照)の Morgan 記号列を利用した楽譜生成の変換実行例を図 5 に示す。ブロック法では、各ノードの結合情報がそれぞれ 1 小節としてまとめられており、ノード毎の隣接情報が比較的容易に把握できる。



図 5 Diazepam の楽譜例(一部)

5. GUI の構築

今後の研究がより円滑に進められるように GUI の開発に着手した。ここでは当研究室で別途開発された DNA ミュージック用インターフェース”SoundDNA” [川添 02]を改訂、機能を追加し実装した(図 6)。これにより、分子ミュージックにおける音楽情報の自動生成、自動演奏の一連の処理が容易となった。

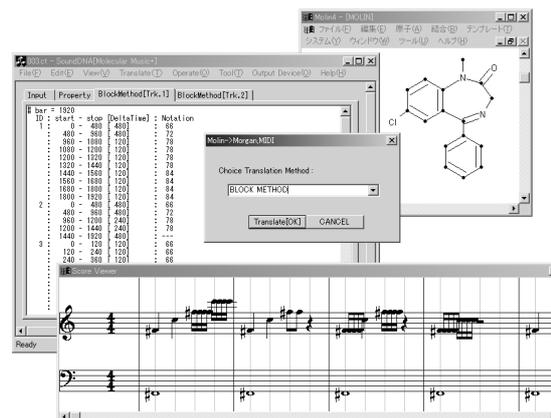


図 6 GUI 画面

6. おわりに

本研究では、化学構造式の符号化と音符情報の割り当てにもとづく楽譜自動生成のアルゴリズムを計算機上に実装し、さらに GUI 開発を行なった。複数の化合物分子の構造を例に楽譜生成と自動演奏の実験を試みたが、今回の方法では、音楽性に関する特別な考慮していないため、不安定な和音を奏でる分子構造が多かった。さらに生成される音楽が類似しており、分子特性を表現しているとは言いがたい。今後は音楽理論を取り入れるなど変換アルゴリズム等の改良を進めたい。

参考文献

[川添 02] 川添康司: DNA ミュージックに関する研究, 平成 13 年度豊橋技術科学大学修士論文(2002).
 [Morgan 65] Morgan H. L.: The generation of a unique machine description for chemical structures, *J.Chem.Doc.*, 5, 107-113(1965).