

演示実験における構造式の認識と分子モデルの生成

長谷川 浩史

大阪公立大学 杉本キャンパス 納品検収センター

1. はじめに

筆者は、以前、大阪市立大学基礎教育実験棟における基礎化学実験の支援を担当したことがあり、現在も実験棟技術職員の方と共同開発を行っている^[1]。担当した基礎化学実験の支援業務の中に、実験棟施設の見学者への化学実験の演示がある。この業務の担当中に、演示する実験で使用する試薬の分子モデルを生成して見ていただくのも良いのではと思い、量子化学計算プログラムの利用を検討した。演示では、モデルの生成結果の表示だけでなく、量子化学計算プログラムを操作し、生成していくのもよいと思える。その際、試薬名等を音声で入力し操作させると、見学者により興味を持っていただけるのではないかと考え音声駆動について検討を行った^[2]。コンピュータの入力方法には音声以外に、キー、マウス、文字、視線制御等があり多様である。システムは、この多様な入力方法にも対応できることが望ましいと思われる。それで、マウスのワンクリックによる構造式の描画と分子モデルの生成についても報告した^[3]。本報告では、構造式の画像入力と、多様な入力法に対応するシステムの統合について述べる。システムは、フリーソフトにより画像から構造式を認識し、認識した構造式を描画し、分子モデルを生成する。画像からの構造式の認識には、OSRA(Optical Structure Recognition Application)を、分子モデルの生成には、Avogadroを用いている。又、操作を簡単にするために、マウスとキーの操作を記録し再生するフリーソフトのHiMacroExを用いている。

2. OSRAによる構造式の認識とAvogadroによる生成

画像から構造式を認識するソフトウェアとして本報告ではOSRAを利用する。OSRAは、Kekule構造で図示された化学構造をOCR(Optical character recognition)等により読み取り、SMILES(simplified molecular input line entry system)、又は、SDF (Structure

Data File)に変換する。図1は、OSRAに入力する構造式の画像(拡張子.jpg)を示す。この画像は、Ketcherにより描画させ、切り出したものである。図2は、OSRAのwebページの「OSRA Web Interface」のクリックにより、表示されてくるインターフェース画面を示す。操作は、まず、この画面下の「ファイルを選択」をクリックする。画像ファイル選択画面となり、ファイルを指定する。指定したファイル名は、「ファイルを選択」の右側に表示される。「submit」のクリックで認識処理が開始され、処理が終了すると、Edit Structureに認識された構造式が描画される。「Get SMILES」のクリックによりSMILES記法に変換される(図2下部)。これをコピーし、Avogadroのツールバーの「Build」「Insert」「Smiles」を選択後、貼り付ける。分子モデルが生成される(図3)。同様にKetcherで他の構造式を描画させたものについても認識できている。

3. マウスとキー操作の記録と再生

音声認識やマウスのワンクリックのシステムでも用いたHiMacroExを本報告でも用いる。HiMacroExは、マウスやキーの操作をマクロ命令で記述し記録する(テキストファイル)。記録内容は、編集が可能で、待ち時間の調節、プログラムの起動、アクティブウインドウの指定、テキストボックスへの文字の入出力等の機能を持ち、変数も利用できる。HiMacroExは、図4の基本画面の「記録」と「終了」ボタンのクリック間のマウスとキーの操作を記録する。この記録を、「保存」のクリックでテキストファイルとして保存する。「読込」は、テキストファイルに記録した内容をHiMacroExに読込。「再生」のクリックにより、記録した操作を再生する。マクロ命令列を編集し、OSRAへ入力する画像選択のために再生の開始から待ち時間を設定している。画像の選択後の操作は、HiMacroExで自動再生される。そのため

に、演示者等の操作は簡単になる。

4. 多様な入力法に対応するシステム

これまで音声、マウス、画像を入力として構造式を描画し、分子モデルを生成するシステムについて報告してきた。これらを別々のシステムではなく一つのシステムに統合する。理由は、多様な入力法に対応できると、見学者により興味を持っていただくと考えられるからである。その統合システムの構成を図5に示す。音声や画像入力には、認識技術が必要である。画像入力では、カメラからの直接入力とマウスや音声による選択との組合せがある。本報告では、マウスとの組合せを用いている。認識された、又は、マウスで選択された試薬の構造式が、OSRAやKetcherで描画され、Avogadroにより分子モデルが生成される。描画と生成は、HiMacroExを用いた再生である。

5. おわりに

構造式の画像からの認識、描画、分子モデルの生成についてと、音声、画像、マウス入力を統合したシステムについて述べた。システムは、フリーソフトと自作のプログラム等からなり安価である。又、HiMacroExの再生機能を利用していることから操作が簡単になり、個々のソフトの操作に慣れていない方でもシステムを使用することが容易になる。この機能は、マウスカーソルの動きのトレースと、機能表示の時間を長くする等のマクロ命令列の編集により、操作の学習にも応用できると考えられる。

参考文献

- [1] 長谷川浩史、電子回路シミュレーター、2025埼玉大学機器分析技術研究会要旨集、74-75、2025
- [2] 長谷川浩史、音声認識を用いた量子化学計算プログラム、生理学・生物学合同技術研究会報告集、70-71、2017
- [3] 長谷川浩史、演示実験における構造式の描画と分子モデルの生成、生理学・生物学合同技術研究会報告集、114-115、2025

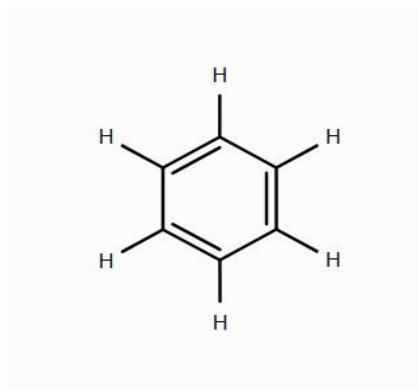


図1 構造式画像

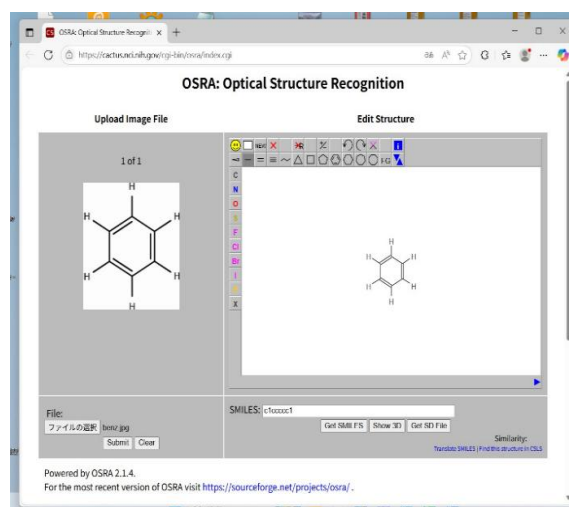


図2 OSRAによる認識

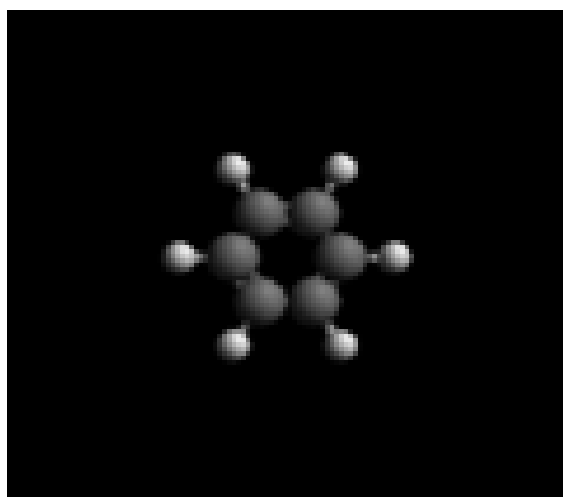


図3 Avogadroによる生成

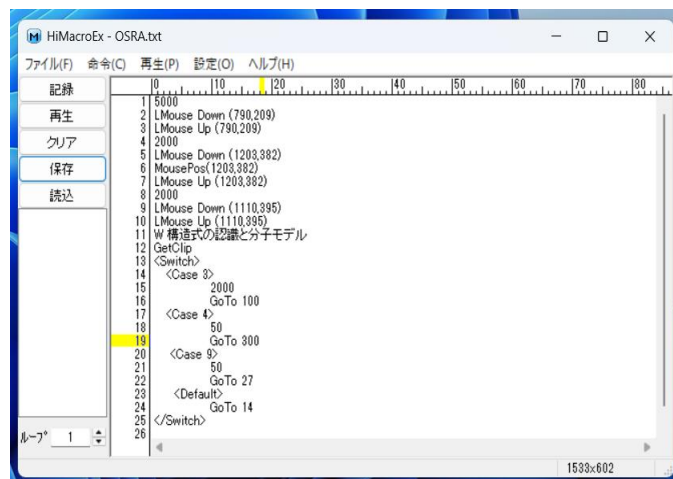


図 4 HiMacroEx の基本画面とマクロ

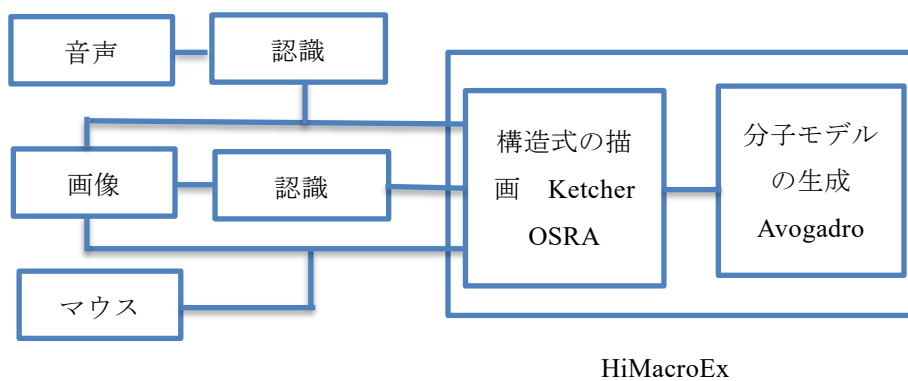


図 5 統合システム