

A-5

情報化学的手法を用いる視覚障害者支援テクノロジーのための化学構造式読み上げ法
 A reading method of the chemical formula for the support technology for visual disabilities
 using computational chemistry.

○上條 治夫¹, 平野 真央¹, 深津 誠¹, 小泉 公志郎², 豊岡 尚樹³, 津田 正明³, 守井 清吾⁴, 廣林 茂樹⁵
 *Haruo Kamijo¹, Mao Hirano¹, Makoto Fukatsu¹, Koshiro Koizumi²,
 Naoki Toyooka³, Masaaki Tsuda³, Shingo Morii⁴, Shigeki Hirobayashi⁵

Abstract: We have found that visual disabilities are able to draw in a chemical structural formula with XyMTeX and tactile display system. If it is possible that the computer reads collectively of the chemical formula name and character in a document, visual disabilities are able to share chemical information with normal eyesight persons. This is the basic research for creating the software for reading out the chemical formula in a scanning picture or on the screen of PC. Here, we have investigated continuously about drawing chemical formula using XyMTeX system by visual disabilities, and then have investigated how to translate chemical graphics for reading its chemical names.

1. 概要

視覚障害を持ちつつ化学教育に携わっている筆者は、自らの経験に基づく様々な検討により、LaTeX/XyMTeX 法と触覚ディスプレイを併用すれば、視覚障害者自身による化学構造式の描画・編集が可能であることを見出した [1]。

ドキュメント中に描かれた化学構造式を、その構造式名の読み上げを行いながら他の文字情報とを併せて読み下すことができるなら、視覚障害者による化学情報へのアクセシビリティが著しく向上するとともに、晴眼者との間での化学情報の共有が可能となる。本研究はスキャン画像中の化学構造式や PC の画面上に出力された化学構造式をその化合物名で読み上げるためのソフトウェアを作成するための基礎研究であり、ここでは視覚障害者自らによる XyMTeX 法を用いる化学構造式画像の描画について引き続き検討するとともに、描画結果の化学構造式名の検索方法とその読み上げ方法を試みた。

2. 方法と装置

構造式描画は XyMTeX (ver5.00) [2] 法で行った。作図結果の認識は触覚ディスプレイ (株) KGS 社製点図ディスプレイ, DV-1 (触読部: 24 × 32=768 ドット, 点間ピッチ: 3mm) と、点図プリンター View Plus 社点字プリンター ViewPlus Cub を併用した。また読み上げ用プログラムは C# 言語を用いて作成した。

3. 結果と考察

化学構造式を含む様々な資料から検索可能な化学構造式情報を取り出すために、化学構造図のアナログ/デジタル変換法についての様々な検討が行われている [3] [4] [5]。しかしこれらの検討結果は検索可能な化学構造式を得る手法ではあるが、視覚障害者にとってアクセス可能なシステムとして設計されていない。一方、IUPAC(国際純正・応用化学連合)法に基づく化合物命名の自動化の検討では、MDL molfile が利用されているが、アナログ/デジタル変換法と化合物命名の自動化についての総括的な検討は行われていない。筆者らはドキュメント中に描かれた化学構造式を、その構造式名の読み上げを行いながら他の文字情報とを併せて読み下すための基本構成を以下の 4 点に集約した。

1. 任意のドキュメントから文字と構造式を分ける
2. 文字は既存の OCR ソフトに渡す

¹ 日大短大・教員・化学 ² 日大理工・教員・一般 ³ 富大・教員・生融 ⁴ 富大・院後・生融 ⁵ 富大・教員・工

3. 構造式を名前に変換する

4. 上記の 2 と 3 の項を最終的に元のドキュメントにあうように合成する

ここで上記の 1. と 2. はアナログ/デジタル変換法として既に報告例があり、また 4. は画面読み上げソフトウェア (スクリーンリーダー) をインストールして対応できることから、本研究では 3. について、C# 言語を用いた新たなプログラムを検討した。

描画された化学構造式の MDL molfile への変換及び MDL molfile から化合物名の決定には、それぞれ市販のソフトウェアを用い、MDL molfile の受け渡しのためのプログラムを C# を用いてプログラミングした。化合物画像から MDL molfile を抽出し、その molfile を IUPAC 名作成ソフトウェアに渡して化合物名を読み上げた。下記に化合物名一覧が表示されている画面 (左図) と一覧から選んだ化合物を表示し、画面左上にその名前が出力された画面 (右図) を示す。

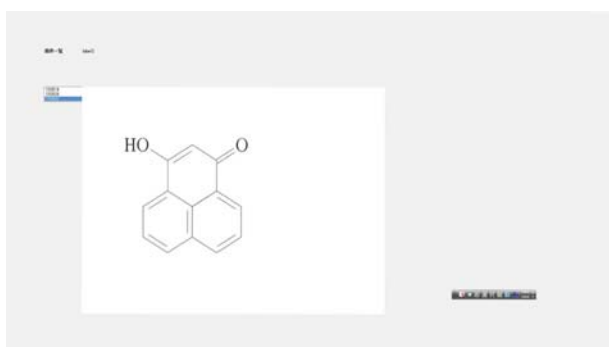


図 1: 化合物リスト一覧

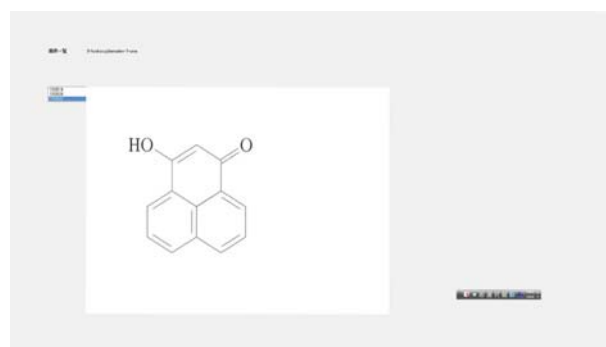


図 2: 化合物とその名前を表示している画面

図 1 は化合物画像を含む画像ファイルの一覧を表示していて、該当する構造式も表示している。ここで上下カーソルでたどると別々の構造式が表示される。フォーカスのあるファイルリスト上でリターンを押すと、図 2 に画面が変わり、構造式の左上部に IUPAC に従った化合物名が英語表記され、同時に化合物名を音声で読み上げることができた。

商用化学構造データベースである MDL molfile はケモインフォマティクス領域におけるデータ交換フォーマットのデファクトスタンダードであり、化学構造式のアナログ/デジタル変換または IUPAC 法に準拠した化合物命名法においてそれぞれソフトウェアが提供されていたが、本法で試作した C# 言語プログラムを用いれば、化学構造式画像から一段階で化合物名を表示/読み上げることが可能となった。

4. 謝辞

本研究は平成 25 年度～平成 27 年度の日本学術振興会科学研究費助成事業 (挑戦的萌芽研究、課題番号:25590293) の助成を得て進めている。

参考文献

- [1] 上條治夫、第 26 回リハ工学カンファレンス 2011
- [2] 藤田眞作：湘南数理科学研究所 <http://homepage3.nifty.com/xymtex/fujitas3/xymtex/index.html>
- [3] Joe R. McDaniel and Jason R. Balmuth, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1992 32(4) 373-378
- [4] Aniko T. Valko and A. Peter Johnson, *J. Chem. Inform. and Model.*, 2009 49(4) 780-787
- [5] Igor V. Filippov and Marc C. Nicklaus, *J. Chem. Inform. and Model.*, 2009 49(3) 740-743