

ハイパーグラフの反応設計への応用

Hypergraph Approach to Organic Synthesis

伊藤 照明*¹ 福田 収一*²
Teruaki Ito Shuichi Fukuda

- * 1 東京都立科学技術大学大学院工学研究科
Tokyo Metropolitan Institute of Technology, Tokyo 191, Japan.
* 2 東京都立科学技術大学管理工学科
Tokyo Metropolitan Institute of Technology, Tokyo 191, Japan.

1993年10月6日 受理

Keywords: dynamic perspective, perspective-oriented shift of view, idea processing, hypergraph, organic synthesis, precursor generation.

Summary

A new concept of Hypergraph proposed that creates an improved designing environment for graph structured object with dynamic perspective and perspective-oriented shifting methodology. The objective of this research is to create a modeling environment under Hypergraph concept in which creative idea processing is enhanced, for example, in synthesis route planning for molecular designing process. Combination of Hypertext navigation functionality and dynamic activation of Hypergraph anchor with perspective-oriented shifting capabilities presents a new environment for creative thinking in designing molecular structure.

1. はじめに

グラフ表現で扱われるオブジェクトを対象とした設計では、オブジェクトに対して設定される設計者の視点を中心としたパースペクティブに基づいて考察を行っているものとする。しかし、そうした視野に基づいて、しかもその視野を保持しながら設計を進めることを前提として開発された GUI はこれまで報告されていない。従来の GUI による設計の場合、設計者の思考が妨げられ、効果的な設計が阻害される理由の一つはこの前提を考慮していない点にあると考え、この前提に立った新しいアプローチとしてハイパーグラフの概念を提案する。まずハイパーグラフの応用分野である反応設計と支援システムについて述べた後、対象オブジェクトに対するパースペクティブの概念をこの反応設計を例として考察する。次にオブジェクトの設計について、パースペクティブの動的な設定とパースペクティブ指向による視点の移動という二つの点から考

察し、それらを支援するための新しいアプローチとして提案するハイパーグラフについて議論する。本稿では化学構造式による反応設計を例としてこの概念の有効性について述べるが、ハイパーグラフの対象とするオブジェクトは化学構造式に限定されるものではなく、種々の部品を組み合わせで構成される機械や自動車など多くの分野での応用が期待される。

2. 反応設計

2・1 反応設計と支援システム

反応設計とは、与えられた反応原料から合成反応により目的化合物を合成する、あるいはその逆に目的化合物に対して可能な逆合成反応により反応前駆体を探索する試みといえる。例えば化合物 1 から中間体 2 を経て化合物 3 を生成する合成反応(図 1)を設計することが反応設計である。こうした反応設計の組合せにより、出発原料から目的化合物を合成する最適経路の設計、あるいはその逆に目的化合物を適切な出発原料か

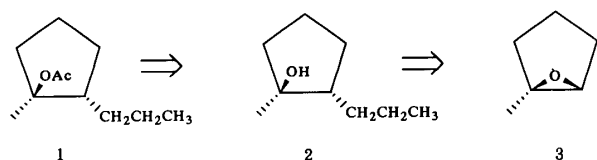


図1 反応設計例

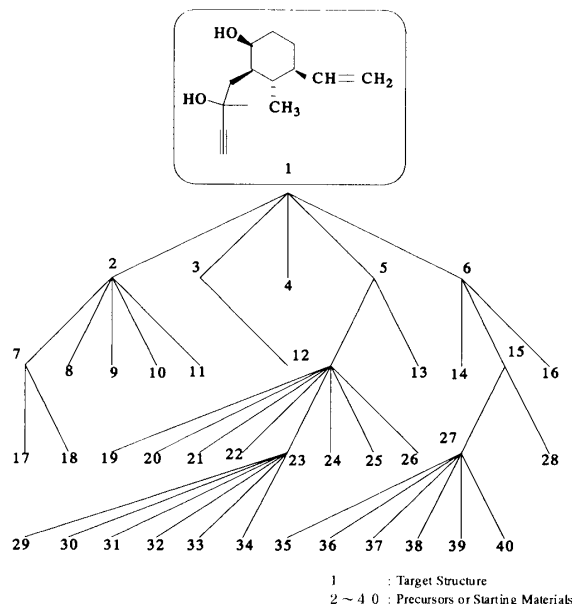


図2 合成ツリー

ら合成するための最適経路の設計は合成経路設計と呼ばれる。おのおのの合成反応を組み合わせることで、例えば図2に示すような合成ツリーが目標化合物1を中心として生成される。この合成ツリーにおける適切な経路設定が合成経路設計である。

合成経路設計の目標は、新しい化学物質(医薬、農薬など)の創造とすでに存在する化学物質のより効率の良い合成方法の開発にある。ところが特定の物質に対する合成過程の設計は非常に費用と労力を要し、しかもあらかじめ詳細な計画を立てることは容易ではない。したがって、合成経路を見つけ出す新しい手段の開発は産業界を始め学問的にも強く望まれている研究課題といえる。そのため、化学者たちはコンピュータとAI技法を使って合成ツリー(図2)を体系的に探索し、また化学反応についての無限ともいえる知識を組織化する手助けをするシステムの研究開発を行ってきた。

合成経路は、通常、複数の合成反応を組み合わせで設計される。化学者はおのおのの合成反応について標的構造を図示し、反応の効率、原料の値段、反応のための装置や温度、圧力などの条件を考慮し、それらを既知の化学反応によって作ることでより簡単な化合物と関連づける。それをさらに簡単な化合物と関連づけるという作業を試薬として購入可能、あるいは合成反応により合成可能な化合物群に至るまで続け

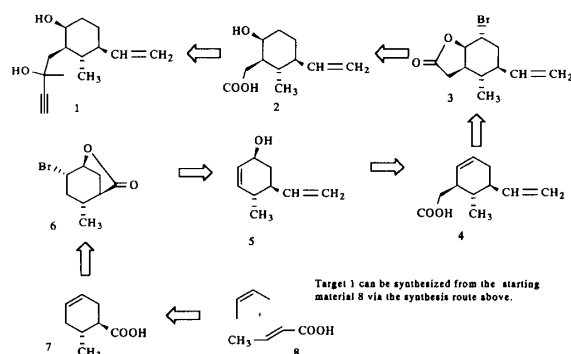


図3 合成経路設計例

る。こうした経路探索の結果、標的化合物から出発して合成経路の計画が立てられる。例えば、図2の化合物1を合成する経路としては合成ツリーを探索して図3に示した合成経路が設計される。実際の合成経路では、多くの種類の反応を含んでいる例もあり、複雑な場合には数えきれないほどの合成経路があり得る。例えば、20個程度の原子からなる簡単なステロイドでも1,018以上の経路が考えられる場合もあり、そうした複雑な合成ツリーから最適な経路を設計することが合成化学者の課題となる。合成化学者のそうした活動を支援するために、候補となる反応経路の合成ツリーの生成、そしてそこからの最適経路の選定に際して、その判断を支援する情報や知識の提供などが設計支援システムの目的といえる。

この反応設計あるいは合成経路設計を支援するエキスパートシステムとしてLAHSA [Pensak 77]などいくつかのシステムが報告されている。こうしたシステムの研究は理論指向型あるいは経験指向型によるアプローチで進められている場合が多く、ユーザインタフェースに関しては構造式の入出力機能以上の報告はあまりされていない。いずれのアプローチにしても、知識表現方法やその獲得方法あるいは適応方法といったエキスパートシステム一般の抱えている問題がここでもボトルネックとなっており、実用的なシステムの構築にはさらに時間がかかると思われる。

設計支援システムをそうした論点から議論することは他に譲るとして、ここではシステムの対象とする設計を反応設計、特に逆合成反応による前駆体生成を中心に、ユーザインタフェースの観点から議論し、本研究で提案するハイパーグラフの有効性について述べる。

2・2 化学構造式と化学グラフ

上述した設計支援システムにおける化合物処理の補足説明のため、そして化学構造式がグラフ表現で扱われるオブジェクトであることを示すため、計算機での

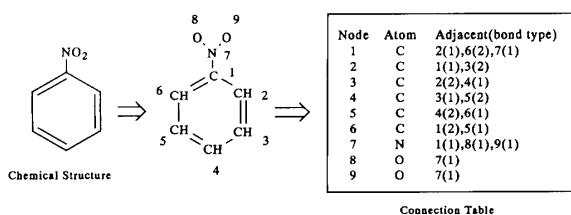


図4 化学グラフ表記の例

内部表現について以下に述べる。

化合物の構造を表現する方法としては組成式，分子式，示性式，構造式そして3次元モデルなどがある。記述された分子のさまざまな情報を含むと同時に3次元分子構造の直接的な基礎を与え目的に応じて必要な情報の抽出を図ることができるので構造式表現が便利である。

いわゆる分子設計システムではこの化学構造をコンピュータで処理可能とするため，化学構造式の数学的な表現が一般的に用いられている。これらは，グラフ理論に基づいた化学構造式の表現方法であるため，化学グラフ[Lynch 71]と呼ばれており，計算機内部では隣接行列として取り扱われる。この隣接行列から作成される結合表が実際の処理には用いられる(図4)。そして，合成反応は反応原料と反応生成物という2種類の化学構造式から構成される反応結合表で扱われる。

化学グラフでは，化学構造式の原子を点，化学結合を辺とする隣接行列として表現する。水素原子は原則的に省略され，各原子の結合次数に応じた省略時の値が水素原子の数としておのおの自動的に割り当てられる。

2・3 前駆体生成と反応設計

合成経路設計は先に述べたように，合成ツリーの作成や最適経路の探索という複雑な処理であるが，その基本は反応設計といえる。なぜなら，目標化合物を合成するための前駆体生成といった一つ一つの反応設計を組み合わせることで合成経路設計が行われるからである。ここでは前駆体生成の過程を例として反応設計について述べる。

前駆体生成とは，目標化合物に適応できる構造変換規則を探索しそのなかでも最も適当な変換規則を適用し構造変換を行い，前駆体となる化学構造式を生成することをいう。図5に前駆体生成の例を示す。目標化合物1を合成するための前駆体としては化合物2から6といった候補構造が考えられる。この処理では，候補となる化学構造を生成すること，さらにそのなかから適切な前駆体を選定することが要求されるが，目標化合物に対する考察と適応可能な変換規則の探索が要点となる。

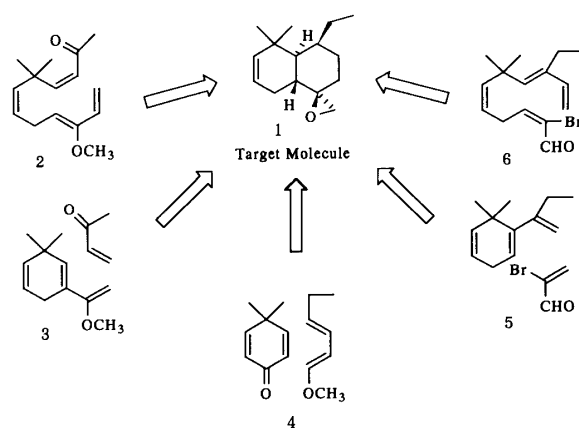


図5 前駆体生成例

設計支援システムにより行う前駆体生成の処理は以下に述べる五つのフェーズに分類できる。

(Phase 1) まず目標化合物に対する特徴認識が行われる。特徴認識とは化学構造式を考察して化学的な特徴部分構造を認識し抽出することである。認識の対象となる部分構造としては主に官能基と環状構造があげられる。官能基の例としては水酸基(-OH)やカルボキシル基(-COOH)などの化学的な特徴構造が，環状構造の例としてはベンゼン環があげられる。この特徴認識は，対象構造式の内部表現である化学グラフと，特徴構造としてあらかじめ登録してある部分構造とのマッチングをとり，対象構造式から抽出する。また設計者が各自の判断で認識し，それを計算機に設定する場合もある。

(Phase 2) 次に，この特徴認識の結果に基づいて反応部位の部分構造を想定する。すなわち，反応部位の候補部分構造をあらかじめ登録しておき，対象化学構造式からその候補構造を抽出する，あるいは，設計者が対象化学構造式から候補反応部位を明示的に指定する。複数の反応部位が候補として想定される場合があり複雑である。

(Phase 3) 反応部位が想定されると，想定した反応部位に適応する反応規則を探索する。そのためには，反応規則をコード化して知識ベースに蓄積しておき，想定した反応部位に応じた反応規則を検索できるようにしておく。あるいは反応事例を蓄えておき，想定した反応部位に関連する合成反応から反応規則を抽出して参照とすることで想定することもある。

(Phase 4) 探索した反応規則のなかから最適な規則を選択し，その規則を適用して構造変換を行う。反応変換規則はその表記方法自体まだ確立されていない。例えばCHMTRN[1]といった特殊な言語により表記されているシステムもあるが，基本的には反応前後で変換が行われる部分構造をif-thenルール形式で

表現できていればよい。例えば、規則が (if-NH₂ then-NO₂) と与えられれば、反応部位にこの反応規則を適用して構造変換は形式的に行える。

(Phase 5) こうして構造変換により作成された前駆体構造を評価し、不相当であれば別の前駆体構造を探索する。前駆体として相当であれば、この構造を次の目標化合物として同様の処理を繰り返す。

これら一連の処理の流れをまとめると、前駆体生成のための反応設計は次のようになる。この前駆体生成を組み合わせて、目標化合物合成のために経路を設計することが合成経路設計となる。

Phase 1. 目標化学構造式の入力

Phase 2. 特徴認識による反応部位の設定

Phase 3. 反応部位に適応可能な構造変換規則の探索

Phase 4. 変換則での構造変換による前駆体候補構造の生成

Phase 5. 候補構造および反応経路の評価と次の目標構造の設定

前駆体生成の流れを五つのフェーズに分類し、反応設計で行う処理について述べた。

3. パースペクティブ

3・1 反応設計とパースペクティブ

前駆体生成を例として示した反応設計の処理の流れからわかるように、反応部位と構造変換規則が決まれば構造変換により反応前後の構造式の生成は可能である。ところが、これらの決定までには、対象化学構造式中の反応部位の設定や、その反応部位に適用可能な変換規則の探索を試行錯誤的に繰り返しながら考察する。この処理の中心となる特徴抽出(Phase 2)に着目すると、反応設計では対象オブジェクトである化学構造式に対して多方向の視点から考察を行っているといえる。その視点とは反応設計の場合には対象化学構造式で反応試薬と反応する部位、あるいは合成反応により生成される化学結合といった反応部位に相当する。構造式中に反応部位の候補となる部分構造は複数あり得るため、それらに応じた多方向からの視点による考察が行われる。

例えば、図6の目標化学構造式から反応部位を考察する場合を考える。候補対象となる部位は反応中心AやBなど複数考えられる。それぞれの候補部位に対して考察が行われ最適な部位が決定される。図6で部位Aが反応部位とした場合、この部位Aが設計をさらに進めて、Phase 3やPhase 4の処理をするうえでの考察視点の中心となる。

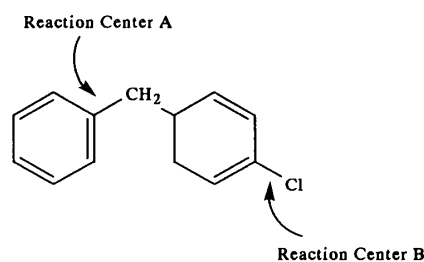


図6 パースペクティブ中心の動的設定

ここで注目したい点は、同一対象構造に対して同一視点で考察する場合であっても、考察結果が同じとは限らないことである。なぜなら、たとえ同一方向の視点であっても、その視点を中心として対象オブジェクト全体を均一に見る場合もあるが、対象オブジェクトを構成する各部分に個別の重みづけを行い、視点部位と各部分を柔軟に組み合わせて考察をする場合が一般的であるからである。

反応設計では設計対象となるオブジェクトである化学構造式に対して反応性の観点から特定の部分構造を反応部位として想定する。この反応部位が考察の中心となるが、その他の部分構造、つまり官能基や環状構造などの化学的な特徴構造でこの反応部位を取り囲むように配置されている部分構造も考慮される。それらの部分構造に対しては、例えば、反応部位からの距離に依存した重みづけを行い、総合的な判断を行う。図6の例では、反応中心Aに対しては、芳香族6員環とメチレン基に隣接、そのメチレン基に6員環が隣接、その6員環のパラ位にクロル基が結合していることなどが考慮される。反応部位Aに適応する変換規則を探索する場合には、反応中心Aから最も距離の離れているクロル基よりも、反応中心Aに隣接する芳香環やメチレン基を優先して考慮し、探索や設計を行う。こうした考察を、視点を中としたパースペクティブな視野に基づく設計と呼ぶ。

3・2 化学構造式用 GUI とパースペクティブ

利用者の立場からは、GUIによる化学構造式の描画手法により入出力自体は非常に容易になっている。入出力のためにWLN[Smith 68]のような特殊な表記方法を覚える必要はなく、また化学構造表記の内部表現である結合表[Lynch 71]を意識することもない。マウスによるダイレクトマニピュレーションにより紙面上に構造式を描画する要領で入出力が行えるGUIが開発され一般に利用されている。

化学構造式を含んだレポート作成が目的であれば機能的には要求をほぼ満たすプログラムがいくつか発表されており、化学研究者の業務の一部を確実に支援し

ている。

さらに、化学構造式取扱いのための GUI には MACCS に代表される化学構造式データベースや分子の安定化エネルギーの計算や分子軌道法の計算を行う分子設計エキスパートシステムのユーザインタフェースなどとして商品化されているものもあり、構造式の入出力や計算機上での取扱いを容易なものとしている。

こうした例に見られるように、GUI の機能は向上し、各種用途に見合ったカスタマイズがなされ目的に応じて操作性は向上している。しかし、これらは WLN あるいは結合行列などの内部表現へのインタフェースとしての向上であっても、情報や知識へのアクセスは GUI を使用しない場合と本質的には変わっておらず、先に述べたパースペクティブに基づく設計を考慮していない。

反応設計では、先の例で見たように、対象オブジェクトである化学構造式に対して多様な視点で考察を行っており、その視点を中心としたパースペクティブな視野を持ち、その視野を保持しながら処理していると考えられる。

例えばある目的化合物の合成には、対象化合物の物性データの調査、構造式中において反応性の高い部分構造の抽出、合成の参考となる類似合成反応の調査などの検討により合成反応とその反応における前駆体を設計する。一方でその前駆体についても、試薬としての入手可能性を調べたり、合成反応については収率や反応条件、あるいは反応中間体の妥当性などを検討し、これらの検討結果を総合的に考慮して適切な合成反応を設計する。単一の合成反応により前駆体を生成する反応設計をするだけでもこのように実にさまざまな知識や情報が必要とされるため、複数の合成反応を経由する合成経路の場合にはさらに複雑となる。

こうした設計において、データベース検索や、反応規則を蓄えた知識ベース検索、そしてアプリケーションプログラムの利用などへのインタフェースはおのこの処理で要求される。例えば、目標構造式の入力を終えると類似化合物の反応事例を検索するために別の処理に移り、検索式を入力して検索を行い、検索結果を書き写してもとの目標化合物処理に戻る。さらには、その結果を考慮して反応変換規則を知識ベースから探索するにはまた別の処理として行うというように、複数の異なる処理にまたがって試行錯誤を繰り返しながら設計を進めることが一般に行われる。このような処理において入出力に優れた GUI を使用しても、情報や知識へのアクセス方法としては、WLN を使用する場合と本質的には変わっていないため、得られた情報や

知識をおのこの処理の間で有機的に統合して利用することが難しい。すなわち、既存のこれらの GUI では、先に述べたパースペクティブに立った設計支援は困難である。

3・3 動的パースペクティブ

合成経路設計およびその支援のためのエキスパートシステムと経路設計における各フェーズでの処理内容については前述したとおりである。また、こうしたシステムを使った経路設計の特徴は、設計対象となる化学構造式に対する視点とその視点を中心としたパースペクティブにあることについても述べた。ここではそうしたパースペクティブが固定的ではなく動的である点、つまり状況に応じて視野を変化させながら設計を行っている点について考察する。

パースペクティブを設定する場合、対象オブジェクトに対して視点が一意的に決まるのではなく、視点を動かしながら行う考察の結果として視点が設定されるが、こうしたパースペクティブの設定を動的と呼ぶことにする。化学構造式を用いて会話型で行われる反応設計の処理においては、対象化学構造式に対してさまざまな視点からの考察が行われることについてはすでに述べたとおりである。図 6 の目標化学構造式から反応部位を探す場合、候補対象となる部位は部位 A、B など複数考えられるが、それぞれの候補部位に対して考察が行われ、最適部位として、例えば反応部位 A が決定される。対象オブジェクトに対して設定される視点は、設計の条件によりそのつど異なるため、動的に設定される。

この反応部位 A を視点とするパースペクティブの対象領域はその視点に対して固定的に決まるものではなく、ここでも動的な認識が行われる。図 6 で反応部位 A を中心とした考察について述べたが、ここでは視点からの距離によるパースペクティブを考察する。例えば、図 7 において部位 A を候補の反応部位として考察する場合、部位 A を考察の視点の中心として静的に捉えるだけでは十分ではない。つまり、部位 A を中心として隣接部位をも含めた部分構造を考察の対象とすることが要求される。この隣接とは第 1 隣接から第 n 隣接まで考えられる。最も狭義には選択した反応部位 A のみであるが、最も広義には選択した部位 A を中心として構造式全体が考察の対象となる。この領域の設定では、選択した部位 A を中心とするパースペクティブ中心から対象となる隣接部分構造を動的に変化させながら考察を行い、パースペクティブ領域の最適化が行われる。つまり、ある視点を中心としてどの部分構

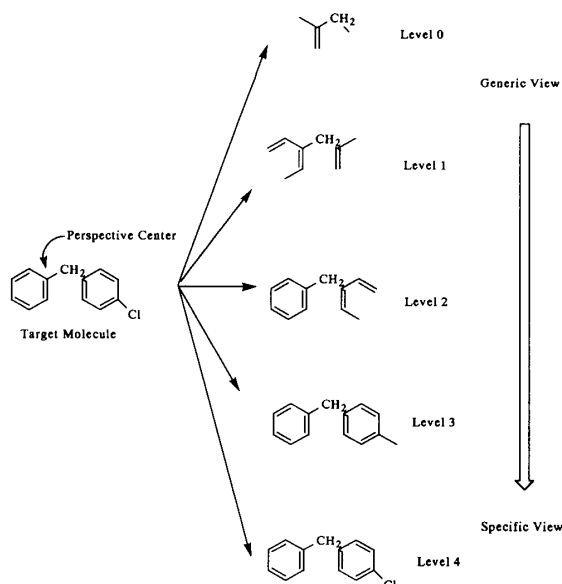


図7 パースペクティブ領域の動的設定

造まで考慮して設計するか視野を動的に決定する。

このように動的パースペクティブとは、対象化学構造におけるパースペクティブの中心(Perspective Center)の動的な設定、そしてその中心からのパースペクティブの対象領域(Perspective Range)の動的な設定を意味する。

こうした動的パースペクティブの概念は実際の設計過程において特徴的であるにもかかわらず、従来の設計支援システムにおいて、少なくとも筆者の知る限り組み込まれた例は報告されていない。本研究の目的の一つはこの動的パースペクティブ概念のGUIへの導入にある。

3・4 パースペクティブ指向による視点移動

設計における対象オブジェクトに対するパースペクティブと動的パースペクティブの概念は上述のとおりである。しかし、設計過程の各処理を考察するとこのパースペクティブの動的な設定だけでは必ずしも十分とはいえない。各処理でこの動的に設定されたパースペクティブが共通に認識され、共有利用できることが有効と考える。なぜなら、実際の設計では、動的に設定したパースペクティブを維持しつつおのおのの処理を行っており、各処理で共通の視野を維持しているからである。本論文ではこれをパースペクティブ指向による視点の移動と呼ぶ。

出発原料から目標化合物に至る合成経路設計においても、あるいはそのなかでのおのおのの反応設計の過程においてもパースペクティブすなわち目標化合物に対する視点は継承される。ここでは、パースペクティブ指向による視点の移動が前駆体生成の反応設計にお

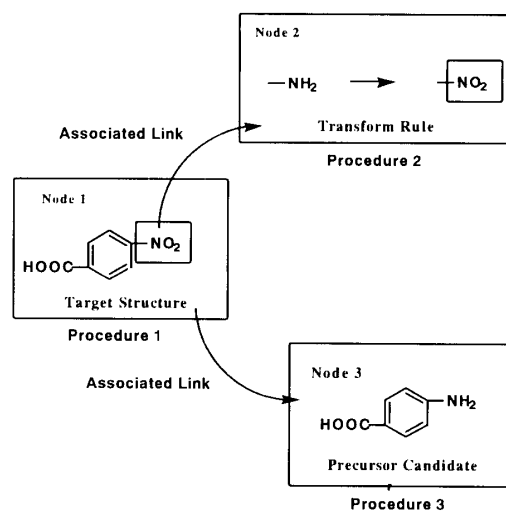


図8 パースペクティブ指向による視点の移動

いてどのように行われるかについて以下に考察する。

図8において前駆体生成の反応設計で行われる三つの処理として処理1(Procedure 1)、処理2(Procedure 2)、処理3(Procedure 3)を考える。処理1は反応部位の設定、処理2は反応変換規則の設定、処理3は構造変換処理とする。

処理1においては、目標化合物の考察を行い、どの部分構造を反応部位とするかを検討する。そのため、特徴認識により目標化合物に含まれる化学的な特徴を持つ部分構造を探索する。候補となる部分構造が見つかり、それぞれの部分構造の性質を比較し、反応部位として設定する部分構造に優先順位をつける。こうした考察の結果、目標化合物のなかのある部分構造が反応部位として設定される。

処理2では反応変換規則の考察を行う。これは処理1で設定した反応部位の部分構造を生成する反応規則を探索し、候補となる反応規則のなかから最も適切と思われる反応規則を決定する。

処理3では、処理2で決定した反応規則を目標構造式の反応部位に適応して構造変換を行う。

これらの処理でパースペクティブは継承されている。処理1においてパースペクティブの中心と対象範囲が設定され処理2に移動する。処理2で変換規則を探索する際にはこのパースペクティブのもとで行われる。処理2での探索条件は対象化学構造式の反応部位Xであるが、候補の絞り込みには処理1のパースペクティブを用いて決定する。処理1と処理2では共通のパースペクティブが用いられている。処理3で構造変換を行うには、処理2で決定した構造変換規則を反応部位に適応するが、ここでも共通のパースペクティブが用いられている。

目的に応じてウィンドウが提供され、おのおののウ

インドウでそれぞれの処理がされる環境の提供は反応設計支援システムにおいて有効である。しかし、各ウィンドウ間で情報の共有が行われていないため、利用者の思考が中断される結果となり、支援を受けている利用者が逆にシステムの中断を補うことになりがちである。パースペクティブ指向による視点移動が実現できれば、ウィンドウ間で利用者の視野が保持され、思考の中断を避けることができる。

4. ハイパーグラフ

4.1 ハイパーグラフの定義

反応経路設計のための化学構造式設計において要求されるパースペクティブの概念、そして動的パースペクティブとパースペクティブ指向による視点の移動の概念について前章で述べた。本研究では、これらの概念をシステムに取り入れ、ユーザの設計過程を高度に支援するとともに設計思考そのものに建設的な刺激を与える新しいユーザインタフェースの構築を目標とする。そこで、そうした GUI の実現を可能とするデータ構造としてハイパーグラフを提案する。

ハイパーグラフを下記のように定義する。

「ハイパーグラフとはナビゲーション機能を有するグラフ構造型アンカーである。ナビゲーション機能とは、あるノードから関連するリンクにより結合された別のノードにたどれる機能をいう。アンカーとは各ノードに設置されたボタンであり、このボタンを起動させれば関連リンクにより結合ノードに即座にアクセス可能となる。」

例えばあるノード 1 にアンカー A を配置する(図 9)。このアンカー A は別のノード 2 と結ばれており、A を起動させればノード 2 にナビゲートできるとする。ノード 1 にさらに別のアンカー B を配置し、この B からノード 2 にナビゲートできるとする。ここで、アンカー A, B を辺で結合しグラフ構造を持たせる。ノード 1 にはグラフ構造を持つアンカー A-B が配置される。このアンカーは A でも B でもあるいは A-B を選択して起動させてもノード 2 にナビゲートできる。

ハイパーグラフの特徴は、ナビゲーションが単にリンクをたどるだけでなく、ナビゲーションを起動させるアンカーがグラフ構造を持ち、そのグラフ構造がナビゲーション時にリンクを伝わり移動先のノードへ継承されることである。アンカー A を起動させてノード 2 にナビゲートすればアンカー A のグラフ構造がノ

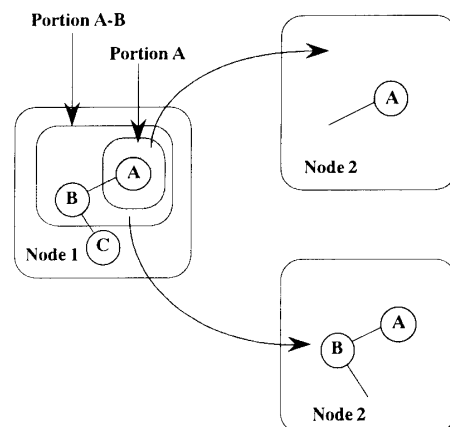


図 9 ハイパーグラフの概念

ード 2 に伝達されノード 2 で利用される。また、アンカー A-B を起動させてノード 2 にナビゲートすればアンカー A-B のグラフ構造がノード 2 に伝達されノード 2 で利用される。ナビゲート先のノード 2 は同じであっても、どのアンカーを起動させるかにより、ノード 2 で表示される情報の内容の変更が可能となる。つまり、グラフ構造を持つアンカーから興味のある部分グラフを会話型で選択して起動させられれば、その部分グラフの関連する情報にナビゲートできる。

グラフ構造を持つオブジェクトであれば、その構造からハイパーグラフに変換ができる。化学構造式が化学グラフで表せるので、化学構造式はハイパーグラフ構造に変換される。

ハイパーグラフで表現された化学構造式はすべての頂点、すなわち原子がアンカーとなっている。さらに、任意の部分グラフつまり隣接する頂点と辺、すなわち隣接する原子と化学結合からなる部分構造を選択すればそれも一つのアンカーとなり、関連するリンクにより結合されている別のノードにナビゲートできる。ハイパーグラフの特徴は、このナビゲーションが単にリンクをたどるだけでなく、ナビゲーションを起動させるアンカーとして機能した部分構造がリンクを伝わり移動先のノードへ伝達されることである。

例えば、関連するリンクにより結合されている三つのノードをそれぞれ 1, 2, 3 とする。ノード 1 は化学構造式を表示するノードとする。ノード 2 は構造式を描画するグラフィックエディタとし、ノード 1 と関連リンクにより結合されている。ノード 1 と関連リンクにより結合されているノード 3 は、与えられた化学構造式を持つ化合物を生成する合成反応例を表示するノードとする。

ノード 1 に設定されているアンカーを起動させノード 2 に移動する。ノード 2 で化学構造式を描画し、終了したらノード 1 に戻る。修正が必要であれば構造全

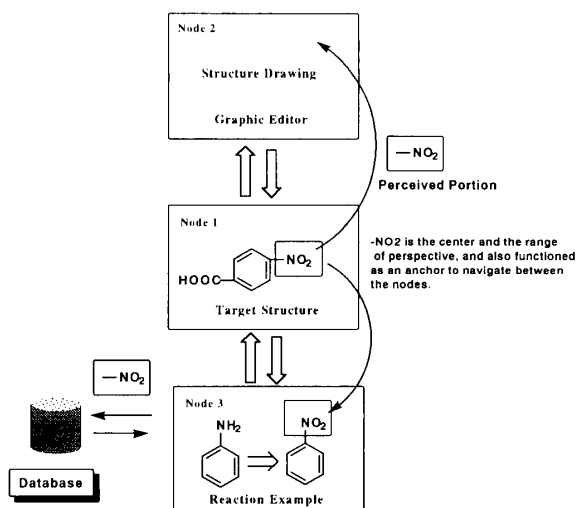


図10 ハイパーグラフ GUI の例

体をアンカーとして起動させノード2に戻ってもよいし、必要な部分のみを選択してアンカーとして起動させノード2に戻ってもよい。選択した部分が修正の対象とみなされ、ノード間の移動時にパースペクティブとして保存される。もし、合成反応例を表示させたいければ興味のある部分構造あるいは構造全体をノード1で選択してアンカーとして起動させ、ノード3に移動する。ノード1で選択された部分がパースペクティブとしてノード3に伝達され、これがノード3では反応事例データベースへの検索条件式として使用され結果が表示される(図10)。

4・2 ハイパーグラフによる反応経路設計

ハイパーグラフによる反応経路設計の具体的事例を以下に示す。

GUIにより目標化合物を描くと結合表として計算機内部表現として取り扱われる。この結合表をもとにハイパーグラフへと変換を行う。ここで、全体を選んでアンカーとして起動させると、関連リンクで結合されているウィンドウのリストが表示される。そのなかから例えば特徴認識のウィンドウを選びクリックすると特徴認識の処理が行われ、結果が表示される。その結果から、特徴部分構造を選択し関連リンクで結合されているウィンドウのリストを表示させ、例えば、反応変換規則のウィンドウを起動させる。ここに表示される変換規則に好ましい規則があればそれを選択し反応部位に適応して構造変換処理を行う。

また、反応事例から設計を行う場合にも応用できる。例えば目標化合物全体を選択し、ウィンドウのリストを表示させ、そのなかから反応事例を選択し、検索を開始する。反応例が見つければ利用できるが、見つからなければ選択の対象を少し狭めて同一の処理を行

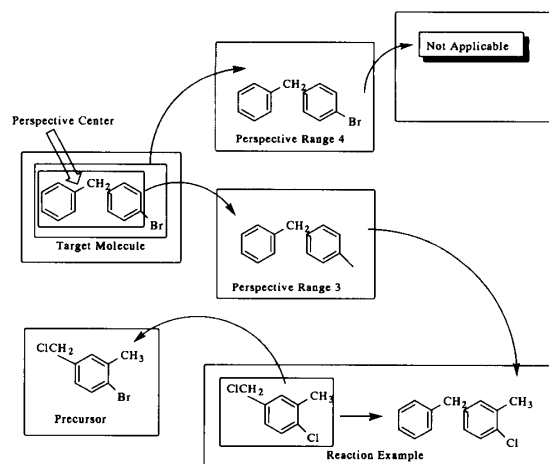


図11 ハイパーグラフによる反応設計の例

う。そうして、関連の反応が見つかるまで繰り返す。関連の反応事例が見つければ、それを参照にして前駆体を生成させる。また、部分構造で反応規則を探索する場合に、複数の対象規則が見つかる場合があり、そのときは指定した部分構造を中心として、動的に対象領域を変化させ規則の絞り込みを行うなどの処理にも向いている(図11)。

4・3 ハイパーグラフの他分野への応用

ハイパーグラフの概念は化学構造式だけではなく、グラフ表現で扱われるさまざまなオブジェクトの設計に適用が期待できる。一例として、ここでは椅子のデザインを考え、簡単に説明する。

椅子はヘッドレスト、背もたれ、腰掛け、ひじ掛け、脚やそれらを結びつけるアームから構成されるとする(図12)。ここで、ヘッドレストの設計を考える。設計者は視点の中心をヘッドレストとして、材質、色、形状などを検討するであろう。椅子に用いるヘッドレストであるから、例えば形状を決めるためには、その他の部分を無視した単体での設計では不十分で、背もたれやひじ掛けなどの椅子を構成するその他の部分との組合せを考えて決めるであろう。材質の検討では背もたれとの接合方法やヘッドレストに掛かる荷重などを考慮して決めるであろうし、色は全体のバランスを見て決めるであろう。

このように、設計者の視点はヘッドレストにあるが、その視点を中心として対象オブジェクトつまり椅子をパースペクティブな視野で捉えて設計を行っている。そうした設計の過程において必要なデータは、そのパースペクティブを保持しながら、別の処理により入手しつつ設計を進めていくことが要求される。例えばヘッドレストへの荷重を、ヘッドレスト、背もたれ、そして腰掛けの結合角度から計算するならば、そこでは

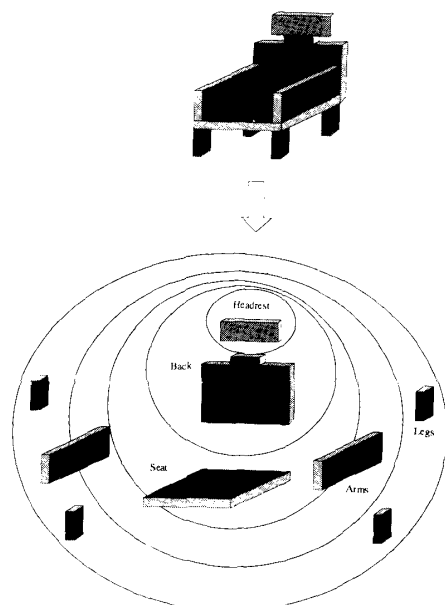


図 12 椅子の設計におけるパースペクティブ

その三つの部分をパースペクティブとして保持して処理を行うであろう。

この例では、対象オブジェクト、つまり椅子に対するパースペクティブが、設計の対象部位であるヘッドレストを中心に動的に設定され、そのパースペクティ

ブを保持しながら視点の移動による処理で設計が行われていることを示した。このようにグラフ表現可能なオブジェクトの設計はハイパーグラフの応用として期待される分野である。

5. ま と め

化学構造式を対象とする反応経路設計を例として、対象オブジェクトに対するパースペクティブの概念について述べた。そして、動的パースペクティブの実現とパースペクティブ指向による視点の移動を可能とするハイパーグラフの概念を提案した。化学構造式のようにグラフ表現されるオブジェクトを対象とした構造設計にハイパーグラフの概念を導入すれば構造設計に有効な GUI が構築可能であることを論じた。また、ハイパーグラフの対象オブジェクトとしては化学構造式に限定されず、種々の部品を組み合わせる構成される機械や自動車など多くの対象が期待される。

なお、本論文で提案したハイパーグラフの実装方法については別報にて報告する予定である。

◇ 参 考 文 献 ◇

- [Ahrens 88] Ahrens, E. K. F.: *Cunsomisation for Chemical Database Applications in Chemical Structures*, Warr, W. A. (ed.), pp. 97-111, Springer-Verlag, Berlin(1988).
- [Conklin 87] Conklin, J.: Hypertext: An Introduction and Survey, *IEEE Computer*, Vol. 20, No. 9, pp. 17-41(1987).
- [Lynch 71] Lynch, M. F., Harrison, J. M., Town, W. G. and Ash, J. E.: *Computer Handling of Chemical Structure Information*, McDonald, London(1971).
- [Nielsen 90] Nielsen, J.: The Art of Navigating through Hypertext, *Commun. ACM*, Vol. 33, No.3, pp. 296-310(1990).
- [Pensak 77] Pensak, D. A. and Corey, E. H.: LHASA - Logic and Heuristics Applied to Synthetic Analysis, *ACS Symp. Series*, Vol. 61, pp. 1-32(1977).
- [Smith 68] Smith, E. J.: *Wiswesser Line Formula Chemical Notation*, McGraw-Hill, New York(1968).

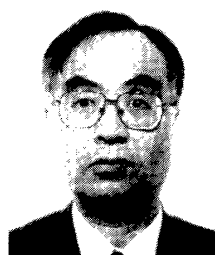
[担当編集委員・査読者：大貝晴俊]

著 者 紹 介



伊藤 照明(学生会員)

1984年千葉大学工学部卒業。1989年筑波大学大学院理工学研究科修士課程修了。現在、東京都立科学技術大学大学院工学研究科工学システム専攻博士課程在学中。人工知能、ヒューマンインタフェース、データベースの研究に従事。ACM 会員。



福田 収一(正会員)

1967年東京大学工学部産業機械工学科卒業。1972年同大学院機械工学専攻博士課程修了。工学博士。同年、同工学部精密機械工学科助手、1978年大阪大学溶接工学研究所助教授、1989年東京大学生産技術研究所客員助教授、1991年より東京都立科学技術大学管理工学科教授。設計、生産の知能化、協調工学の研究に従事。日本機械学会、ASME、精密工学会、IEEE、計測自動制御学会等各会員。