

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に関する研究
Reading method of the chemical formula for the
support technology of visual disabilities using
computational chemistry.

富山大学大学院生命融合科学教育部
先端ナノ・バイオ科学専攻、教育分野 薬品製造学
学籍番号 31281201
氏名 上條治夫

平成 28 年 2 月 23 日

目次

第1章	序論	3
1.1	研究の背景	3
1.2	研究の目的	4
1.3	本論文の構成	5
第2章	視覚障害者の情報獲得手段の現状と課題	6
2.1	スクリーンリーダを用いた文字情報へのアクセス	6
2.2	視覚障害者の化学構造式情報獲得法の現状と問題点	7
2.2.1	読み上げ法による化学構造式認識	7
2.2.2	触覚だけに依存しない化学構造式確認法の必要性	9
第3章	視覚障害者による化学構造式の描画法	10
3.1	一般的な構造式エディタ	10
3.2	視覚障害者に利用可能な構造式エディタ	10
3.2.1	XyMTeX法の概要	10
3.2.2	XyMTeX法を用いて作成した化学構造式とその汎用名	11
3.3	視覚障害者がXyMTeX法を用いて化学構造式を描画する上での問題点	11
第4章	視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの基本理論とその解説	12
4.1	化学データベースの現状	12
4.2	化学構造式抽出と化合物の自動命名	13
第5章	視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの開発	14
5.1	実験用システム	14
5.1.1	システムの概要	14
5.1.2	CLeArSの基本概念	16
5.1.3	CLeArSの機能	16
5.2	資料からの化学構造式抽出実験	16
5.3	抽出した画像を用いた実験	20
5.3.1	実験で用いた画像	20
5.3.2	抽出画像を用いた実験	22
5.3.3	フォントによる抽出実験結果の比較	22
5.4	考察	24
第6章	結論	28
第7章	業績一覧	30

第 8 章 謝辞	31
参考文献	32
付 録 A XyMTeX で描画した化学構造式	36

第1章 序論

1.1 研究の背景

教育をバリアフリーの観点から見直すと共に、バリアフリーを教育研究の領域において推進する試みが着目されている。バリアフリーは生徒・学生や教師、教育行政に携わる者をはじめ、一般社会人が本来学習して身につけておくべき基礎的知識であり市民的教養である。

教育的観点からみた場合、分子の構造や性質を理解することは、化学や生命科学などの、分子を取り扱う幅広い自然科学分野において基本的かつ不可欠な要素であり、理科教育のスタート地点の1つである。この段階で分子に対する学習者の知的好奇心を引き出し、理解を促すことは重要であり、進路の方向を決める大きな要因となりうる。このためには、学習者が興味をもって分子やそれに関連する学習に取り組み、かつ理解を深めることができる教材が望まれる [1]。分子やその化学反応といった目に見えない対象や概念を理解し考察する化学分野においては、化学構造式のような視覚的な表現や分子模型、分子軌道図などのモデルは必須であり、思考や情報伝達のための不可欠な手段として用いられている。これらを目的に応じてコンピュータで可視化するグラフィックシステムも種々開発され、研究や教育の現場で利用されている。 [2] [3] [4] [5]

化学あるいは生命科学現象を聴覚を利用してとらえたり、対象に触れて体験することは、視覚障害学生の興味を引き出し、思考のきっかけをつくるために有効であると考えられ、そうした学生のために触覚や聴覚を利用した様々な装置が工夫されている。 [6] [7] [8] [9] [10] [11] しかし画像情報にアクセスしにくい視覚障害者にとって、このような化学や生命科学に関わる情報の入手が必要であるにも関わらず、画像情報の獲得に関する分野での手法についてはほとんど検討されていない。

近年、コンピュータ技術の発達に伴い、OCR(Optical Character Recognition、光学文字認識)による文字認識法についての研究が盛んになってきた。OCR法は文字には有効だが、文字以外は扱えないので、視覚障害者のための支援技術として、文字以外の画像を含んだ情報の認識法の構築が必要である。

さて、日本学生支援機構の平成20～22年度障害のある生徒の進学促進・支援のための高大連携の在り方に関する調査研究委託事業報告書及び各大学の調査研究成果 [12] で、特別支援学校からの大学進学率を参照する。平成21年の文部科学省による学校基本調査 [13] では、特別支援学校に通う障害のある児童生徒数は117,000人とされる。また、同学校基本調査結果では、平成21年3月の特別支援学校の高等部の卒業生は15,000人であり、うち大学進学者は462人(卒業生の3.1%)であった。障害区分の参考値として、平成18年までの盲学校、ろう学校、養護学校の区別が存在した際のデータを参照すると、平成18年度の在籍者数は3,688人(盲、ろう、養護学校の全児童生徒の3.5%)、6,544人(同6.3%)、94,360人(同90.2%)であった。さらに、厚生労働省の平成18年身体障害児・者実態調査結果から、障害者手帳のある大学入学年齢に近い18、19歳の障害種別の人数を抜粋すると、視覚障害1,000人、聴覚・文字障害2,000人、肢体不自由7,000人、内部障害3,000人、重複障害5,000人であり、合計は12,000人とされる。さらに、診断はあるが障害者手帳を持たない障害者の数は、厚生労働省の統計には含まれていない。平成16年の文部科学省の調査「通常の学級に在籍する特別な教育的支援を必要とする児童生徒に関する全国実態調査」 [14] では、障害の診

断や、知的な遅れはないが、LDやADHD、高機能自閉症等に類する学習や行動面で著しい困難を示す児童生徒が通常の学級に6.3%含まれることを報告した。学校基本調査における高等学校全日制の調査結果を参照すると、平成21年度3月の卒業生は1,064,000人であり、高等教育機関への進学率は53.9%（通信を除く場合、53.8%）、進学者数は573,000人であった。

このように特別支援学校からの大学への進学は少なく、大学での進学先は概ね文系であり、理系への進学者数は統計に表れていない。

詳細は第2章で述べるが、視覚に障害を持つ人々が情報端末を利用する時には、画面の文字情報を音声で読み上げることができるソフトウェアや、点字ディスプレイなどを用いることで、文字情報には容易にアクセスできる。たとえば、紙に書かれた文字を独力で読むことは難しいが、紙をスキャンしOCRを行うことで、そこに書かれた文字を読み取ることができる。さらに、この音声読み上げや点字出力を使用しながら、自分で漢字を含んだ文書が作成でき、晴眼者（視覚に障害のない人々）との間での情報の共有が可能となっている。インターネット上に存在する多くの情報へのアクセスも、このようなソフトウェアや機器を利用することで可能である。

このようにして視覚障害者は自ら多くの情報へのアクセスが可能となったが、これらはすべて「文字情報」に限る。インターネットなどを介して送受信されるのは文字情報だけでなく図形やグラフなどの画像情報も含まれ、その重要性はますます高まっている。文字だけでは表現が難しい情報や、理解の補助などを目的として頻繁に画像、つまり画像情報が使用されていて、情報伝達手段として、画像情報が重要な役割を持っている。しかし、これらの画像情報に対して、視覚障害者自らがアクセスすることは容易ではない。前述の報告からも明らかであるが、内容理解のためには画像情報のアクセスも重要であり、視覚障害を持つ人々へも何らかの方法でこれらの問題を改善する必要がある。

1.2 研究の目的

視覚を通して、人々は光覚、文字、図、周囲の様子、表情を知り、環境内での自己の位置を知り（定位）、移動できる。しかし、視覚を失った障害者は、情報の獲得、定位・移動が思うようにならない。そこで、古くから視覚代行・補助の研究がなされている。それらは、大きく文字・図のアクセスと、定位・移動に分類できる。そして支援の方式としては、以下のように分類される。

1. ボランティアによる補助
2. 盲導犬などの動物の利用
3. 機器とボランティアの組合せ
4. 環境内に何らかの機器を設置する方式
5. 設置せず使用者が携帯する機器のみによる方式

これらの方式はそれぞれ長所・短所がある。ボランティアによる補助は、信頼性と汎用性で優れているが、自立を望む障害者の心の負担になる。動物は、ボランティアに比べ自立の点で優れるが、信頼性と汎用性の点で劣り、また、生き物の不可避の問題としての世話と死がある。一方、機器のみでの代行は、汎用性と信頼性の問題があり、複雑な機器の点検・修理のためのサービス体制が必要だが、自動車の修理工場のような体制は経済性の点から実現できない。また、環境への機器設置は確実

であるが、設置費用・設置場所の選定・環境の変化への対応、という問題がある。

このように、唯一絶対の方式があるわけではなく、異なる方式での支援が、調和した形で発展することで、障害のレベル、ハンディキャップの程度が異なる視覚障害者の日常生活、社会活動を真の意味で支援できると言える。[15]

筆者らは上記5の方式で、視覚障害者が教科書や研究論文、特許情報などに記載されている化学構造式情報を獲得できるよう支援するシステムを研究・開発する。具体的な事例として、化学や生命科学についての学習の初級段階における視覚障害学生のための高等教育を考える上で、教育機関の現場対応とはまた別の次元の問題もいくつか存在する。その1つは専門書などの高等教育用教材を、視覚障害学生が利用可能な形に変換する方法がまだ充分ではない点である。

一般に視覚障害学生が利用できるのは、文字、触図または音声による教材である。

数式の読み上げには既に顕著な報告がある [16]、[17]、[18] が、化学式においては、点字を用いる「理科記号表記 [19]」があり、墨字（点字に対して、普通に書かれた文字や印刷された文字）に対応していて、元素記号などは表現できるものの、化学構造式のような画像情報に対しては点字だけでは対応できず、触図が用いられた。[20]

しかし触図で提示することは容易に可能だが、提示された触図の理解には例えば、触図に点字を張り込むなどの補助が必要であった。

一般に中途視覚障害者は対面朗読やスクリーンリーダによる読み上げなど、聴覚を利用した情報獲得法を用い、読み上げ音声を聴いている過程で必要に応じて補助具などを使いながら図表の説明を受けることが有効であり、聴覚から情報を獲得し、次いで関連する触覚情報を入手することはより効果的な情報獲得手段であると言える。また点字使用者でも点字と音声を併用している場合が多く、視覚障害者の中で点字使用者の割合は 10% 程度 [7] との統計もあり、もし音声教材が容易に整備できるならば、前述の化学構造式理解の問題点もかなり改善できると考える。

視覚障害者自らが化学構造式を描画すること、および、印刷物やコンピュータの画面に出力された化学構造式情報を獲得することは、視覚障害者の独力での化学構造式の「読み書き」を可能ならしめることであり、視覚障害者の学習環境や就労環境に顕著な効果をもたらすと考える。

1.3 本論文の構成

本論文は以下のように構成されている。

第2章では、筆者らが日常扱う情報を文字情報と画像情報に大別し、視覚障害者がこれらの情報を扱うことについて、現状と問題点を述べる。第3章では、視覚障害者による化学構造式を描画法について、視覚障害者に利用可能な構造式エディタとして XyMTeX 法を示し、視覚障害者がそのシステムを用いて化学構造式を描画する上での問題点について述べる。第4章では、視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの基本理論とその解説として、化学データベースの現状に触れ、視覚障害者に特化した化学構造式へのアクセスシステムの必要性について言及する。第5章では、視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの開発について詳細に述べる。最後に第6章では、本論文を総括し、今後の課題や展望について述べる。

第2章 視覚障害者の情報獲得手段の現状と課題

2.1 スクリーンリーダを用いた文字情報へのアクセス

視覚障害を持つ人たちが従来、文字情報を得る方法は誰かに読み上げてもらったり、自分が話した内容、あるいは点字で書いた文章を代筆してもらった必要があった。文字を読んだり書いたりするのではなく、聞いたり話したりする必要があり、こうした作業は時間と労力を必要とし、多くの情報獲得が難しいという問題点があった。このことから、視覚障害者はこのような観点から「情報障害者」とも言われていた。一般的に扱われる情報は視覚に訴えるものが多く、それらを認識する手段が少なかったため、さまざまな情報を入手できないためである。

しかし情報機器の発展は視覚障害を持つ人たちの情報獲得手段に著しい変化をもたらした。コンピュータなどのIT機器とスクリーンリーダと呼ばれるソフトウェアの広範な普及はそうした技術開発によるところが大きい。スクリーンリーダは「画面読み上げソフトウェア」と呼ばれ、コンピュータなどに組み込むことで、画面に表示される多くの文字情報を、TTS(Text To Speech)エンジンに伝達し、合成音声によって文字情報を音声読み上げ可能にするものである。編集済みの文章や、インターネットブラウザ、コンピュータの各種メニュー項目などを音声で確認できるので、視覚障害者はIT機器を利用した文字情報へのアクセスが簡便となった。また、文字情報は音声だけでなく、点字端末にも出力することができ、音声では聞き取りにくい文章の確認や、盲聾者の利用にも有効である。

近年、さまざまな情報をインターネットを介して入手することができ、スクリーンリーダや点字端末を利用することで、視覚障害者はこれらの情報にアクセスできる。また、用紙に印刷された文章も、OCRを行うことで、コンピュータなどで確認ができる。[21] [22] OCR(光学的文字認識)は、用紙をスキャナで画像として取り込み、画像解析によって文字認識を行うものである。OCRを行うソフトウェアも、スクリーンリーダで操作可能なものがあり、視覚障害者が人に頼らず、独力で印刷された文章を読むことも可能である。ただ、OCRの精度に関しては、英文や日本語のみの文章であれば高精度で認識可能であるが、図表や数式など、文字以外の情報が混在した文章では、精度が低下する問題がある。これらに対応するため、理系文章の読み取りに特化したOCR技術の開発が行われている。[23] このように、視覚障害者がIT機器を利用して情報の送受信を行うために必要不可欠となりつつあるスクリーンリーダに対しても、いくつかの問題点が考えられる。

一つは、日本語固有の問題として、漢字の伝達方法がある。点字は表音文字であり、原則としてひらがなとアルファベット、数字や各種記号から構成されている。カタカナや漢字は特殊な記法により表現できるが、一般的には普及していない。従って、視覚障害者の中には漢字を知らないものも多い。しかし、晴眼者と同様の文章を書くためには、漢字を利用する必要があり、視覚障害者はどの漢字が適当であるかという判別が難しい。そのため、スクリーンリーダには漢字の詳細読みという機能が設けられている。例えば、「障害」という漢字は詳細読みでは「しょうがいしゃのしょう、さわり」「そんがいのがい」などと読み上げられる。これらの漢字詳細読みを頼りにして、仮名漢字混在文章を作成できるが、どのような詳細読みを行うことで目的の漢字を想起できるか、という問題は検

討が行われている。[24]

スクリーンリーダの持つもう一つの問題は、文字情報以外の画像情報の音声読み上げが不可能という点である。インターネット上の文章には、文字以外の数表やイラスト画像のような視覚に依存する情報が多く、また GUI(graphical user interface) を多用したソフトウェアも多く存在する。画像が存在することは確認できても、その内容を読み取ることはできない。さらに、GUI ソフトウェアでは、キーボード入力でなく、マウスなどのポインティングデバイスの利用が想定されており、スクリーンリーダではこれらに対応できない。GUI ソフトウェアの利用を目的としたスクリーンリーダの検討がなされているが [25]、未だ実用化には至っていない。

以上のように、電子化することで、視覚障害者は独力で文字情報の送受信が行えるようになった。しかし、画像情報へのアクセスという大きな問題が残る。

2.2 視覚障害者の化学構造式情報獲得法の現状と問題点

2.2.1 読み上げ法による化学構造式認識

前節で述べたように、スクリーンリーダを用いることで電子化された文字情報へのアクセスは簡便なものとなった。しかし、スクリーンリーダの持つ問題点でも述べたように、図形のような画像情報へのアクセスはできない。コンピュータなどで扱われる情報は、文字だけでなく、画像情報も多いため、視覚障害者に画像情報を伝達することも重要である。

筆者が直面した化学構造式の認識においては、描画された構造式画像がスキャナでの OCR では読み上げないので、晴眼者の補助による「対面朗読」を行った。

「用紙の中央に正六角形があり、六角形の辺が交互に 2 本で表示されている。」

「正六角形の 2 時の方角に手が出ていて、アルファベットの大文字で OH と書かれている。」

「用紙の下段に化学構造が横に〇〇個並んでいる。」

このように文字化することで伝えられる構造式情報があり、これらの情報を視覚障害者が独力で獲得する方法が必要である。また、化学構造のような画像を理解するためには触図を用いる方法がしばしば使用される。触図は、提示したい文字や画像を隆起させ、触覚によって認識可能にしたものである。写真のように、色情報などを伴う微細な表現などは行えないが、比較的複雑な画像の提示が行え、ある程度の時間をかけて触察することで、視覚障害者が視覚的情報を認識することができる。[26]

触図の提示手段は二つの方法に大別される。

一つは、紙に提示する方法である。紙の上に点や線を隆起させ、触図を構成するものである。立体コピーと呼ばれる専用の用紙や機器を用いて作成することもできるし、ある程度薄い用紙であれば、ペンなどで強い筆圧で描くことで、容易に触図が作成できる。

もう一つは上述のように、点図ディスプレイを用いる方法である。表示したい画像に合わせて、ディスプレイ上の該当するピンを上下させ、ピンの凹凸で画像を構成するものである。点図ディスプレイ上のピンはプログラミングによって電氣的に制御できるので、画像の修正や、パーソナルコンピュータなどで取り込んだ画像を瞬時に提示できるなどの利点がある。しかし、点図ディスプレイが高額であることや、提示するためには専用のソフトウェアが必要であること、柔軟な提示のためにはソフトウェアを自作する必要があることなどから、触図の提示手段としては用紙に描く方法が多く用いられている。



Figure 2.2.1: 立体コピー機 piac (株) ケージーエス



Figure 2.2.2: 触覚ディスプレイ DV-2 (株) ケージーエス

2.2.2 触覚だけに依存しない化学構造式確認法の必要性

前節で述べたように、一般的な画像情報は触察が有効であるが、化学構造式のような画像については、その存在の有無を知ることがまず最優先である。

化学構造式が描かれている用紙や、コンピュータ画面上での出力については、視覚障害者はまず、その資料中の化学構造式の存在の有無を知ることから始めなければならない。化学構造式の存在を視覚障害者に伝える手段としては、旧来の対面朗読は有効であったが、朗読者側の化学の知識の点など、確立された情報として得られているとは限らなかった。

化学構造式のような画像作成における補助機器として用いる場合、触図作成の手段は、いずれも視覚を必要とする。現在、視覚障害者が晴眼者の協力を得ずに触図を作成するためのものとしては表面作図器がある。これは、鉄筆等で線を引くと軌跡が凸状となって浮き上がるセロファン状シートを使用する視覚障害者用の筆記用具である。触覚で作成途中の図形を確認しながら触図作成を進めることが可能である。表面作図器は盲学校における教育でも用いられている [27]。構造が単純で直感的操作によって使用が可能な道具であることが教育現場で用いられてきた要因の一つであると考えられる。直感的に操作できることは創造的行為を行う上で重要な要素であり [28]、この意味で表面作図器は優れた道具であるといえるが、描画システムとしては2つの改善可能性があると思われる。

1つは、一度描いた線を消去できないことである。セロファン用紙そのものが隆起するため、後で消去することはできない。図形の修正には加筆だけでなく消去機能が必要である。

もう1つは、デジタルデータへの変換作業に晴眼者の協力が必要となることである。セロファン用紙に描画された内容を、スキャナなどで取り込むことでデジタルデータへ変換することは可能かもしれないが、適切な位置にあるか、正しく読み取ることができたかなどは、視覚障害者が確認することは難しい。デジタルデータへ変換できれば、自分の文章に挿入したり、インターネット上に公開するなど、その利用用途は多岐にわたる。

本研究では、健常者と視覚障害者間の化学構造式情報の共有を目的としていて、視覚障害者が作成した化学構造式情報を健常者が認識可能であり、同時に健常者が作成した化学構造式情報を視覚障害者が認識可能でなければならない。そのためには視覚障害者にとって聴覚や触覚の利用が必要となると考え、化学構造式を認識するためまず、資料中の化学構造式の存在を聴覚でとらえ、その後に触覚による追加確認を行うというシステムが必要であると考えた。

第3章 視覚障害者による化学構造式の描画法

3.1 一般的な構造式エディタ

構造式エディタは分子構造を作図、編集するコンピュータプログラムであり、作図や化学データベースの検索式を書き表す為に、分子や化学反応の二次元（平面）表現を作成する際に使用される。構造式エディタは一般に実行プログラムに実装されたものとアプレット・サーブレットに実装されたものに大別されている。

実行プログラムに実装されたものにはシェアウェアである ChemDraw(CambridgeSoft, Windows, Mac OS で利用可能 [43]) が汎用であり、またフリーウェアとして、以下が知られている。

1. ACD/ChemSketch(ACD/Labs), [38]
2. ISIS/Draw (MDL)[39]
3. MolWorks(Beyond Computing), [40]
4. InChI [41]
5. MarvinSketch(ChemAxon) [42]
6. XyMTeX [29]

TeX/LaTeX で利用可能。テキスト形式で構造を記述する。

尚、アプレット・サーブレットに実装されたものはコンピュータの GUI に依存したシステムであり、現在までの技術では、視覚障害者には利用できない。

3.2 視覚障害者に利用可能な構造式エディタ

3.2.1 XyMTeX 法の概要

フリーウェアとして提供されている構造式エディタの内、XyMTeX 法 [29] は TeX/LaTeX で利用可能であり、テキスト形式で構造を記述する。 [29] 即ち、ユーザは汎用のテキストエディタを用いて TeX/LaTeX に準じたソースを書き、マウスなどのポインティングデバイスを利用せずに化学構造式を作成することができる。一方、MOLinsight と呼ばれるシステムも視覚障害者を対象として開発されていて、ChemAxon 社のソフトウェアを利用し、点キーボードの操作でパソコンの画面上に構造式を描画することができる。 [30]

筆者は自らが視覚障害者であるので、上述の XyMTeX 法を用いて、実際に化学構造式の描画を試みた。XyMTeX は LaTeX との併用で、文章と化学構造式の一括描画が可能な点で、MOLinsight より有利であった。ここで、XyMTeX 法を用いて、視覚障害者が独力で化学構造式の描画を行う場合、ソースを書いて XyMTeX 法を実行することは可能だが、描画された化学構造式はコンピュータ画面

上に出力されるので、視覚障害者が独力で描画結果を認識・判別することができないことが判明し、本研究では、触覚ディスプレイ (figure 2.2.2 (p 8) 参照) をコンピュータに接続し、コンピュータの画面情報を触覚ディスプレイの画面上のピンの上下移動で認識する手法を用いてコンピュータ画面に表示された XyMTeX 法を用いて出力した化学構造式の認識・判別を行うという方法を採用した。

3.2.2 XyMTeX 法を用いて作成した化学構造式とその汎用名

XyMTeX 法を用いて作成した簡単な化学構造式とその汎用名及びソースリストを付録 A (p 36) に示す。

3.3 視覚障害者が XyMTeX 法を用いて化学構造式を描画する上での問題点

前節で述べたように、視覚障害者は XyMTeX 法を用いれば化学構造式をコンピュータ画面上に描画できたが、XyMTeX/LATEX 法の出力結果は画像であってスクリーンリーダに対応していないので、描画結果の修正は視覚障害者単独では困難であった。

コンピュータに出力された結果の確認手段としては、上述のように、用紙に印刷する方法 (figure 2.2.1 参照) と、触覚ディスプレイ (figure 2.2.2 参照) などの補助機器に出力する方法がある。用紙に印刷する方法としては、汎用な立体コピー機があるが、修正するたびごとに印刷した場合の不便さや、印刷に用いる用紙のランニングコストなどの点で好ましい方法ではないと考え、本研究では、触覚ディスプレイへの出力による修正画面の確認を行った。

即ち、触覚ディスプレイの補助機器としての有効性が認識できるとともに、化学構造式画像への直接的なアクセス法としての読み上げの必要性が求められた。

第4章 視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの基本理論とその解説

4.1 化学データベースの現状

本研究で構築した基本システムについては後述するが、本章では、システムの基本的概念について検討する。

前述したように、描画された化学構造式はスクリーンリーダーで読み上げることができないので、化学構造式名を読み上げ可能な文字情報である化合物名に変換するためのシステムが必要である。化学構造式のデータベースは容量の大きい画像として取り扱うより、データ容量の少ない文字情報として取り扱うための様々な検討が行われていて、このことは画像情報にアクセスしにくい視覚障害者にとって有利な技術的変換であると考えられる。

近年、ケモインフォマティクスの発展が著しい。ケモインフォマティクスはコンピュータと情報化技術を用いて、化学領域の問題に適用する方法論であり、ケモインフォマティクスおよび化学情報の技術は医薬品化学の創薬研究過程でも利用されている。ケモインフォマティクスは化学領域と情報工学領域の融合した学際領域である。ケモインフォマティクスは化学データベースの発展によるところが大きい。化学データベースは化学情報を格納する目的で設計されたデータベースの総称であり、多くの化学データベースは反応の過程で一過性に現れる様なものではなく、安定している分子の情報を格納する。

化学構造の表現は、伝統的には、原子と化学結合を表す線分とを使用して、平面上に描かれる(2D構造)であり、この抽象化された表現は化学者向けの表現であり、この表現は計算化学や、特に検索や格納についていうならば適当な方法ではない。更に視覚障害者にとっては画像であって文字として認識することができない。

化学データベースは、そのデータ構成により化学物質データベース(化合物データベース)と化学反応データベースとに分けることができる。化学反応は「反応物の化学物質」と「生成物の化学物質」を反応条件等で関連付けたデータ構成になるため、化学反応データベースは化学物質データベースの技術を基に構築されるのが普通である。

化学構造をデジタルデータベース上に実装する方法として、大別して2つの方式が存在する。連結テーブル/接合マトリックス/リストを骨格として結合の様式(角度)や原子(節点)の属性を追加する方法(例)MDL社のMOL,PDB,CML記法等)、深度優先あるいは幅優先リスト構造を基にした文字列化表現(例)SMILES記法、SMARTS記法、SLN記法、WLN記法)

これらの基本概念に基づいて、検索可能な化学データベースを化合物名に変換する方法は、「化合物名の自動命名システム」として報告例がある。本研究で取り扱うIUPAC名は、基本的に「IUPAC有機化合物命名法ガイド」(勧告1993)に基づく。[44]

4.2 化学構造式抽出と化合物の自動命名

化学論文や特許情報、あるいはインターネット上に存在する化学構造式を検索可能なファイル形式に変換しようとする研究は上述のようなケモインフォマティクスや化学データベースの発展によって急激に進歩している。

視覚障害者のために化合物名を読み上げるためには、画像として提供された化学論文などから化学構造式部分を抽出するシステムと、化学構造式画像を検索可能な化学データベース用のファイル形式に変換するシステムという、それぞれ別々の検討が必要であり、これらを統合するシステムを構築した上に、生成した化合物名を読み上げるシステムが必要である。前節で述べたように、検索可能なファイル形式を得るための報告は数多くなされていて [31] [32] [33] [34] [35] [36] [37]、シェアウェア、フリーウェアを含めて入手可能なシステムが存在することから、本研究では次章で詳述するような、視覚障害者の使用を前提とした化学構造式抽出システムの開発について検討した。

第5章 視覚障害者のための化学構造式読み上げシステムの開発

5.1 実験用システム

5.1.1 システムの概要

本システムは、視覚障害を持つ高等教育における化学教育の受講者あるいは化学情報に興味を持つ人々を対象にしている。墨字(点字に対して、普通に書かれた文字や印刷された文字)と化学構造式を含む文章の一括読み上げを想定している。墨字と化学構造式が共存する文章を取り込み、墨字領域と化学構造式領域を識別し、それぞれを読み上げ可能なデータに変換した後に再結合した上で文章全体を読み上げるという一連の動作を行うことによって、使用者の化学情報獲得を補助する目的で使用される。本稿で取り扱うシステムは、墨字と化学構造式が混在する文章と、それを取り込んで読み上げるためのソフトウェアからなる。

使用者は、墨字と化学構造式が混在する文章画像データをソフトウェアに入力し、ソフトウェアが、入力された画像を処理し、読み上げ音声として出力する。処理の概要は以下の通りである。まず、入力された画像から化学構造式領域と墨字領域を抽出する(化学構造式領域の抽出方法は3節に詳述する)。抽出された化学構造式領域は ChemAxon 社の marvinbeans を用いて name ファイルに変換して化合物名を得る。抽出された墨字領域は Microsoft 社の Microsoft Office document imaging(MODI) で認識する。墨字領域の OCR 結果および化学構造式領域の name ファイルはそれぞれスクリーンリーダーに渡して結合し、音声化して使用者に伝達する。フローの全体図を Figure 5.1.1(p 15) に示す。

尚、構築したソフトウェアは上述の一連の操作におけるインターフェイスの役割を果たし、スクリーンリーダーによって操作が可能である。本研究ではスクリーンリーダーとして、(株)高知システム開発の PC-Talker7 Version3.10 を用いた。

筆者は本研究において構築した、化合物名を本文と一緒に読み上げるシステムを”Chemical Literature Extraction and Aloud-reading System”とし、以下、CLeArS と略記する。

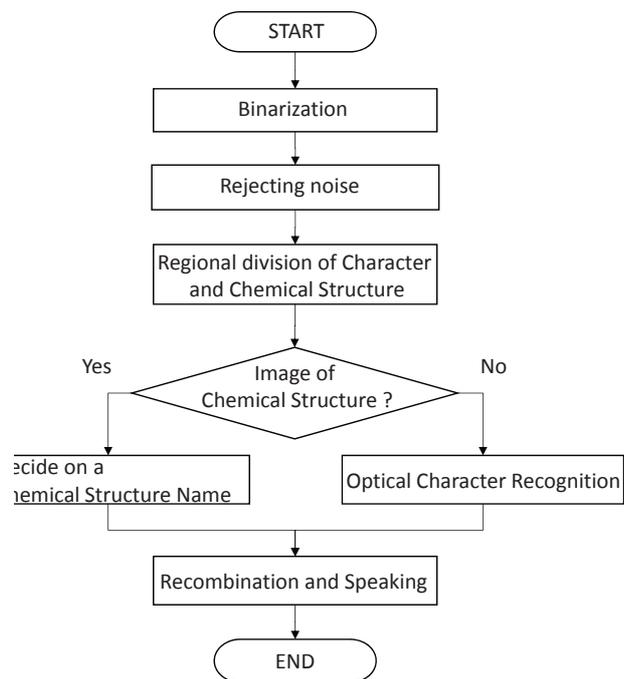


Figure 5.1.1: Flowchart of system.

5.1.2 CLeArS の基本概念

CLeArS は高等教育を受けている学生を含めた化学の学習に興味を持っている視覚障害者を対象とするシステムである。新たに構築した音声読み上げシステムは化学構造式画像のコンピュータによる検索可能なファイルへの変換システムと描かれている化合物名の命名システムを統合している。

文字と描画された構造式を含む印刷物を画像として取り込むと、CLeArS は文字と化合物名をスクリーンリーダーで読み上げる。CLeArS を使えば、ユーザーは化合物名を聞くことにより文書全体の理解を促進することができる。

5.1.3 CLeArS の機能

CLeArS は構造式を認識するシステムと文字と化学構造式を読み上げるシステムから成っている。更に視覚障害者の利用を想定して、CLeArS は全ての操作がスクリーンリーダー上でショートカットキーを用いて行えるように設計されている。従って、上下矢印キーを使い、関連したイメージファイルを選んだ後に、認識結果の関連したイメージファイルを Text toSpeech のエンジンに転送することによって、文字と化学構造式名を読み上げるものである。

資料を読み上げている最中に、CLeArS は、その語句に続いている部分がテキストあるいは構造式であるかの理解を補助するために、「テキスト」と「構造式」と言う語句を付け加えて読み上げる。

次節で詳述する抽出方法により、抽出した画像内の文字部分から取り出したテキストと化学構造式部分は、Microsoft OCR エンジン、および ChemAxon Marvinbeans (Molconvert) にそれぞれ送られる。かくして文字と化合物名を読み上げることができる。

5.2 資料からの化学構造式抽出実験

まず、前処理として、入力画像に対して2値化処理を行う。この際、閾値に関しては大津の手法 [45] を用いて決定する。2値化処理の際のノイズを取り除くために、メディアンフィルタ [46] を用いてノイズ除去を行った後、化学構造式が存在する領域と文章が存在する領域に分割する。

CLeArS において使われたイメージデータはビットマップイメージのピクセルグループである bmp ファイルである。

一つ目の密度の計算方法は、各行における対象ピクセル数を基に「密度が高い、または、低い」を決定する。「密度が高い」行は、文章が行全体に位置していると考え、文章が存在する行と認識する。逆に、「密度が低い」行は、その行全体で対象ピクセルが少ないと考え、化学構造式が存在する行と認識する。従って、認識しようとするピクセルの密度を用いれば、文字および化学構造式エリアが取り出されうる。ここでは2通りの密度を用いて測定した。1つめは行方向の密度を用いた。これは文字と化学構造式の水平方向の密度を測定している。この方法では垂直のエリアが考慮されないため、一定のイメージにおいて、文字および化学構造式のうちのいくつかは誤解される可能性がある。2番目の密度は、与えられた「エリア」と定義されて、文字および化学構造式領域は、認識しようとするピクセルの垂直の継続的なラインを結合することによって識別される。従って、これらの密度は「エリア」のサイズあたりの認識しようとするピクセルの数と定義されて、抽出は2つの密度を使って行われる。

行方向のピクセル数の計算結果は高いか低いかを示す。Figure 5.2.1 (p 18) における行方向のピク

セルの密度のヒストグラム (C) は画像データ中の行方向のピクセル数を示している。このヒストグラム中で認識すべきピクセルを含まない行を除去した後、文字部分と構造式部分を文字あるいは構造式を含む行方向から抽出する。閾値は大津の方法によって決定する。化学構造式が存在する行においてピクセル数が多い行が存在する場合や、文章が存在する行にピクセル数が少ない行が存在する場合がある。これらの場合は誤認識する可能性があるため、除去する必要がある。

2番目の密度はエリアのサイズにより分割されたオブジェクトピクセルの数として求められる。Figure 5.2.2 (p 19) の棒グラフは横軸を密度、縦軸をエリアの数としていて、2番目の密度の例値を示している。このヒストグラムからピクセルが存在しない行を除去した後、化学構造式領域と文字領域は化学構造式データおよび文字領域だけを含んでいる行に基づいて2値化を使って取り出される。閾値は1番目の密度測定と同様に、大津の方法を用いる。

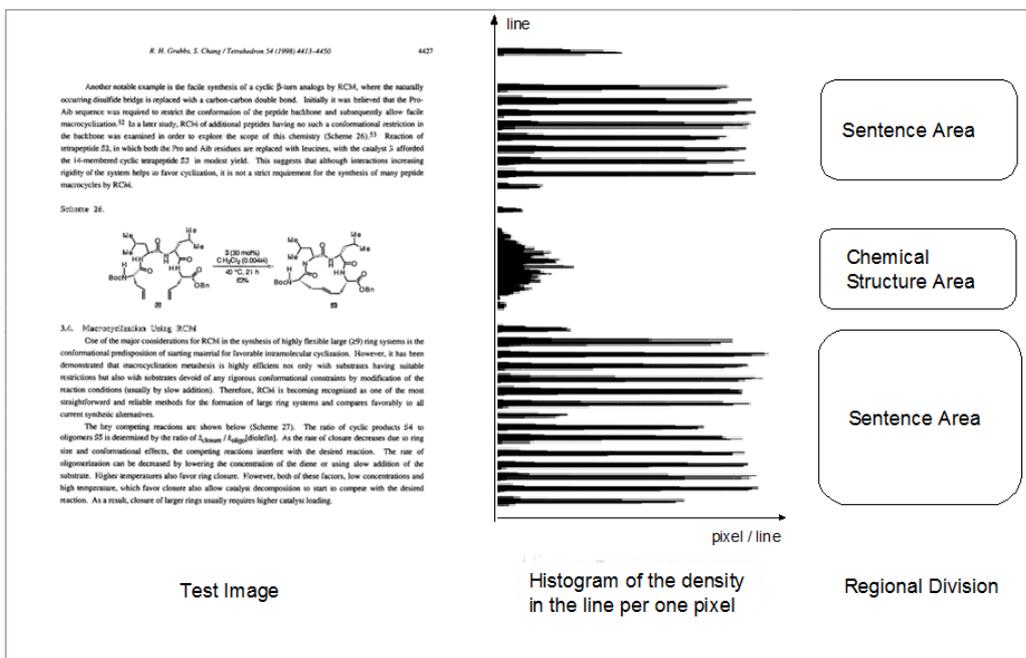
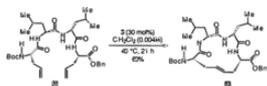


Figure 5.2.1: Histogram of the density of pixels per line.

Another notable example is the facile synthesis of a cyclic β -turn analog by RCM, where the naturally occurring disulfide bridge is replaced with a carbon-carbon double bond. Initially it was believed that the Pro-Ala sequence was required to restrict the conformation of the peptide backbone and subsequently allow facile macrocyclization.⁵² In a later study, RCM of additional peptides having no such a conformational restriction in the backbone was examined in order to explore the scope of this chemistry (Scheme 26).⁵³ Reaction of intrapeptide 22, in which both the Pro and Ala residues are replaced with leucines, with the catalyst 5 afforded the 14-membered cyclic nonapeptide 23 in modest yield. This suggests that although interactions increasing rigidity of the system helps to favor cyclization, it is not a strict requirement for the synthesis of many peptide macrocycles by RCM.

Scheme 26.



3.6. Macrocyclization Using RCM

One of the major considerations for RCM in the synthesis of highly flexible large (20) ring systems is the conformational predisposition of starting material for favorable intramolecular cyclization. However, it has been demonstrated that macrocyclization metathesis is highly efficient not only with substrates having suitable restrictions but also with substrates devoid of any rigorous conformational constraints by modification of the reaction conditions (usually by slow addition). Therefore, RCM is becoming recognized as one of the most straightforward and reliable methods for the formation of large ring systems and compares favorably to all current synthetic alternatives.

The key competing reactions are shown below (Scheme 27). The ratio of cyclic products 54 to oligomers 55 is determined by the ratio of $k_{\text{cycl}}/k_{\text{oligo}}$ (Scheme 27). As the rate of closure decreases due to ring size and conformational effects, the competing reactions interfere with the desired reaction. The rate of oligomerization can be decreased by lowering the concentration of the diene or using slow addition of the substrate. Higher temperatures also favor ring closure. However, both of these factors, low concentrations and high temperatures, which favor closure also allow catalyst decomposition to start to compete with the desired reaction. As a result, closure of larger rings usually requires higher catalyst loading.

Test Image

Histogram of the density
in the defined area

Sentence Area

Chemical
Structure Area

Sentence Area

Regional Division

Figure 5.2.2: Histogram of the density of pixels in defined areas.

5.3 抽出した画像を用いた実験

前述したように、本研究では認識対象として、インターネット上で広く普及しているデジタル書籍などのPDFデータや、画像データ（j p g）を用いた。以下では、すべての画像をj p gに変換し、その画像ファイルを2章で述べたソフトウェアを用いて認識する実験を行った。このj p g画像には、文字と化学構造式のみを印字し、その他の図表や写真のようなグラフィカル情報は印字しなかった。

行った実験は2段階に分け、第1段階は文字領域と化学構造式領域の分離が正しく行えたかという「領域分離」に関する実験であった。次に、正しく分離できた画像について、第2段階として、分離した化学構造式が、正しい構造式名を返すかという「構造式名の認識」に関するものであった。さらに、化学構造式名の認識では、原子のフォントスタイルを変更した環境での実験も行った。これは、ユーザーのコンピュータに作成者が用いたフォントがインストールされておらず、ユーザのコンピュータに依存するフォントで化学構造式が表現された場合を想定しており、インターネットを介した電子データのやり取りではしばしば想定される問題であると考えたためである。

以下、実験の詳細を述べる。

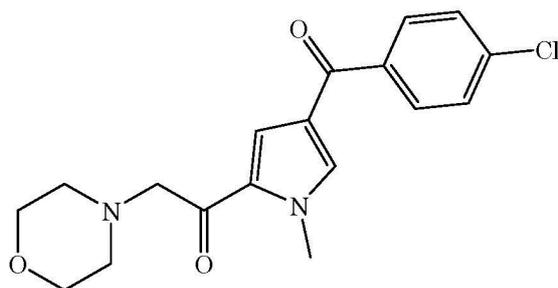
5.3.1 実験で用いた画像

本実験では、2グループの化学構造式画像を用いた。一方のグループは、CLiDE validation set [47] (以下 CLiDE と表記) が提供する化学構造式画像データ 399 枚であり、もう1グループは、高校化学の教科書 [48] (以下教科書画像と表記) から抜き出した 51 枚の化学構造式図である。これら2グループは、構造式の「複雑さ」の点で異なっていた。前者は化学論文や特許などに掲載されていたために複雑な構造であり、後者は高校化学で学習する構造式のため比較的単純な構造であった。入手した化学構造式画像の中には、化学構造式以外のイラストなどが混入していたり、鮮明な画像ではないものもあった。それらは、本実験に先立ち、化学構造式エディタ「CS ChemDraw」で成形した。本実験では、文字と化学構造式の分離のみを目的としたため、文字・化学構造式以外の情報は扱わないものとした。

Figure 5.3.1 (p 21) のように化学構造式画像の作成後、画像の上下に文字列を記入し、1枚の画像データを作成した。

有機化合物の表し方

分子式は分子をつくっている元素の種類と数を表した式。示性式は分子式の中から官能基を抜き出して明示した式。構造式は分子中の個々の原子の結合の仕方を価標を用いて明示した式。



分子式が同じで性質が異なる化合物を、互いに異性体という。構造異性体は分子式が同じで構造式が異なる異性体。立体異性体は原子のつながり方や結合の種類は同じであるが分子の立体構造が異なる異性体。幾何異性体（シス-トランス異性体）と光学異性体がある。幾何異性体は二重結合をはさんで、同種の原子や原子団が同じ側にあるものをシス型、反対側にあるものをトランス型という。この両者は、二重結合の部分で自由回転ができないために生じる異性体である。

以上

Figure 5.3.1: Sample of the test image from CLiDE.

p 21 の画像が以下の実験で用いる画像データであり、上下の文字列はいずれのグループ、すべての画像で同じものを用いた。また各実験画像の解像度のうち、水平方向の解像度は1260ピクセルで統一したが、垂直方向については、基にした化学構造式画像の解像度が異なっていたため、実験画像では統一していない。

5.3.2 抽出画像を用いた実験

第1段階として、文字・化学構造式領域が適切に分離できたかという点を明らかにするための実験を行った。CLiDE 画像 399 枚、教科書画像 51 枚の計 450 枚を、構築したソフトウェアを用い、文字領域と化学構造式領域に分離できた割合を調べた。ここでの「分離できた」とは、正しい構造式名を与えたか否かは考慮していない。実験の結果、450 枚中 405 枚 (90.0%) の実験画像が分離に成功した。個別にみると、CLiDE 画像では 399 枚中 356 枚 (89.2%) 教科書画像では 51 枚中 49 枚の画像 (96.1%) が分離に成功した。これらの結果を Table 5.3.2.1 (p 22) に示す。

Table 5.3.2.1: Correct extraction rates

Image sets	Number of samples	Number of correct extractions	Yield (%)
CLiDE	399	356	89.2
Text book	51	49	96.1

5.3.3 フォントによる抽出実験結果の比較

異なったフォントでの認識を想定して、CLiDE 画像では ChemDraw のフォント (**Century**) をそのまま採用し、教科書画像では、Windows 標準のフォント (**Arial**) を採用して化学構造式を作成した。それぞれのフォント環境で、分離後の化学構造式が正しい構造式名を返すかを検討した。なお、基の実験画像の化学構造式単体画像を Molconvert に渡して得られた構造式名の文字列が、分離後の化学構造式画像を Molconvert に渡して得られた構造式名の文字列と完全に一致した場合に、構造式名の認識に成功したと定義した。

1. 同じフォントを用いた画像での実験

CLiDE 画像で分離に成功した 356 枚の画像のうち、化合物名の認識に成功した画像は 172 枚 (48.31%) であった。また、誤認識した構造式名の検討を行うため、各化学構造式画像から Molconvert が認識した元素の種類と総数を求めたものが以下の Table 5.3.3.1 (p 23) である。Table 5.3.3.1 中の true は化学構造式単体画像から mol ファイルを生成した場合、result は分離後の化学構造式画像から mol ファイルを生成した場合をそれぞれ示す。

2. 異なるフォントを持った画像を用いた実験

教科書画像を用いて、CLiDE 画像と同様の手順で実験を行った。その結果、教科書画像で分離に成功した 49 枚の画像のうち、29 枚 (59.18%) の画像が化合物名認識に成功した。元素の種類や元素数をまとめたものを以下の Table 5.3.3.2 (p 23) に示す。Table 5.3.3.2 中の true は化学構造式単体画像から mol ファイルを生成した場合、result は分離後の化学構造式画像から mol ファイルを生成した場合をそれぞれ示す。

Table 5.3.3.1: Comparison in CLiDE of the number of elements in the true and result images.

Elements	true	result	difference
H	4	245	+241
B	0	2	+2
C	4886	4794	-92
N	619	530	-89
O	643	493	-150
F	81	27	-54
Na	2	0	-2
P	2	2	0
S	65	60	-5
Cl	70	74	+4
Co	0	2	+2
Se	1	0	-1
Br	22	4	-18
I	8	0	-8
Hf	0	10	+10
Tl	0	2	+2
U	0	7	+7

Table 5.3.3.2: Comparison in textbook of the number of elements in the true and result.

Elements	true	result	difference
H	124	82	-42
C	144	180	+36
N	4	4	0
O	49	48	-1
Cl	2	2	0

5.4 考察

視覚に障害を持つ人々の化学に関する学習環境の改善を目的として、画像中に存在する化学構造式の音声で読み上げ可能なソフトウェアを構築した。特に本章では、論文や特許文献など、インターネット上で電子媒体として配布される形式に注目した。本文中には文字と化学構造式が含まれ、文字は従来法で音声読み上げ可能であったが、構造式の認識は触図が用いられてきた。第1の検討では、文字と構造式の分離を行った。本章で詳述する内容は、行と面積単位での密度に注目し、それらを総合的に用いることで分離の制度向上を試みた。その結果、教科書画像では96%、CLiDE画像では89%と、いずれも高い分離成功率が得られた。分離に失敗した画像を見ると、化学構造式画像の一部が切れて分離されていたもの 5.4.1 (p25)、ひとつの化学構造式が2つに分けて分離したもの 5.4.2 (p 25)、化学構造式を検出できないものの3通りが確認された。CLiDE画像での認識率低下は、構造が複雑なため、各結合間が離れて認識されたり、結合の一部が認識できなかったことが原因と考えられる。分離については、合計450枚の実験画像に対して90%の成功率が得られたので、本手法の有効性を確認した。

次に、分離した化学構造式の命名について、正しく認識できた認識率を求めると、教科書画像、CLiDE画像いずれも50%程度であった。認識失敗の原因を、Molconvertから得られたmolファイルが認識した元素の種類や元素数から考察を試みた。構造式単体でmolファイルを生成した場合と、実験後の分割して得た画像から生成したmolファイルで、各元素ごとに元素数の比較を行い、元素数が一致した画像を数えた。その結果を、Figure ?? (p 25) および Figure ?? (p 26) のグラフに示す。

図より、教科書画像ではN、O、Cl、CLiDE画像に関してはBやF、Na等で、非常に高い確率で、元素数が一致していることが分かる。特に、CLiDEの方では分母の画像数が多いのにもかかわらず、BやNa、P等でほぼ完全に元素数が一致するという結果となった。このことから、正答率の高い元素では、問題のある可能性が低いと仮定し、正答率の低かったHやC、N、Oに関して着目した。それぞれの元素に対して、実験前後での元素の増減数を求め、それらを比較すると、Hの増加数とOの減少数が等しい画像がいくつかあった。同様に、Hの増加数とNの減少数が等しい画像もいくつかあり、それぞれ、OをH、NをHと誤認識したことを確認した。OとHに関しては、フォントの都合上、Oの左右の端が太く、中心周辺が細くなっている。これにより、Oの左右の端をHの縦線と誤認してしまったためであると考察できる。NとHに関しては、文字の形状が似ており、左右の縦線をつなぐ線分が斜めか水平かどうかで認識が変わってしまうため、その部分が認識に影響を与えてしまったと考えられる。

化学構造式が正しく抽出されなかった画像の一例をFigure 5.4.3 (p 26) に示す。この画像では、ピリジン環の結合の一つが誤認識のために欠落している。一方ではベンゼンとピリジンに結合しているアミノ基のNがHと誤認識されていた。

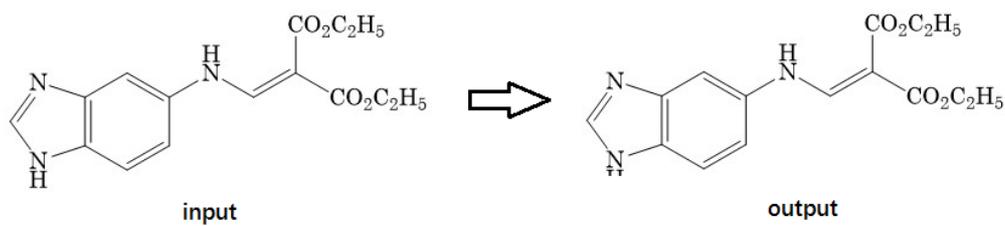


Figure 5.4.1: Partial image.

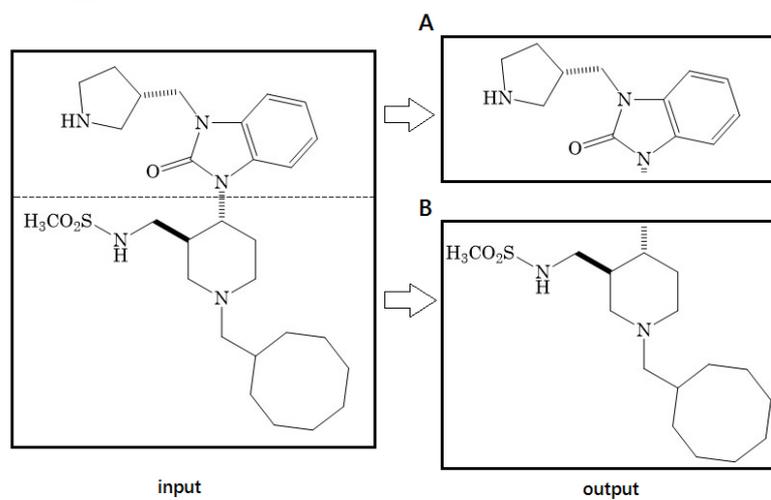


Figure 5.4.2: Image that is divided into several parts.

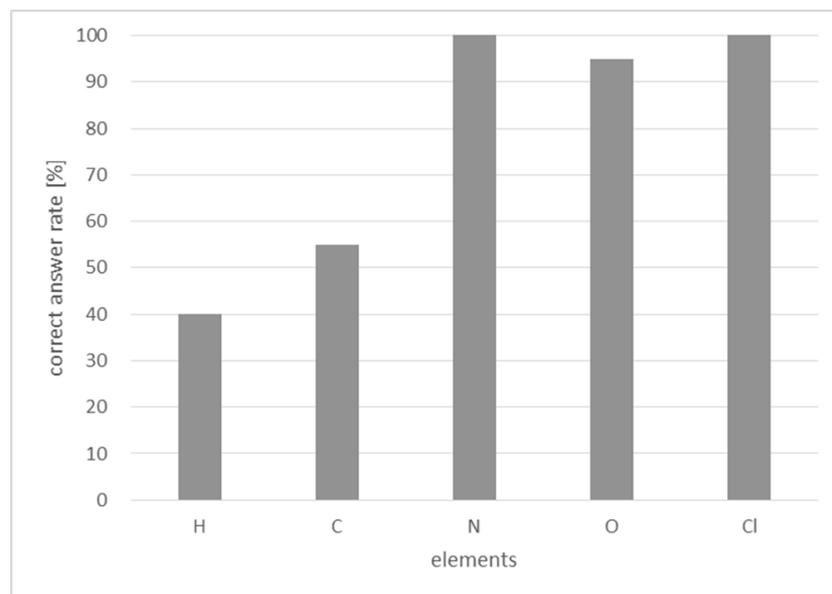


Figure 5.4.3: Correct answer rates for CLiDE.
(Elements with low correct answer rates are H, C, N, and O.)

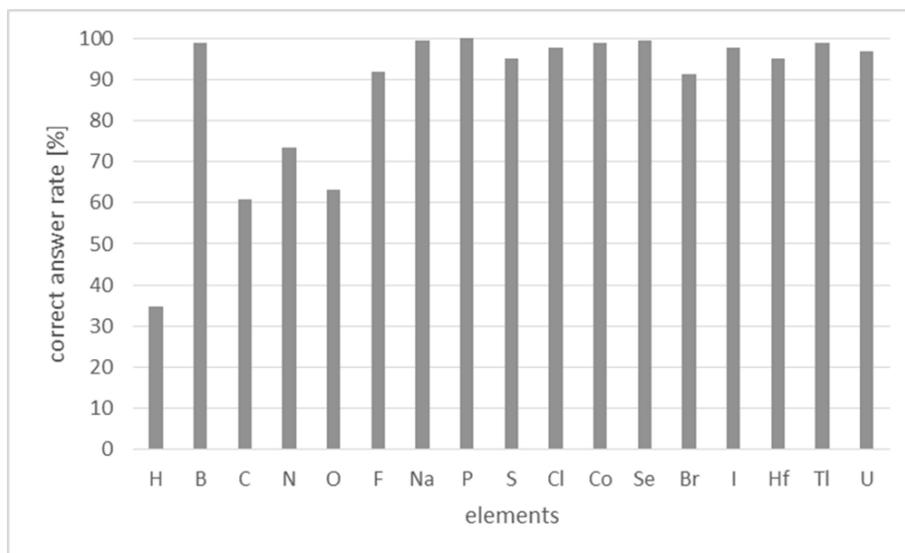


Figure 5.4.4: Correct answer rates for textbook dataset.
 (Elements with low correct answer rates are H and C.)

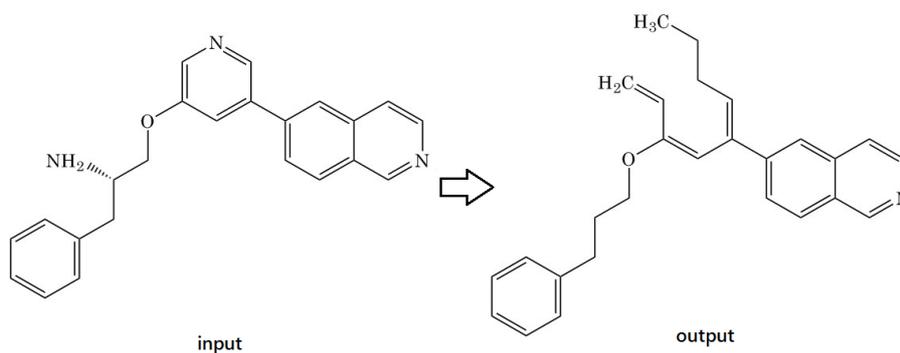


Figure 5.4.3: Incorrectly extracted image.

構築したソフトウェアを3名の視覚障害者（30代、40代、60代、うち2名が共同研究者）に使用してもらい、自由に意見を求めた。即座に化合物名が認識できることや、触図に依存せず聴覚のみで情報を獲得できる手軽さなどが評価された一方、音声エンジンへの問題、特に聞き取りに関する問題や、構造式の持つ視覚的情報も得たいという要望があった。今回意見を求めた視覚障害者は、いずれも音声読み上げを常用しており、また2名は触図の経験も豊富であった。そのため、聞き取りに関するものや触図の利用が挙げられたが、教育現場での対応、すなわち中学・高校段階の視覚障害学生は、上記2名とは違い、音声読み上げや触図の経験が少ないことも想定できる。今回の3名からも、化合物名の読み上げについては、聞き取りは可能であると全員が述べていることから、音声などの問題は残るものの、本研究の目指す「化学構造式の音声読み上げ」という点において、その有効性を確認できたと考えている。

今後本研究を進めるに当たっては、分離や構造式名の認識制度の向上はもちろんのこと、聞き取りに関する問題、構造式が本来持つ視覚的な情報の伝達手段についても検討の必要がある。このうち、聞き取りについては、使用する音声読み上げエンジンの声質の検討、速度の検討、読み上げ方法などを具体的に検討していく。また、視覚的情報については、触図との併用を考えたり、構造情報を音声化する手段なども検討していく。さらに、本研究では、対象の画像に文字と化学構造式しかないものを想定したが、実際にはその他にも数式や表、写真などの情報も多く含まれ、これらの分離に関しても取り組んでいく必要がある。このように多くの問題はあっても、筆者らが目的とする、触覚に依存せず聴覚＝音声読み上げで容易に化学構造式を含む文章にアクセスする手段の構築の第1歩を確認できたと考えている。

第6章 結論

視覚障害を持った学生に対する化学教育の支援技術として、筆者らは触覚に依存せず、聴覚だけに依存する CClearS というシステムを構築した。CClearS は化学構造式を含むドキュメント中の化学構造式を抽出して、その化合物名を IUPAC に準拠した命名法で読み上げる。これらの結果から、それぞれのグループにおいて約 90% の抽出結果が得られた。抽出率を向上させるためには垂直方向の密度の検討が必要であった。化合物命名については同じフォントを用いた場合と異なったフォントを用いた画像で実験した。同じフォントを用いた場合は 56% の結果が得られ、異なったフォントを用いた場合は 48% に減少した。C と H の認識において正解率が低下した理由は C と H が正しく認識されていない上に、有機化合物の表記ではしばしば C と H が省略されることがあることも理由に挙げられる。

本研究で構築したシステムはプロトタイプであり、既に 3 名の視覚障害者を含む 8 名に提供されている。3 名の視覚障害者 (30 代、40 代、60 代、内 2 名は共同研究者) による評価は化合物名が即座に認識できることをあげていて、触覚に依存せずに、聴覚だけで理解する方法であることを示唆した。今後、追加の評価データを収集したシステムの改良が必要である。

また今後、データベースの利用がより重要となることから、数種類の画像の読み上げが可能となれば、専門的なウェブサイトの情報も利用できる可能性が広がり、本研究の拡張可能性が増し、視覚障害者の学習環境や就労環境の改善に資するものと考えられる。

一方、第 3 章 (p 10) で詳述したように、視覚障害者が独力で利用できる化学構造式描画法もあり、このことは視覚障害者と健常者間での化学情報交換が可能であることを示唆している。「Minority in CHEMISTRY」が減少する社会を祈念する。

終わりに、毎日新聞、2009 年 10 月 16 日、東京朝刊には、視覚障害による社会損失は 8 兆円超と日本眼科医会が試算したとの記事がある。

「国内の視覚障害者数は約 164 万人にのぼり、視覚障害により、生産性や QOL (生活の質) の低下などでもたらされる社会損失額は約 8 兆 8000 億円になるとの試算を、日本眼科医会などがまとめた 20 年後には 25% 増の 200 万人に達し、大幅な社会負担が増える見通しで、眼疾患の早期の予防や治療が必要だとしている。

同会などの調査では、QOL の低下をはじめとする視覚障害による負担を医学経済学的に分析し、性質別に三つのコストに分類した。その結果、実際に医療費としてかかる直接経済を約 1 兆 3400 億円▽視覚障害による生産性の低下や社会によるなど間接経済を約 1 兆 5800 億円▽視覚障害による QOL の低下に伴う個人負担などを示す疾病負担を約 5 兆 8600 億円と試算した。

また、公的資料などを基に視覚障害者数を米国の基準を使って算出したところ、矯正視力が 0.1 以下とされる失明者は約 18 万 8000 人、同 0.5 未満で失明者ではないロービジョンの人は約 144 万 8000 人いることがわかった。また、視覚障害者は、70 歳以上で半数を占め、60 歳以上の人の 72% に達し、全年代において女性よりも男性の有病率が高かったとしている。

同会では、眼疾患の予防や治療を早期から行うことなどで、視覚障害者を減らすことができれば、社会損失額も減少させられるとしている。

このような視覚に何らかの障害を持つ人々の増加傾向は、国内外を問わず当てはまると考えられる。

したがって、このような人々に対する情報保障、特に言語による表現が難しい画像情報の送受信に関しては、今後のさらなる発展が求められるであろう。

第7章 業績一覽

Article Title

Creating an Adaptive Technology Using a Cheminformatics System To Read Aloud Chemical Compound Names for People with Visual Disabilities.

Author(s): Kamijo, Haruo; Morii, Shingo; Yamaguchi, Wataru; Toyooka, Naoki; Tada-Umezaki, Masahito; Hirobayashi, Shigeki

Journal OF Chemical Education, 2016, 93 (3), pp 496-503.

第8章 謝辞

本論文の執筆に当たり、富山大学豊岡尚樹教授、廣林茂樹教授、阿部肇准教授には、実験企画段階から、実験の組み立て方や解析手法、論文作成など、多岐にわたってご指導を頂いた。また富山大学 津田正明名誉教授、梅寄(多田)雅人准教授、元特認助教 伊藤聡知氏、ソニー□ 鈴木淳也博士、インテック(株)守井清吾博士、富山大学工学部知能情報工学科廣林研究室 長谷川昌也氏、細谷文孝氏、山口航氏には熱心なご議論をいただいた。また富山大学工学部知能情報工学科の廣林研究室の皆様には貴重な時間を割いてご協力頂いた。著者の上條は平成25年度～平成27年度日本学術振興会科学研究費助成事業(挑戦的萌芽研究、課題名:視覚障害者自らが化学構造式を理解するために必要なソフトウェアの開発に関する研究、課題番号:25590293)を受けている。著者の上條は、College Women's Association of Japan(CWAJ)2013年度視覚障害学生奨学金奨学生を受けている。以上、記すとともに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Satoh, H.; Nukada, T.; Akahane, K.; Sato, M. Construction of Basic Haptic Systems for Feeling the Intermolecular Force in Molecular Models. *J. Comp. Ai. Chem.*2006, (7), 38-47.
- [2] Kumar, N. Computer assisted drug design and molecular modeling: a review. *Pharma Science Monitor.*2014, 5(1), 78-93.
- [3] Matsuoka, N.T.; Motoki, I.; Takahiro, A.; Eiji, Y.; Nobuki, I.; Takashi U.; Yoshiyuki, Y.; Kenichi, I.; Kohichi. Computer Simulation of Deformation Behavior of Non-metallic Inclusion in Hot-rolling. *Procedia Engineering.*2014, 81, 120-125.
- [4] Shoji, M.; Shoji, M. Development of a New Molecular Visualization Package : Makiko . *J. Comput. Chem. Jpn.*2009, 8(3), 113-118.
- [5] Abe, H.; Nagashima, U. On the Development of Molecula Numerica: A Real-Time Visual Molecular Dynamics Simulator. *J. Comput. Chem. Jpn.*2009, 8(1), 51-58.
- [6] Supalo C. A. and Kennedy S. H. Using Commercially Available Techniques To Make Organic Chemistry Representations Tactile and More Accessible to Students with Blindness or Low Vision. *J. Chem. Edu.*2014 91 (10), 1745-1747
- [7] Supalo C. A.; Isaacson M. D. and Lombardi. M. V. Making Hands-On Science Learning Accessible for Students Who Are Blind or Have Low Vision *J. Chem. Edu.*2014 91 (2), 195-199
- [8] Pereira F.; Ponte-e-Sousa J. C.; Fartaria R. P. S. ; Bonifacio V. D. B.; Mata P.; Aires-de-Sousa J. and Lobo A. M. Sonified Infrared Spectra and Their Interpretation by Blind and Visually Impaired Students. *J. Chem. Edu.*2013 90 (8), 1028-1031
- [9] Graybill C. M.; Supalo C. A. Mallouk T. E. Amorosi C. and Rankel L. Low-Cost Laboratory Adaptations for Prcollege Students Who Are Blind or Visually Impaired. *J. Chem. Edu.*2008 85 (2), 243-247
- [10] Supalo C. Techniques To Enhance Instructors' Teaching Effectiveness with Chimistry Students Who Are Blind or Visually Impaired. *J. Chem. Edu.*2005 82 (10), 1513-1518
- [11] Supalo C. A.; Mallouk T. E.; Amorosi C.; Lanouette J.; Wohlers H. D. and McEnnis K. Using Adaptive Tools and Techniques To Teach a Class of Students Who Are Blind or Low-Vision. *J. Chem. Edu.*2009 86 (5), 587-591
- [12] 日本学生支援機構の平成 20～22 年度障害のある生徒の進学促進・支援のための高大連携の在り方に関する調査研究委託事業報告書及び各大学の調査研究成果
http://www.jasso.go.jp/tokubetsu_shien/koudairenkei/. (accessed Aug 20 2014).

- [13] 平成 21 年度 文部科学省「学校基本調査」,
http://www.mext.go.jp/b_menu/toukei/chousa01/kihon/1267995.htm. (accessed Aug 20 2014).m
- [14] 平成 16 年度 文部科学省調査「通常の学級に在籍する特別な教育的支援を必要とする児童, 生徒に関する全国実態調査」,
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shotou/018/toushin/030301i.htm. (accessed Aug 20 2014).
- [15] 鈴木悠司, 竹内義則, 松本哲也, 工藤博章, 山村毅, 大西昇, 映像情報メディア学会誌 Vol.58, No.12, pp. 1800~1807 (2004)
- [16] 山口雄仁, 川根深, 澤崎陽彦, 日本数学教育学会誌 78(9) 239-247 1996
- [17] science accessibility net,
<http://www.sciaccess.net/en/index.html>. (ACCESSed May 19 2015)
- [18] 保立香織, 山野和恵, 佐藤浩史, 原俊介, 大武信之, 電子情報通信学会技術研究報告 ET, 教育工学 97(464), 17-24(1997)
- [19] 点字理科記号解説 (暫定改訂版):日本点字委員会, 2001 年 8 月 31 日発行
- [20] 守井清吾, 石井雅博, 鈴木淳也, 川原茂敬, 広林茂樹, 点図ディスプレイを用いた触図作成システムにおけるペン・指先入力の比較, 映像情報メディア学会誌, Vol.67, No.12, pp.J448-J454
- [21] 渡辺哲也, 指田忠司, 長岡英司, 岡田伸一: 視覚障害者のインターネット利用状況とその課題 - ユーザ調査と PDF 文書のアクセシビリティ -, ヒューマンインタフェース学会論文誌, Vol.6, No.1, pp.139146, (March 2004)
- [22] 視覚障害者用の機器・ソフトの研究・開発/マニュアル/ 研究報告/ 調査報告 (2008.9)
<http://www.nise.go.jp/research/kogaku/twatanab/PCUserSurvey/PCUserSurveyJp.html>. (ACCESSed Aug 20 2014)
- [23] M.Suzuki, T.Kanahori, N.Ohtake, K.Yamaguchi, An Integrated OCR Software for mathematical Documents and Its Output with Accessibility, Computers Helping people with Special Needs, 9th International Conference ICCHP2004, Paris, July 2004, Lecture Notes in Computer Sciences 3119, Springer (2004pp.648-655)
- [24] 渡辺哲也, 渡辺文治, 藤沼輝好, 大杉成喜, 澤田真弓, 鎌田一雄, スクリーンリーダの詳細読みの理解に影響する要因の検討: 構成の分類と児童を対象とした漢字想起実験, 電子情報通信学会論文誌, D-I, 情報・システム, I-情報処理 J88-D-I(4), 891-899, 2005
- [25] 渡辺哲也, 岡田伸一, 伊福部達, GUI に対応した視覚障害者用スクリーンリーダの設計, 電子情報通信学会論文誌. D-II, 情報・システム, II-情報処理 J81-D-2(1),137-145, 1998
- [26] 池宗佐知子, 谷津忠志, 一幡良利, 全盲学生に触図教材を用いた微生物学教育に関する研究, 筑波技術大学テクノレポート 17(2), 30-33, 2010

- [27] 東京教育大学附属盲学校, 本校における養護・訓練=その歩みと方向に, 養護・訓練公開授業資料, (1975)
- [28] Yamamoto, Y., and Nakakoji, K., Interaction Design of Tools for Fostering Creativity in the Early Stages of Information Design, *International Journal of Human-Computer Studies*, Vol. 63, No. 4-5, pp. 513-535, (2005)
- [29] Fujita, S. XyMTeX.
<http://homepage3.nifty.com/XyMTeX/index.html#EnglishV> (accessed Mar 08 2014).
- [30] MOLinsight - A web portal for the processing of molecular structures by blind students.
<http://www.MOLinsight.net/> (accessed April 07 2014).
- [31] McDaniel, J.R.; Balmuth, Kekule: OCR-optical chemical (structure) recognition. J.R. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*1992, 32(4), 373-378.
- [32] Valko, A.T.; Johnson, A.P. J. CLiDE Pro: The Latest Generation of CLiDE, a Tool for Optical Chemical Structure Recognition . *Chem. Inform. Model.*2009, 49(4), 780-787.
- [33] Filippov, I.V.; Nicklaus, M.C. J. Optical Structure Recognition Software to Recover Chemical Information: OSRA, an Open Source Solution. *Chem. Inform. Model.*2009, 49(3), 740-743.
- [34] Southan, C.; Stracz, A. SOFTWARE Open Access Extracting and connecting chemical structures from text sources using chemicalize.org. *J. Cheminformatics.*2013, 5, 20-28.
- [35] Chemistry 4-D Draw, version 8.0.
<http://www.ddmcorp.com/goods/struct/4ddraw.html> (accessed Jul 29 2014).
- [36] Optical Structure Recognition (OSRA) version 1.40,
<http://cactus.nci.nih.gov/osra/> (accessed Aug 24 2014).
- [37] Cannon, E.O. New Benchmark for Chemical Nomenclature Software. *J. Chem. Inform. Model.*2012, 52(5), 1124-1131.
- [38] ACD ChemSketch.
<http://www.acdlabs.com/download/> (accessed Nov 15 2014).
- [39] ISIS/Draw MDL Information Systems Inc. (USA) ,
<http://acd-labs-software-c-program-files-mdl-isis-draw-2-5-acd.updatestar.com/ja>. (accessed May 15 2015).
- [40] molworks(beyond-computing.com).
http://www.molworks.com/home_en.html. (accessed Aug 15 2014).
- [41] InChI IUPAC InChI Trust Licence.
<http://www.iupac.org/home/publications/e-resources/inchi.html>. (accessed Aug 15 2014).

- [42] ChemAxon, Marvinbeans (Molconvert). Molecule File Converter, version 5.10.1, (C) 1999-2012 ChemAxon Ltd.
<http://ChemAxon.com/> (accessed Nov 23 2014).
- [43] ChemBioDraw, version 13.
<http://www.cambridgesoft.com/software/ChemDraw> (accessed Sep 15 2014).
- [44] IUPAC, A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds 1993. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1993); Corrections: Pure Appl. Chem. 71, 1327-1330 (1999).
- [45] Otsu, M. A threshold selection method from gray-level histograms. *IEEE Trans. Syst. Man Cyber.* 1979, 9, 62-66.
- [46] Chan, R.; Ho, C.W.; Nikolova, M. Salt-and-pepper noise removal by median-type noise detector and detail-preserving regulation. *IEEE Trans. Image Process.* 2005, 14, 1479-1485.
- [47] CLiDE validation set.
<http://www.simbiosys.ca/clide/validation.html> (accessed Nov 30 2014).
- [48] Iguchi, H; Aihara, J; Murakami, S; Miyagi, M; Watanabe, T; Kawabata, Y; Komatsu, H Shinpan Kiso Kagaku, Jikkyo Shuppan Co., Ltd; Japan 2013; pp185-239.

付録A XyMTeXで描画した化学構造式

Table. XyMTeXで描画した化学構造式とそのソース 1/7

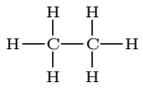
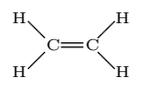
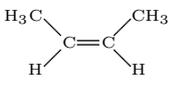
Structure	Sauce List
 <p>エタン</p>	$\text{\%tetrahedral}\{0==\{C\};1==\{H\};2==\{H\};3==\{H\};4==\text{\%tetrahedral}\{C\};1==\{H\};2==(y1);3==\{H\};4==\{H\}\}$
 <p>シクロブタン</p>	$\text{\%fourhetero}[\]\{\}\{\}$
 <p>シクロペンタン</p>	$\text{\%fiveheterov}[\]\{\}\{\}$
 <p>シクロヘキサン</p>	$\text{\%sixheterov}[\]\{\}\{\}$
 <p>エチレン</p>	$\text{\%ltrigonal}\{0==C;2==H;3==H;1D==\text{\%rtrigonal}\{0==C;1D==(y1);2==3==H\}\}$
 <p>シス-2-ブテン</p>	$\text{\%ltrigonal}\{0==C;2==H\$_3\$C;3==H;1D==\text{\%rtrigonal}\{0==C;1D==(y1);2==H;3==CH\$_3\}\}$

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 2/7

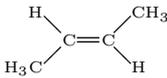
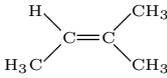
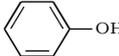
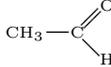
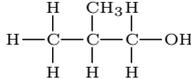
Structure	Sauce List
	$\text{\%ltrigonal}\{0==\text{C};2==\text{H};3==\text{H}_3\text{C};1\text{D}==\text{\%rtrigonal}\{0==\text{C};1\text{D}==(y1}2==\text{H};3==\text{CH}_3\}\}$
トランス-2-ブテン	
	$\text{\%ltrigonal}\{0==\text{C};2==\text{H};3==\text{H}_3\text{C};1\text{D}==\text{\%rtrigonal}\{0==\text{C};1\text{D}==(y1}2==\text{CH}_3;3==\text{CH}_3\}\}$
2-メチル-2-ブテン	
	$\text{\%sixheteroh}\{\text{ace}\}\{4==\text{OH}\}$
フェノール	
	$\text{\%trimethylene}\{\}\{2\text{D}==\text{O}\}$
アセトン	
	$\text{\%rtrigonal}\{0==\text{C};1==\text{CH}_3;2==\text{H};3\text{D}==\text{O}\}$
アセトアルデヒド	
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	$\text{H}\text{\%sbond}\{\}\text{C}\text{\%tbond}\{\}\text{C}\text{\%sbond}\{\}\text{H}$
アセチレン	
$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	$\text{CH}_3\text{\%sbond}\{\}\text{C}\text{\%tbond}\{\}\text{C}\text{\%sbond}\{\}\text{H}$
メチルアセチレン	
	$\text{\%tetrahedral}\{0==\text{C};1==\text{H};2==\text{H};3==\text{H};4==\text{\%tetrahedral}\{0==\text{C};1==\text{C}_3;2==(y1);3==\text{H};4==\text{\%tetrahedral}\{0==\text{C};1==\text{H};2==(y1);3==\text{H};4==\text{H}\}\}\}$
2-メチル-1-プロパノール	

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 3/7

Structure	Sauce List
$\begin{array}{cccc} & \text{H} & \text{H} & \text{OH} & \text{H} \\ & & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==H;3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==(y1);3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==OH;2==(y1);3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==(y1);3==H;4==H\}}\}}\}}\}}}$
2-ブタノール	
$\begin{array}{cccc} & \text{H} & \text{CH}_3 & \text{H} \\ & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & & & \\ & \text{H} & \text{OH} & \text{H} \end{array}$	$\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==H;3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==CH\$_3\$;2==(y1);3==OH;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==(y1);3==H;4==H\}}\}}\}}}$
2-メチル-2-プロパノール	
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	$\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1D==0;2==H;4==OH\}}$
ギ酸	
$\begin{array}{ccc} \text{HOOC} & & \text{COOH} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} & \\ & / & \diagdown \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$	$\text{\texttt{\$ltrigonal\{0==C;2==\{HOOC\};3==H;1D==\text{\texttt{\$rtrigonal\{0==C;1D==(y1);2==H;3==\{COOH\}\}}\}}}$
マレイン酸	
$\begin{array}{ccc} \text{H} & & \text{COOH} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} & \\ & / & \diagdown \\ \text{HOOC} & & \text{H} \end{array}$	$\text{\texttt{\$ltrigonal\{0==C;2==H;3==\{HOOC\};1D==\text{\texttt{\$rtrigonal\{0==C;1D==(y1);2==H;3==\{COOH\}\}}\}}}$
フマル酸	
$\begin{array}{cccc} & \text{H} & \text{OH} & \text{O} \\ & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{OH} \\ & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \end{array}$	$\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==H;3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==C;2==(y1);3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1D==0;2==(y1);4==OH\}}\}}\}}}$
乳酸	
$\begin{array}{cccc} & \text{H} & \text{NH}_2 & \text{O} \\ & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{OH} \\ & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \end{array}$	$\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==H;2==H;3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1==N_2\$;2==(y1);3==H;4==\text{\texttt{\$tetrahedral\{0==C;1D==0;2==(y1);4==OH\}}\}}\}}}$
アラニン	
	$\text{\texttt{\$sixheterov[ace]\{\}\}}$
ベンゼン	

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 4/7

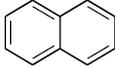
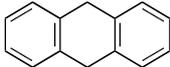
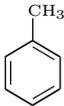
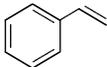
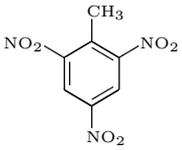
Structure	Sauce List
	<code>¥decaheterov[acegi]{}{}</code>
ナフタレン	
	<code>¥anthracenev[pa]{}{}</code>
アントラセン	
	<code>¥sixheterov[ace]{}{1==CH\$_3\$}</code>
トルエン	
	<code>¥sixheterov[ace]{}{2==¥dimethylenei[a]{}{1W==(y1)}}</code>
スチレン	
	<code>¥sixheterov[ace]{}{1==CH\$_3\$;4==CH\$_3\$}</code>
<i>p</i> -キシレン	
	<code>¥sixheterov[ace]{}{1==CH\$_3\$;4==NO\$_2\$}</code>
<i>p</i> -ニトロトルエン	
	<code>¥sixheterov[ace]{}{1==CH\$_3\$;2==NO\$_2\$;4==NO\$_2\$;6==NO\$_2\$}</code>
2,4,6-トリニトロトルエン	

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 5/7

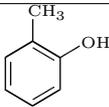
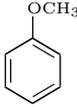
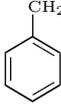
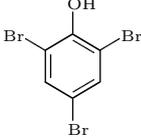
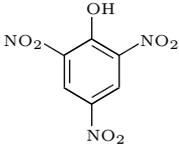
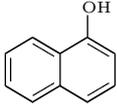
Structure	Sauce List
	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==CH\$_3\$;4==OH}}$
<i>o</i> -クレゾール 	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==OCH\$_3\$}}$
アニソール 	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==CH\$_2\$OH}}$
ベンジルアルコール 	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==OH;2==Br;4==Br;6==Br}}$
トリブロモフェノール 	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==NO\$_2\$;4==OH}}$
<i>p</i> -ニトロフェノール 	$\text{\textbackslash sixheterov[ace]{}{1==OH;2==NO\$_2\$;4==NO\$_2\$;6==NO\$_2\$}}$
ピクリン酸 	$\text{\textbackslash decaheterov[acegi]{}{1==OH}}$
1-ナフトール	

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 6/7

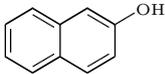
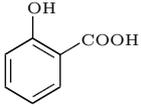
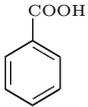
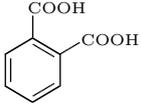
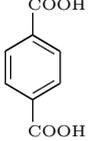
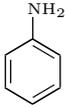
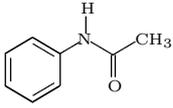
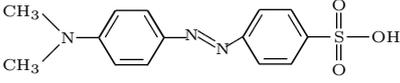
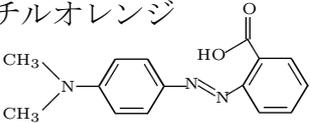
Structure	Sauce List
	$\text{\textyen} \text{decaheterov}[\text{acegi}] \{ \} \{ 2 == \text{OH} \}$
2-ナフトール 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 1 == \{ \text{OH} \}; 2 == \{ \text{COOH} \} \}$
サリチル酸 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 1 == \{ \text{COOH} \} \}$
安息香酸 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 1 == \{ \text{COOH} \}; 2 == \{ \text{COOH} \} \}$
フタル酸 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 1 == \{ \text{COOH} \}; 4 == \{ \text{COOH} \} \}$
テレフタル酸 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 1 == \text{NH} \$ _2 \$ \}$
アニリン 	$\text{\textyen} \text{sixheterov}[\text{ace}] \{ \} \{ 2 == \text{\textyen} \text{trimethylenei} [] \{ 1 == \text{N}; 3 == \text{CH} \$ _3 \$ \} \{ 1 \text{W} == (\text{y}1); 1 == \text{H}; 2 \text{D} == 0 \} \}$
アセトアニリド	

Table. XyMTeX で描画した化学構造式とそのソース 7/7

Structure	Sauce List
	$\text{\textbackslash}l\text{trigonal}\{0==N;2==\text{CH}\$_3\$;3==\text{CH}\$_3\$;1==\text{\textbackslash}sixheteroh[ace]\{\}\{1==(y1);4==\text{\textbackslash}dimethylen\text{ei}[a]\{1==N;2==N\}\{1W==(y1);2W==\text{\textbackslash}sixheteroh[ace]\{\}\{1==(y1);4==\text{\textbackslash}tetrahedral\{0==S;1D==0;2==(y1);3D==0;4==OH\}\}\}\}$
メチルオレンジ 	$\text{\textbackslash}l\text{trigonal}\{0==N;2==\text{CH}\$_3\$;3==\text{CH}\$_3\$;1==\text{\textbackslash}sixheteroh[ace]\{\}\{1==(y1);4==\text{\textbackslash}dimethylen\text{ei}[a]\{1==N;2==N\}\{1W==(y1);2W==\text{\textbackslash}sixheteroh[ace]\{\}\{1==(y1);2==\text{\textbackslash}dimethylene[\]\{1==HO\}\{2W==(y1);2D==0\}\}\}\}$
メチルレッド	