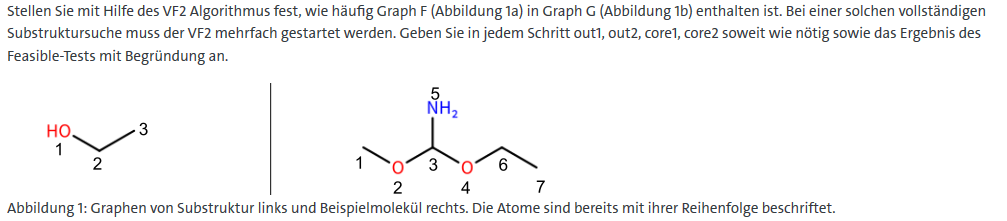
Blatt02\_Aufgabe 3: VF2(T)\_FenderFroechtlingRahlf



**Matching1:**

1. Schritt: am seltensten vorkommende Element des Fragments wird auf ein passendes Atom im Beispielmolekül gematcht; hier: Sauerstoff; Feasibility-Test; im ersten Aufruf des Algorithmus (Rekursionstiefe 1) wird Knoten 1 dem out2-Array zugefügt sowie Knoten 2 in die Nachbarschaftsmenge aufgenommen (ebenfalls 1); das analoge passiert auf Molekülseite

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 1, Molekül Atom 2): Feasibility-Tests**

Rmatch: Konsistenz des erweiterten Matchings/valides Subgraphmatching: True

Radj: für alle Knoten der Nachbarschaftsmenge stehen ausreichend Matching-Partner zur Verfügung: True

Rnext: für alle weiterführenden, benachbarten Knoten stehen ausreichend Matching-Partner zur Verfügung: True

Rsem: Kompatibilität der Knoten/Kantenlabel: True

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 1** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=2 | Out2[1]=1 | Out1[1]=1 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=0 | Out2[2]=1 | Out1[2]=1 | Core1[2]=1 |
| Core2[3]=0 | Out2[3]=0 | Out1[3]=1 | Core1[3]=0 |
|  |  | Out1[4]=0 | Core1[4]=0 |
|  |  | Out1[5]=0 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=0 | Core1[6]=0 |
|  |  | Out1[7]=0 | Core1[7]=0 |

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 2, Molekül Atom 1): Feasibility-Tests**

Rmatch: True

Radj: False

Rnext: False

Rsem: False

=False

Matching ist nicht zulässig. Für alle Knoten der Nachbarschaftsmenge stehen nicht ausreichend Matching-Partner zur Verfügung und für alle weiterführenden, benachbarten Knoten stehen auch nicht ausreichend Matching-Partner zur Verfügung. Die Kompatibilität der Knoten sowie der Kantenlabel ist aber gegeben.

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 2, Molekül Atom 3):**

Rmatch: True

Radj: True

Rnext: True

Rsem: True

=True

Matching ist zulässig.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 2** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=2 | Out2[1]=1 | Out1[1]=1 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=3 | Out2[2]=1 | Out1[2]=1 | Core1[2]=1 |
| Core2[3]=0 | Out2[3]=2 | Out1[3]=1 | Core1[3]=2 |
|  |  | Out1[4]=2 | Core1[4]=0 |
|  |  | Out1[5]=2 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=0 | Core1[6]=0 |
|  |  | Out1[7]=0 | Core1[7]=0 |

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 3, Molekül Atom 4):**

Rmatch: True

Radj: Nicht anwendbar (keine weiteren Matching-Partner nötig) ( bzw. True)

Rnext: Nicht anwendbar (keine weiteren Matching-Partner nötig)

Rsem: False

=False

Matching ist nicht zulässig.

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 3, Molekül Atom 5):**

Rmatch: True

Radj: Nicht anwendbar

Rnext: Nicht anwendbar

Rsem: False

=False

Matching(Fragment Atom 3, Molekül Atom 5) ist nicht zulässig.

🡪Gesamtes Matching ist nicht zulässig!

**Matching2:**

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 1, Molekül Atom 4):**

Rmatch: True

Radj: True

Rnext: True

Rsem: True

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 1** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=4 | Out2[1]=1 | Out1[1]=0 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=0 | Out2[2]=1 | Out1[2]=0 | Core1[2]=0 |
| Core2[3]=0 | Out2[3]=0 | Out1[3]=1 | Core1[3]=0 |
|  |  | Out1[4]=1 | Core1[4]=1 |
|  |  | Out1[5]=0 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=1 | Core1[6]=0 |
|  |  | Out1[7]=0 | Core1[7]=0 |

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 2, Molekül Atom 3):**

Rmatch: True

Radj: True

Rnext: True

Rsem: True

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 2** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=4 | Out2[1]=1 | Out1[1]=0 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=3 | Out2[2]=1 | Out1[2]=2 | Core1[2]=0 |
| Core2[3]=0 | Out2[3]=2 | Out1[3]=1 | Core1[3]=2 |
|  |  | Out1[4]=1 | Core1[4]=1 |
|  |  | Out1[5]=2 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=1 | Core1[6]=0 |
|  |  | Out1[7]=0 | Core1[7]=0 |

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 3, Molekül Atom 2):**

Rmatch: True

Radj: Nicht anwendbar

Rnext: Nicht anwendbar

Rsem: False

=False

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 3, Molekül Atom 5):**

Rmatch: True

Radj: Nicht anwendbar

Rnext: Nicht anwendbar

Rsem: False

=False

Zurück zu Rekursionstiefe 2: alle Matchings bis auf erstes werden rückgängig gemacht, weil auf diese Weise kein valides Subgraphmatching erreicht werden kann.

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 2, Molekül Atom 6):**

Rmatch: True

Radj: True

Rnext: True

Rsem: True

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 2** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=4 | Out2[1]=1 | Out1[1]=0 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=6 | Out2[2]=1 | Out1[2]=0 | Core1[2]=0 |
| Core2[3]=0 | Out2[3]=2 | Out1[3]=1 | Core1[3]=0 |
|  |  | Out1[4]=1 | Core1[4]=1 |
|  |  | Out1[5]=0 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=1 | Core1[6]=2 |
|  |  | Out1[7]=2 | Core1[7]=0 |

**Erweiterung der DS um Match(Fragment Atom 3, Molekül Atom 7):**

Rmatch: True

Radj: True (bzw. keine weiteren nötig)

Rnext: True (bzw. keine weiteren nötig)

Rsem: True

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Rekursionstiefe 2** |  |  |  |
| **Core2** | **Out2** | **Out1** | **Core1** |
| Core2[1]=4 | Out2[1]=1 | Out1[1]=0 | Core1[1]=0 |
| Core2[2]=6 | Out2[2]=1 | Out1[2]=0 | Core1[2]=0 |
| Core2[3]=7 | Out2[3]=2 | Out1[3]=1 | Core1[3]=0 |
|  |  | Out1[4]=1 | Core1[4]=1 |
|  |  | Out1[5]=0 | Core1[5]=0 |
|  |  | Out1[6]=1 | Core1[6]=2 |
|  |  | Out1[7]=2 | Core1[7]=3 |

VF2-Algorithmus matcht Atome des Fragments erfolgreich wie folgt (Fragment,Molekül) mit Atomen des Moleküls: (1,4),(2,6),(3,7)