

## 層別ネットワークの始点 $s$ からレベル 2 まで層の原子の順位の付け方について

### 前提

条件 1 各原子から出る結合の数は 4 以下である．

条件 2 原子  $v$  が結合の数が 3 以上である原子であれば，図 1 のように  $v$  に隣接する原子  $u_1, u_2, u_3$  に対して  $u_i$  と  $v$  の結合と  $u_j$  と  $v$  の結合がなす角は直線ではない．

条件 3 原子  $v$  が結合の数が 2 である原子であれば，図 2 のように  $v$  に隣接する原子  $u_1, u_2$  に対して  $u_1$  と  $v$  の結合と  $u_2$  と  $v$  の結合がなす角が直線である場合と直線でない場合がある．前者を直線型，後者を折れ線型とする．

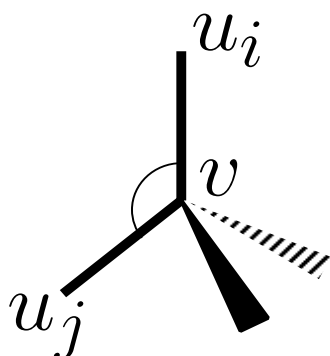


図 1: 前提条件 2

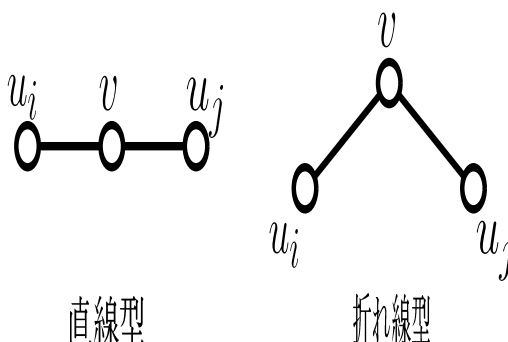


図 2: 前提条件 3

### 子の順位の付き方による原子 $v$ のタイプ別け

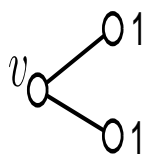
図 3 を参照のこと． $v$  の子の右に書いてある数字が順位にあたる．

- 子が 1 つ：FIRST-ONE
- 子が 2 つ：
  - 2 つが同じ順位：TIE-TWO
  - 2 つが異なる順位：FIRST-TWO
- 子が 3 つ：
  - 3 つが同じ順位：TIE-THREE
  - 3 つの内，1 つの順位が高い：FIRST-THREE
  - 3 つの内，1 つの順位が低い：THIRD-THREE
  - 3 つが互いに異なる順位：INDIVID-THREE

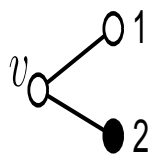
### 立体化学 (CAST コード) による順位付け

3 つの原子  $a, b, c$  に対し，原子  $a$  と  $b$  の間の結合 ( $a$  から  $b$  までが複数の結合からなる場合もある) と原子  $b$  と  $c$  の間の結合の結合のなす角が直線でない場合，図 4 のように 3 つの原子の乗る平面をひとつ決めるのでこれを  $pl(a, b, c)$  とする．原点を ZERO で表す．CAST コードを決める際には，このような平面を 1 つ基準面として (一意的に) 選ばなければならない．以下では，このような基準面があるものとする．

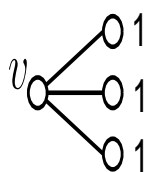
TIE-TWO



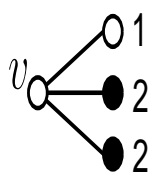
FIRST-TWO



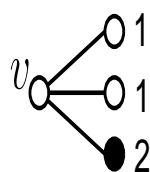
TIE-THREE



FIRST-THREE



THIRD-THREE



INDIVID-THREE

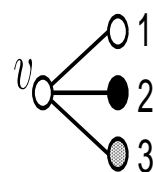


図 3: 子の順位の付き方による原子  $v$  のタイプ別け

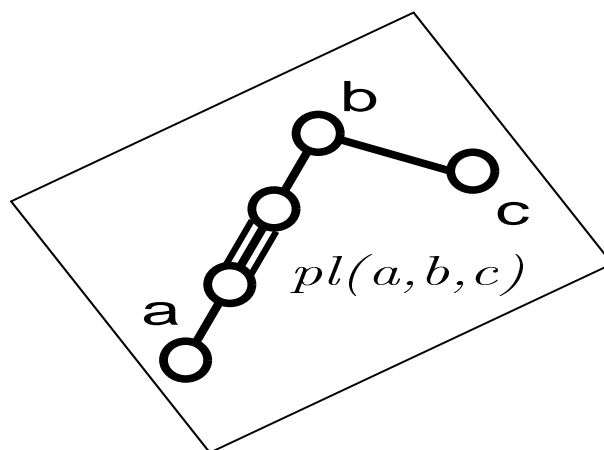
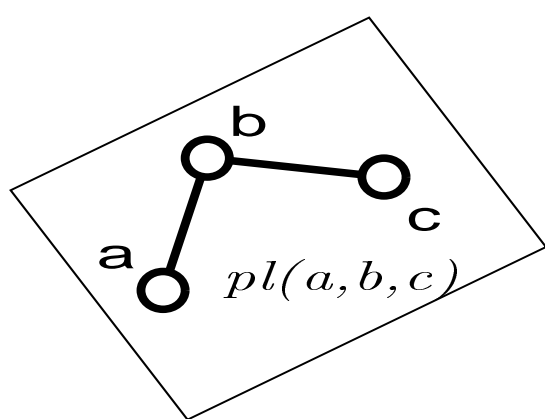


図 4: 原子  $a, b, c$  で決まる平面

原子  $v$  の子に基準面を用いて順位を決めるのは、 $v$  の子の順位の付き方が TIE-TWO , TIE-THREE , FIRST-THREE , THIRD-THREE であるときが対象となる。

1. 基準面を使って  $v$  の子に CAST コードをふる。
2. CAST コードによって、それぞれ以下のように順位を決める。

- TIE-TWO :

- $v$  と  $v$  の親との結合が二重結合の場合：図 5 の I のように CAST コードが 3 より大きく 9 以下であるものを順位の低い原子とする。これによって順位の決まった 2 つの原子に関しては、その順位を立体配座依存としない。
- その他の場合：図 5 の II ~ IV のように CAST コードの小さいものを順位が高い原子とする。これによって順位の決まった 2 つの原子に関しては、その順位を立体配座依存とする。

- TIE-THREE : 3 つの子について、CAST コードの小さいものから  $u_1, u_2, u_3$  とする。そして、その順位は高いものから、 $u_2, u_1, u_3$  とする。これは図 6 のように  $u_2$  から反時計回りで順位を付けていることになる。図 6 において原子にふられている数字が付けられる順位である。これによって順位の決まった 3 つの原子に関しては、その順位を立体配座依存とする。
- FIRST-THREE : 図 7 の I のように、順位が高いものから反時計回りに 1,2,3 の順位を付ける。図 7 の I において原子にふられている数字が付けられる順位である。これによって順位の決まった 3 つの原子に関しては、その順位を立体配座依存としない。
- THIRD-THREE : 図 7 の II のように、順位が低いものから反時計回りに 3,1,2 の順位を付ける。図 7 の II において原子にふられている数字が付けられる順位である。これによって順位の決まった 3 つの原子に関しては、その順位を立体配座依存としない。

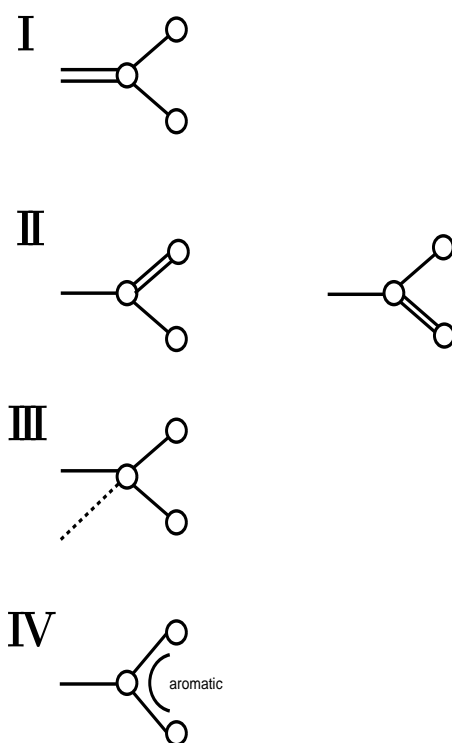


図 5: TIE-TWO の順位の付け方

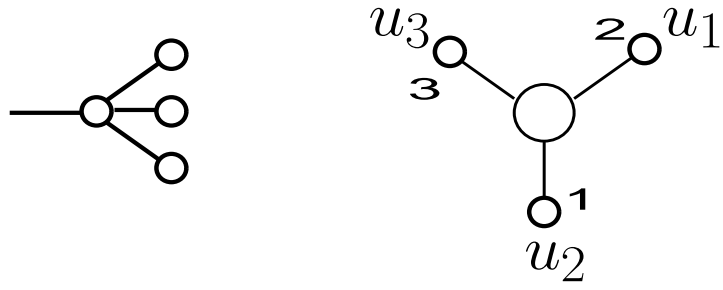


図 6: TIE-THREE の順位の付け方

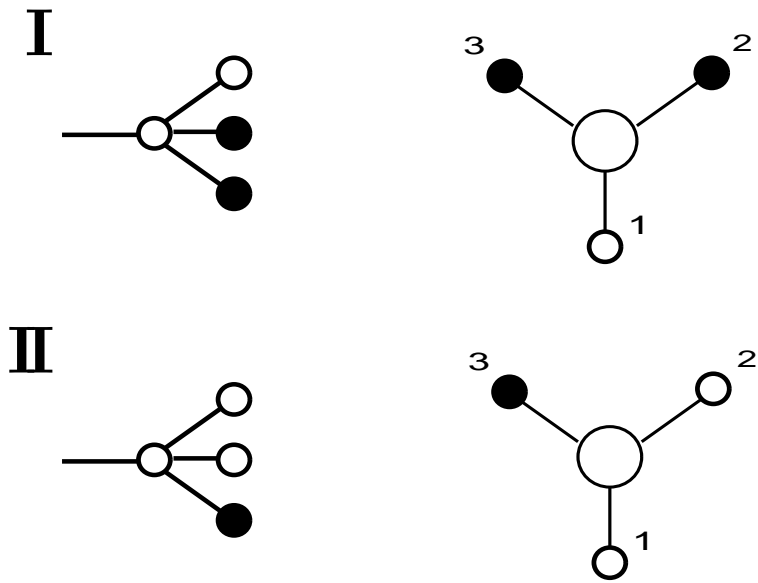


図 7: FIRST-THREE, THIRD-THREE の順位の付け方

## レベル 2 までの層の順位付け

レベル 1 の層の原子の個数で場合分けをする .

### 1. 1 つの場合 ( $v_1$ とする)

レベル 2 の層の原子の個数で場合分けをする .

case 1 1 つの場合 :

- 始点  $s, v_1, v_1$  の子の 3 つが直線の場合 :  $v_1$  を新たに始点 , レベルを 1 つずらして , 再びレベル 1 の層の原子の個数による場合分けを適用する .
- 始点  $s, v_1, v_1$  の子の 3 つが直線ではない場合 : 順位付け完了

case 2 2 つの場合 :  $u_1, u_2$  とする .

- $u_1$  と  $u_2$  の順位が異なる場合 : 順位付け完了 .
- $u_1$  と  $u_2$  の順位が同じ場合 :  $u_1$  の順位を高くした場合と  $u_2$  の順位を高くした場合の 2 通りの CANOST 表記を生成する . 順位付け完了 .

case 3 3 つの場合 :

- $v_1$  が INDIVID-THREE の場合 : 順位付け完了 .
- $v_1$  が FIRST-THREE (図 8) または THIRD-THREE の場合 :  $pl(\text{ZERO}, s, v_1)$  を基準面にして  $v_1$  の子に順位を付ける . 順位付け完了 .
- $v_1$  が TIE-THREE の場合 : 3 個の子 , それぞれの順位を他の 2 つより高くした場合の CANOST 表記を生成する . 他の 2 つの原子は FIRST-THREE と同様に ,  $pl(\text{ZERO}, s, v_1)$  を基準面にして決めるので全部で 3 通りの CANOST 表記を生成する . 順位付け完了 .

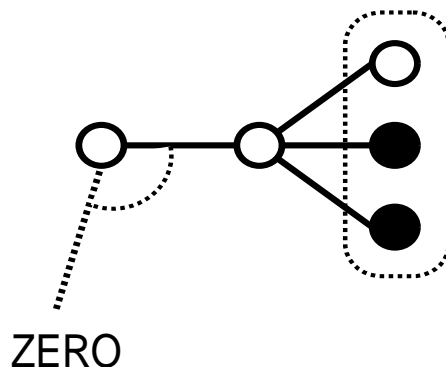


図 8: レベル 2 が FIRST-THREE の場合の順位の付け方

### 2. 2 つの場合 ( $v_1, v_2$ とする)

$v_1, v_2$  の順位の付き方によって場合分けをする .

case 1  $v_1$  と  $v_2$  の順位が異なる場合 : 順位が高い方を  $a$  , 低い方を  $b$  とする .

case 2  $v_1$  と  $v_2$  の順位が同じ場合 :  $v_1$  の順位を高くした場合と  $v_2$  の順位を高くした場合の 2 通りの CANOST 表記を生成する . それぞれの場合について順位が高い方を  $a$  , 低い方を  $b$  とする .

次に  $a$  と  $s$  の結合と  $s$  と  $b$  の結合のなす角の角度で場合分けをする .

- 直線の場合 :  
 $a$  を含め , その先の原子を探索する .  
直線型の原子である限り , 探索を先に進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見付かれば探

索を終了．その原子を  $c(a)$  とする．結合の数が 1 である原子まで探索しても，そのような原子がない場合，結合の数が 1 である原子の親（直線型の原子である）を  $c(a)$  とする． $c(a)$  が  $a$  である場合があることを断っておく． $c(a)$  によって図 9 のように場合を分ける．

- $c(a)$  が直線型の原子：NOAIXS(a1)
- $c(a)$  の子が TIE-TWO もしくは TIE-THREE：NOAXIS(a2)
- $c(a)$  が折れ線型の原子：AXIS(a1)
- $c(a)$  が上記以外 (FIRST-TWO, FIRST-THREE, THIRD-THREE, INDIVID-THREE)：AXIS(a2)

さらに，下記の場合，CAST コードに基づく順位付けをする．

- $c(a)$  が FIRST-THREE, THIRD-THREE の場合：  
 $pl(ZERO, s, c(a))$  を基準面として  $c(a)$  の子に CAST コードに基づいた順位を付ける．これによって決まる順位で最も順位が高い子を  $c(a)_f$  とする．
- $c(a)$  が AXIS(a1) または AXIS(a2) の場合：  
子の中で最も順位が高いものを  $c(a)_f$  とする．

次に同様に  $b$  を含め，その先を探索する．

直線型の原子である限り，探索を先に進める．結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見つかれば探索を終了．その原子を  $c(b)$  とする．結合の数が 1 である原子まで探索しても，そのような原子がない場合，結合の数が 1 である原子の親（直線型の原子である）を  $c(b)$  とする． $c(b)$  によって場合を分ける．

- $c(b)$  が直線型の原子：NOAIXS(b1)
- $c(b)$  の子が TIE-TWO もしくは TIE-THREE：NOAXIS(b2)
- $c(b)$  が折れ線型の原子：AXIS(b1)
- $c(b)$  が上記以外：AXIS(b2)

$c(b)$  が AXIS(b1)，もしくは FIRST-TWO, INDIVID-THREE のとき， $c(b)$  の子で最も順位が高いものを  $c(b)_f$  とする．

#### 順位付け

$c(a), c(a)_f, c(b), c(b)_f$  を利用して順位を付ける． $c(b)$  の場合分けにしたがって順位付けを行う．

(a) AXIS(b1) の場合：

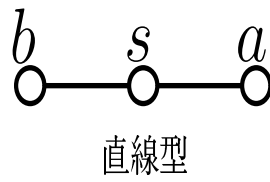
- NOAXIS(a2) の場合： $pl(c(b)_f, c(b), c(a))$  を基準面にして，図 10 の I のように破線で囲まれた  $c(a)$  の子に順位を付ける．順位付け完了．
- その他：順位付け完了．

(b) AXIS(b2) の場合：

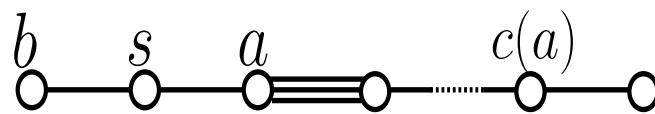
- $c(b)$  が FIRST-TWO もしくは INDIVID-THREE の場合：  
 $c(a)$  が NOAXIS(1a) ならば， $pl(c(b)_f, c(b), c(a))$  を基準面にして図 10 の II のように破線で囲まれた  $c(a)$  の子に順位を付ける．順位付け完了．
- $c(b)$  が FIRST-THREE もしくは THIRD-THREE の場合：  
\*  $c(a)$  が AXIS(a1) もしくは AXIS(a2) の場合：  
 $pl(c(a)_f, c(a), c(b))$  を基準面にして図 10 の III のように破線で囲まれた  $c(b)$  の子に順位を付ける．順位付け完了．  
\*  $c(a)$  が NOAXIS(a2) の場合：  
 $pl(ZERO, s, c(b))$  を基準面にして図 10 の IV の i のように破線で囲まれた  $c(b)$  の子に順位を付ける．このとき  $c(b)$  の子で最も順位が高いもののが決まるのでそれを  $c(b)_f$  とする  $pl(c(b)_f, c(b), c(a))$  を基準面にして図 10 の IV の ii のように破線で囲まれた  $c(a)$  の子に順位を付ける．順位付け完了．

(c) NOAXIS(b2) の場合：

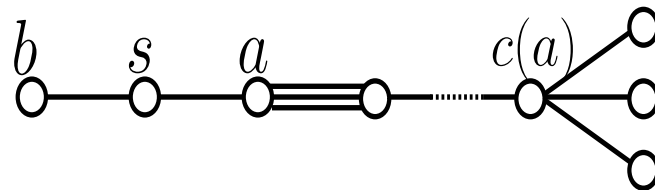
- AXIS(a1) もしくは AXIS(a2) の場合：  
 $pl(c(a)_f, c(a), c(b))$  を基準面にして図 11 の V のように破線で囲まれた  $c(b)$  の子に順位を付ける．順位付け完了．



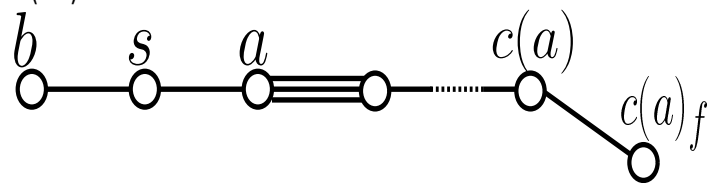
NOAXIS(a1)



NOAXIS(a2)



AXIS(a1)



AXIS(a2)

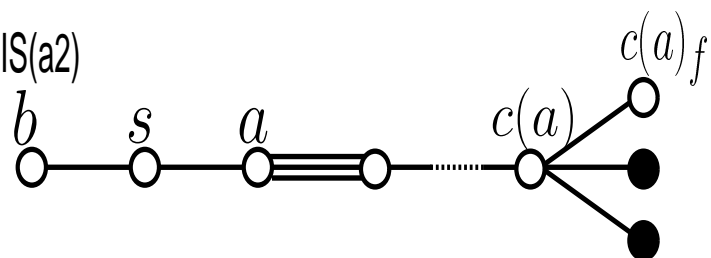


図 9: 原子  $c(a)$  の探索

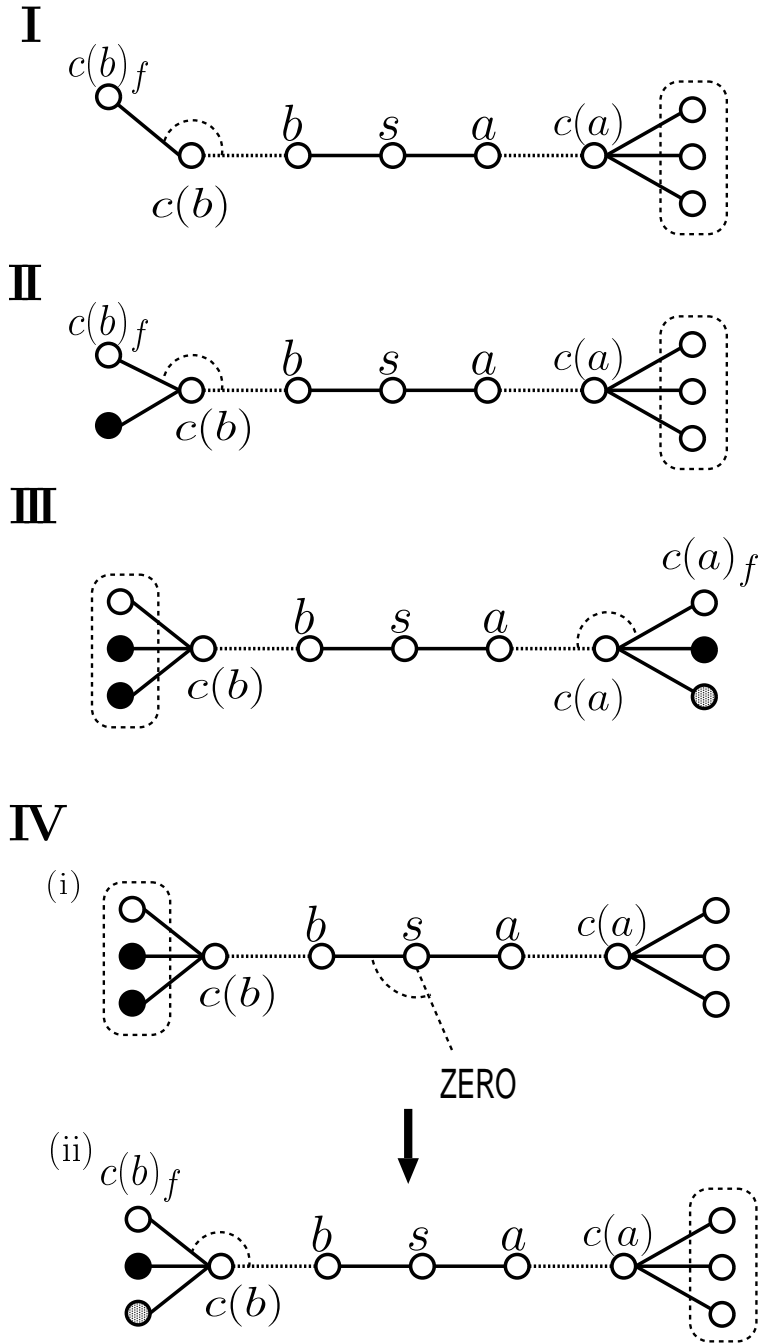


図 10:  $\text{AXIS}(b1), \text{AXIS}(b2)$  の場合の順位付け



- NOAXIS(a1) の場合 :  
図 11 の VI の i のようであるから ,  $c(b)$  の子 , それぞれに対して , 順位を他の子より高くした場合の CANOST 表記を生成する . その他の子については図 11 の VI の ii のように  $pl(ZERO, s, c(b))$  を基準面にして順位を付けるので全部で子の個数通りの CANOST 表記を生成する . 順位付け完了 .
- NOAXIS(a2) の場合 :  
図 11 の VII の i のようであるから ,  $c(a)$  の子 , それぞれに対して , 順位を他の子より高くした CANOST 表記を生成する . このとき , 順位が高くなったものを  $c(a)_f$  とする . その他の子については図 11 の VII の ii のように  $pl(ZERO, s, c(a))$  を基準面にして順位を付けるので全部で子の個数通りの CANOST 表記を生成する . 図 11 の VII の iii のように ,  $pl(c(a)_f, c(a), c(b))$  を基準面にして破線で囲まれた  $c(b)$  の子に順位を付ける . 順位付け完了

● 直線でない場合 :

$a$  を含め , その先の原子を探索する .

直線型の原子である限り , 探索を先に進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子  $c(a)$  が見付かれれば探索を終了 .

$c(a)$  が FIRST-THREE, THIRD-THREE, TIE-TWO, TIE-THREE の場合 :

図 12 の I のように ,  $pl(b, s, c(a))$  を基準面として破線で囲まれた  $c(a)$  の子に CAST コードに基づいた順位を付ける .

次に同様に  $b$  を含め , その先の原子を探索する .

結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子  $c(b)$  が見付かれれば , 探索を終了 .

$c(b)$  が FIRST-THREE, THIRD-THREE, TIE-TWO, TIE-THREE の場合 :

図 12 の II のように ,  $pl(a, s, c(b))$  を基準面として破線で囲まれた  $c(b)$  の子に CAST コードに基づいた順位を付ける .

### 3. 3 つの場合 :

3 つの原子の順位の付き方によって場合分けをする .

case 1 3 つが同じ順位の場合 (1-1-1) :

3 つの内 , 1 つの順位を他の 2 つより高くした場合の CANOST 表記を生成する . case 1 の場合 , 少なくとも 3 通りの CANOST 表記を生成することになり , 全部で何通りになるかは順位付けでの場合分けによる . 最も順位が高いものを  $a$  , その他の 2 つを  $b_1, b_2$  とする (1-2-2) .

case 2 3 つの内 , 1 つの順位が高い場合 (1-2-2) :

最も順位が高いものを  $a$  , その他の 2 つを  $b_1, b_2$  とする .

case 3 3 つの内 , 1 つの順位が低い場合 (1-1-2) :

最も順位が低いものを  $a$  , その他の 2 つを  $b_1, b_2$  とする .

case 4 3 つが異なる順位の場合 (1-2-3) :

順位の高いものから  $a, b, c$  とする .

次に順位付けを上記の場合分けにしたがって行う .

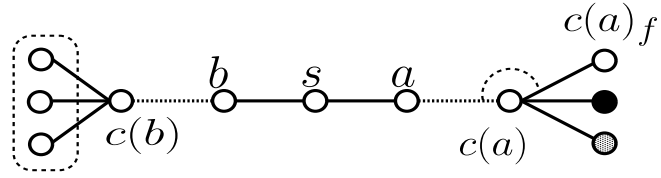
case 1 ~ case 3 の場合

$a$  を含め , その先の原子を探索する . 直線型の原子である限り , 探索を先に進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見付かれれば探索を終了 . その原子を  $c(a)$  とする . 結合の数が 1 である原子まで探索しても , そのような原子がない場合 , 結合の数が 1 である原子の親 (直線型の原子である) を  $c(a)$  とする .

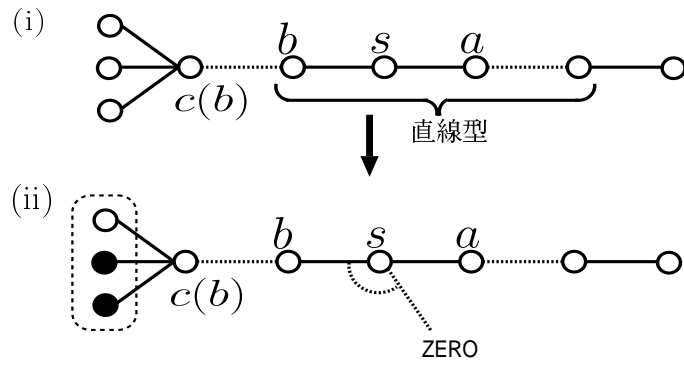
- $c(a)$  が直線型の原子 : NOAIXS(a1)
- $c(a)$  が TIE-TWO もしくは TIE-THREE : NOAXIS(a2)
- $c(a)$  が折れ線型の原子 : AXIS(a1)
- $c(a)$  が上記以外 : AXIS(a2)

$c(a)$  の場合分けにしたがって順位付けを行う .

V



VI



VII

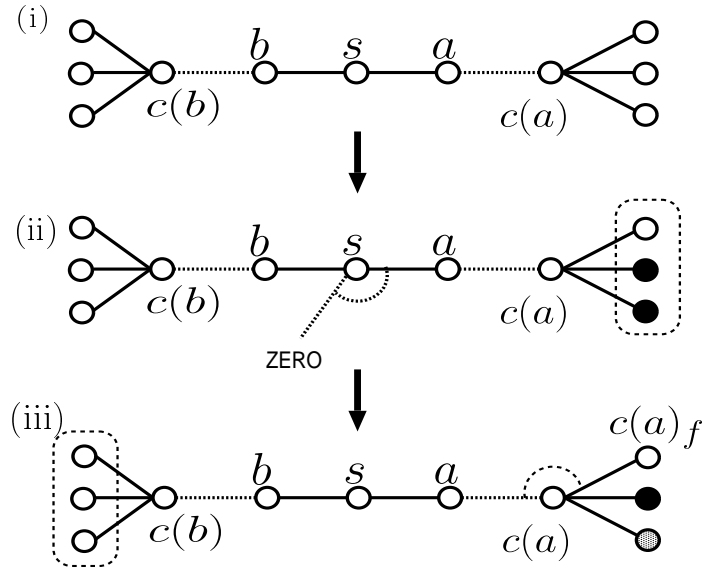


図 11: NOAXIS(b2) の場合の順位付け

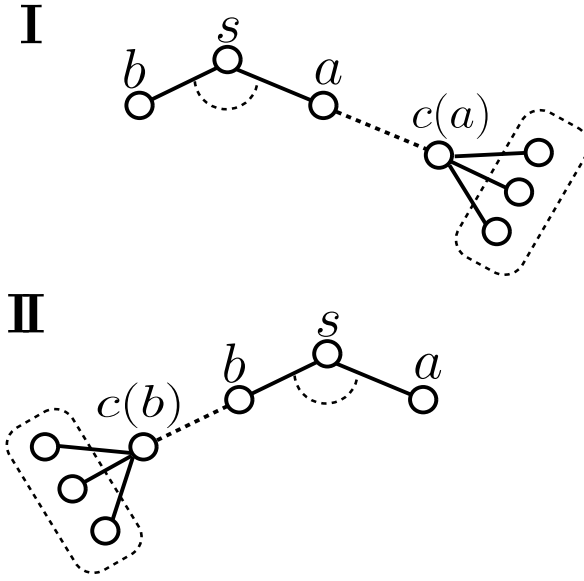


図 12: 直線でない場合の順位付け

(a)  $c(a)$  が  $\text{AXIS}(a1), \text{AXIS}(a2)$  の場合:

$\text{AXIS}(a1)$  の場合,  $c(a)$  の子を  $c(a)_i$  とする.  $\text{AXIS}(a2)$  の場合,  $c(a)$  の子で最も順位が高い, もしくは最も順位が低いことで特定できる子があるので, それを  $c(a)_i$  とする. したがって, 図 13 の I の i のように  $pl(c(a)_i, c(a), s)$  を基準面として  $b_1, b_2$  に順位を付ける. これにより決まった順位において順位が高いものを  $b$ , 低いものを  $c$  とすれば,  $c(a)$  の子は図 13 の I の ii のように基準面  $pl(b, s, c(a))$  で順位を付ける.  $b, c$  については, それぞれ直線型の原子である限り, その子の方向に探索を進める. 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見付かれれば探索終了. その原子をそれぞれ  $c(b), c(c)$  とする.  $c(b), c(c)$  の子に順位を付ける必要があるならば, 図 13 の I のように iii それぞれ基準面  $pl(a, s, c(b)), pl(a, s, c(c))$  によって順位を付ける. 順位付け完了.

(b)  $c(a)$  が  $\text{NOAXIS}(a1), \text{NOAXIS}(a2)$  の場合:

$b_1, b_2$  のそれぞれを他方より順位を高くした場合の  $\text{CANOST}$  表記を生成する. したがって, これにより 2 通りの  $\text{CANOST}$  表記を生成する. あとは case 4 と同じ. 順位付け完了.

#### case 4 の場合

$a, b, c$  がそれぞれ直線型の原子である限り, 子の方向に探索を進める. 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子であれば探索を終了し, それぞれ  $c(a), c(b), c(c)$  とする.  $c(a), c(b), c(c)$  の子に順位を付ける必要があるならば, 図 13 の II のようにそれぞれ基準面  $pl(b, s, c(a)), pl(a, s, c(b)), pl(a, s, c(c))$  で順位を付ける. 順位付け完了.

#### 4. 4 つの場合:

4 つの原子の順位の付き方によって場合分けを行う.

##### case 1 4 つが同じ順位の場合 (1-1-1-1):

4 つの内, 1 つの順位を他の 3 つの順位より高くした場合を考える. case 1 の場合, 少なくとも 4 通りの  $\text{CANOST}$  表記を生成することになり, 全部で何通りの  $\text{CANOST}$  表記を生成するかは順位付けでの場合分けによる. 最も順位が高いものを  $a$ , その他の 3 つを  $b_1, b_2, b_3$  とする (1-2-2-2).

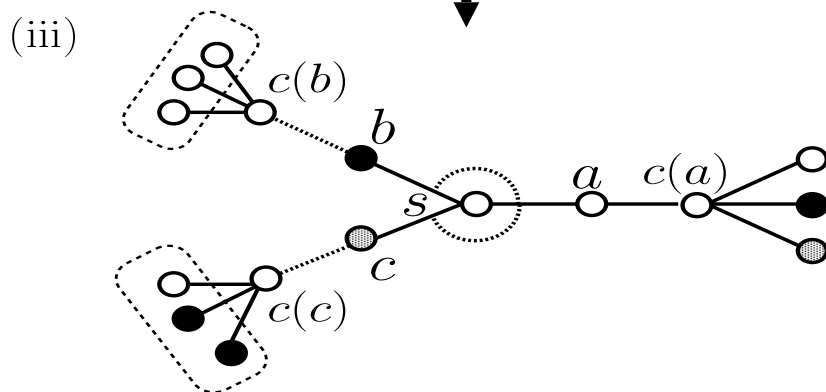
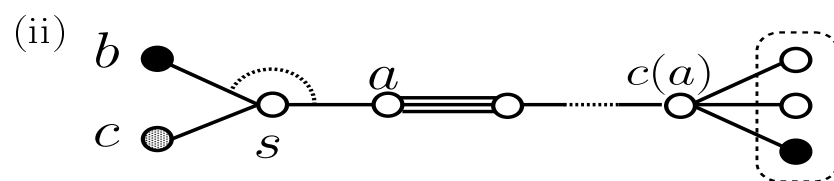
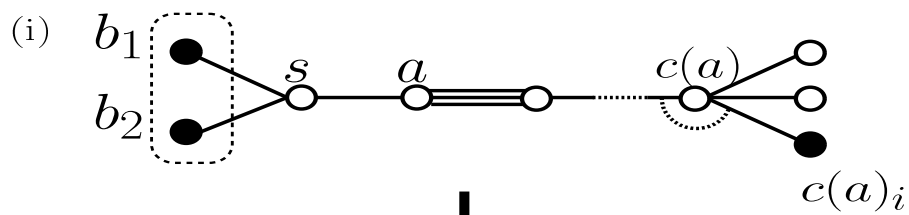
##### case 2 4 つの内, 1 つの順位が高い場合 (1-2-2-2):

最も順位が高いものを  $a$ , その他の 3 つを  $b_1, b_2, b_3$  とする.

##### case 3 4 つの内, 1 つの順位が低い場合 (1-1-1-2):

最も順位が低いものを  $a$ , その他の二つを  $b_1, b_2, b_3$  とする.

# I



# II

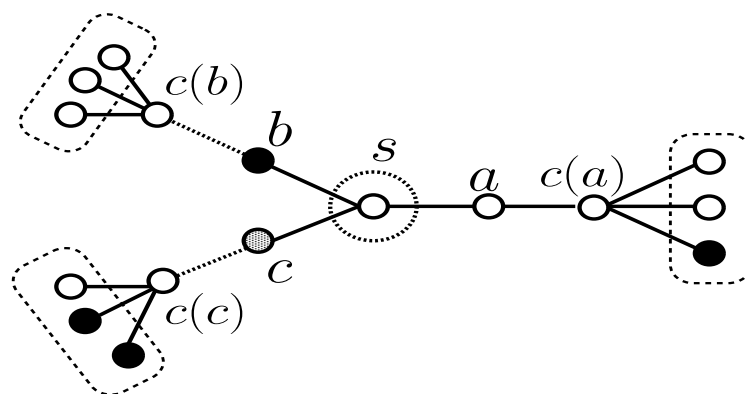


図 13: レベル 1 の原子の個数が 3 つの場合の順位付け

case 4 4 つの内、同じ順位であるものが 2 つあり、その他の 2 つの順位はそれらとは異なり、さらにその他の 2 つの中でも順位が異なる場合 (1-1-2-3, 1-2-2-3, 1-2-3-3) :  
同じ順位であるものを  $c_1, c_2$  , その他の 2 つを順位の高いものから  $a, b$  とする .

case 5 4 つの内、同じ順位であるものが 2 つあり、その他の 2 つの順位はそれらとは異なり、さらにその他の 2 つの順位も同じ場合 (1-1-2-2) :  
同じ順位であるものそれぞれ、 $a_1, a_2$  と  $b_1, b_2$  とする .

case 6 4 つが異なる順位の場合 (1-2-3-4) :  
順位の高い方から  $a, b, c, d$  とする .

上の場合分けにしたがって順位付けを行う .

case 1 ~ case 3 の場合

$a$  を含め、その先の原子を探索する . 直線型の原子である限り、探索を先に進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見つかれば探索を終了 . その原子を  $c(a)$  とする . 結合の数が 1 である原子まで探索しても、そのような原子がない場合、結合の数が 1 である原子の親 (直線型の原子である) を  $c(a)$  とする .

- $c(a)$  が直線型の原子 : NOAIXS(a1)
- $c(a)$  が TIE-TWO もしくは TIE-THREE : NOAXIS(a2)
- $c(a)$  が折れ線型の原子 : AXIS(a1)
- $c(a)$  が上記以外 : AXIS(a2)

$c(a)$  の場合分けにしたがって順位付けを行う .

(a)  $c(a)$  が AXIS(a1), AXIS(a2) の場合 :

AXIS(a1) の場合、 $c(a)$  の子を  $c(a)_i$  とする . AXIS(a2) の場合、 $c(a)$  の子で最も順位が高い、もしくは最も順位が低いことで特定できる子  $c(a)_i$  がある . したがって、 $pl(c(a)_i, c(a), s)$  を基準面として  $b_1, b_2, b_3$  に順位を付ける . それによって決まった順位で高いものから  $b, c, d$  とすれば、 $c(a)$  の子は基準面  $pl(b, s, c(a))$  で順位を付ける .  $b, c, d$  については、それぞれ直線型の原子である限り、子の方向に探索を進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見つかれば、探索を終了し、それぞれを  $c(b), c(c), c(d)$  とする .  $c(b), c(c), c(d)$  の子に順位を付ける必要があるならば、それぞれ基準面  $pl(a, s, c(b)), pl(a, s, c(c)), pl(a, s, c(d))$  によって順位を付ける . 順位付け完了 .

(b)  $c(a)$  が NOAXIS(a1), NOAXIS(a2) の場合 :

$b_1, b_2, b_3$  のそれぞれをその他の 2 つより順位を高くした場合の CANOST 表記を生成する . 図 14 の I のように、その他の 2 つは基準面  $pl(ZERO, c(a), s)$  で順位を決めるのでこれにより 3 通りの CANOST 表記を生成する . あとは case 6 と同じ . 順位付け完了 .

case 4 の場合

図 14 の II のように、基準面  $pl(ZERO, a, s)$  で、 $c_1, c_2$  の順位を付ける . それによって決まった順位で高いものから  $c, d$  とする .  $a, b, c, d$  のそれぞれの原子が直線型の原子である限り、子の方向に探索を進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見つかれば探索終了 . それぞれを  $c(a), c(b), c(c), c(d)$  とする .  $c(a), c(b), c(c), c(d)$  の子に順位を付ける必要があるならば、それぞれ基準面  $pl(b, s, c(a)), pl(a, s, c(b)), pl(a, s, c(c)), pl(a, s, c(d))$  で順位を付ける . 順位付け完了 .

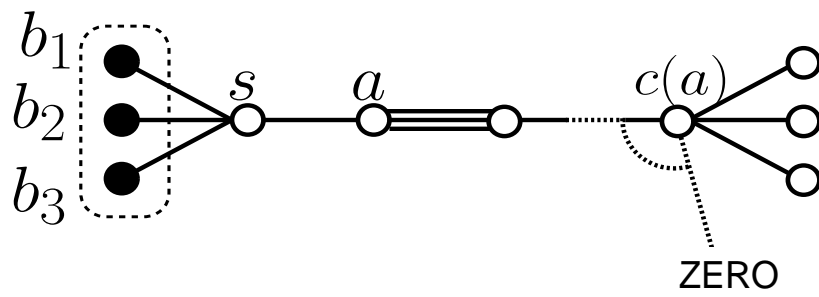
case 5 の場合

順位の高い方の  $a_1, a_2$  の内、一方を他方より順位を高くした場合の CANOST 表記を生成する (1-2-3-3) . あとは case 4 と同じとなるので全部で 2 通りの CANOST 表記を生成する . 順位付け完了 .

case 6 の場合

$a, b, c, d$  のそれぞれの原子が直線型の原子である限り、子の方向に探索を進める . 結合の数が 3 以上もしくは折れ線型の原子が見つかれば探索終了 . それぞれを  $c(a), c(b), c(c), c(d)$  とする .  $c(a), c(b), c(c), c(d)$  の子に順位を付ける必要があるならば、それぞれ基準面  $pl(b, s, c(a)), pl(a, s, c(b)), pl(a, s, c(c)), pl(a, s, c(d))$  で、順位を付ける . 順位付け完了 .

**I**



**II**

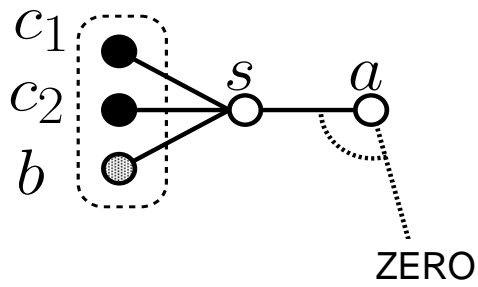


図 14: レベル 1 の原子の個数が 4 つの場合の順位付け