

## main\_canost の「-s」オプションによる出力結果の説明

下の二つの図は、図 1 が syn-cyc-2、図 2 が syn-cyc-1 です。水素は省略してあります。

左から分子、中央は生成法において分子ツリーの前の段階の層別ネットワークの状態、右が分子ツリーとなっています。さらに、層別ネットワークにおいて破線で囲まれた原子には同じ順位がついています。CANOST 表記の生成法では、これらの原子を中心（先頭）とする部分構造を平面構造として対称な構造と定義し、「-s」オプションによってこれらの部分構造を出力します。つまり、分子ツリーにおける各破線内の構造を出力します。

このとき、環の閉じ方によって扱いに違いがあるので注意してください。

環の閉じ方として、その環を始点から 1 結合で結ばれた原子、2 結合で結ばれた原子というように辿っていったとき、ある原子において閉じるものと、ある結合において閉じるものの二通りがあります。前者のある原子のことを環の閉じる原子と呼ぶことにします。後者のある結合のことを環の閉じる結合と呼ぶことにします。

まず、syn-cyc-2 にあるように、ある結合において環が閉じる場合では、出力はその環の閉じる結合を切断した状態、つまり、一番右の状態で破線で囲まれた部分をそれぞれ平面構造として対称な構造として出力します。

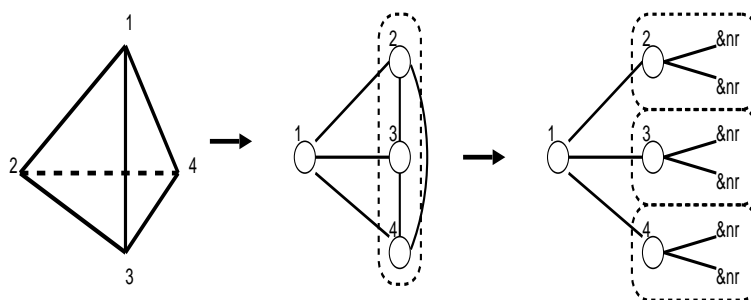


図 1: syn-cyc-2

出力結果は、

```
*** symmetric substructures ***
----- 1
2,
&nr,&nr,6,
-----
3,
&nr,&nr,7,
-----
4,
&nr,&nr,8,
-----
*****
```

となります。

したがって、対称構造中の&nr は、対称構造間に同じレベル間の原子の結合が存在していることを表しています。

次に, syn-cyc-1 にあるように, ある原子において環が閉じる場合には, 出力では環を切断しません. さらに, 環の閉じる原子から, 他の原子から始まる環上の原子の方向には対称構造は広げず, 一番右でそれぞれ破線で囲まれた部分を対称構造として出力します. 例えば, 2 で始まる対称構造と 6 で始まる対称構造には, どちらも 5 を含みますが, 5 の上で環が閉じるので, 2 で始まる対称構造の中に 6 は含みません.

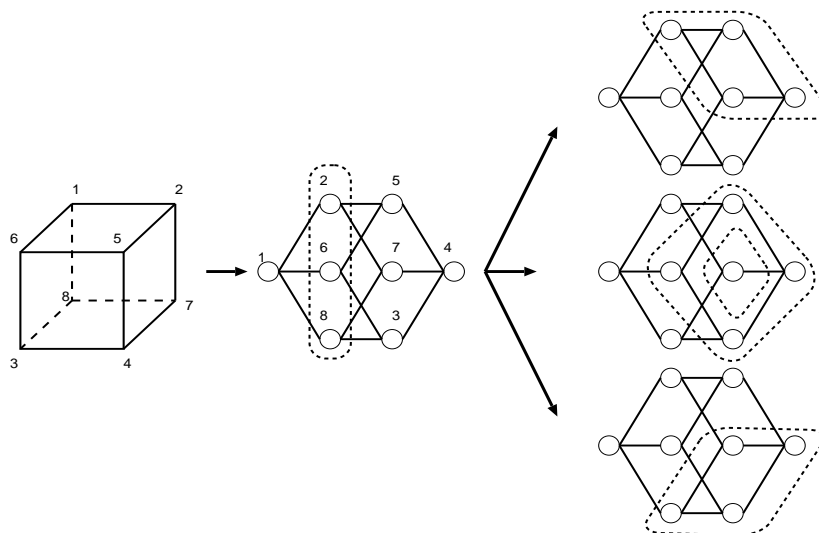


図 2: syn-cyc-1

出力結果は,

```
*** symmetric substructures ***
----- 1
2,
5,7,10,
4,13,15,
12,
-----
6,
3,5,14,
4,11,13,
12,
-----
8,
3,7,16,
4,11,15,
12,
-----
*****
```

となります.

また、分子全体でみたとき、環の閉じる原子より先の原子 (部分構造の先頭の原子までの結合の本数が多い原子) の出力は部分構造の先頭の原子から 5 結合先の原子までとします。これは正確には環の閉じる原子から先の構造は共通の構造であるのでこのような制限を設けてあります。したがって、example3 のような分子の場合 (図 3)、2 と 6 から始まる対称構造では、11、12 までが対称構造として出力され、23,24,25,26,27,28 は出力されません。

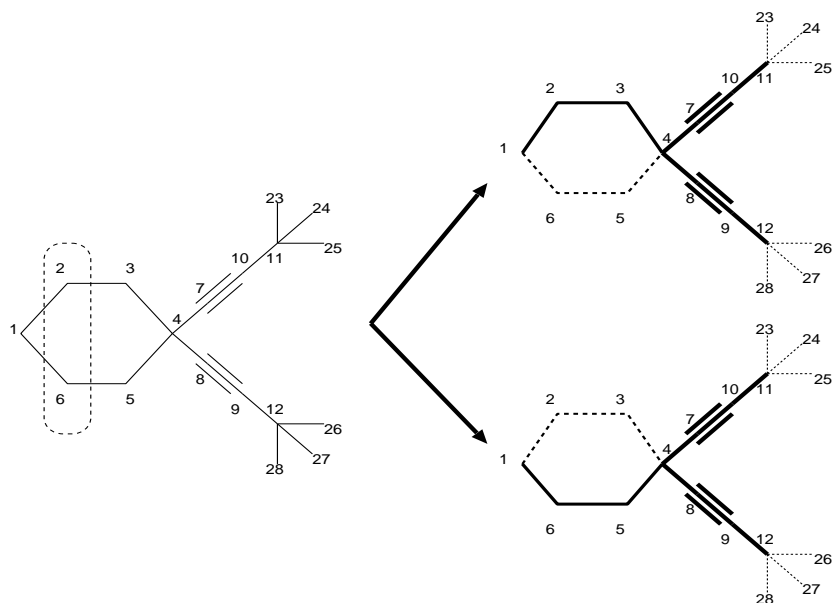


図 3: example3

出力結果は、

```
*** symmetric substructures ***
----- 1
2,
3,15,16,
4,17,18,
7,8,
10,9,
11,12,
-----
6,
5,21,22,
4,19,20,
7,8,
10,9,
11,12,
-----
*****
```

となります。