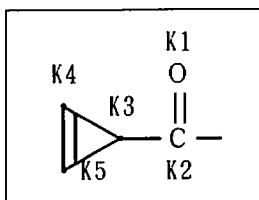


# 結合表

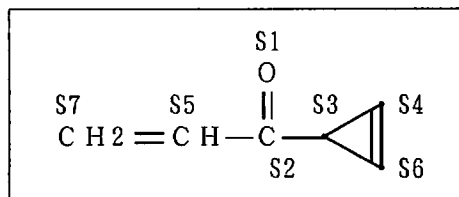
表 1. 検索キー構造式および被検索化合物構造式の結合表

検索キー構造式



原子 I D	原子コード M M A A X B B	コード数	結合相手原子・結合種
K 1	0 1 0 8 1 0 2	1	2 2
K 2	0 1 0 6 3 0 4	1	1 2 3 1
K 3	0 1 0 6 3 0 3	1	2 1 4 1 5 1
K 4	0 1 0 6 2 0 3	2	3 1 5 2
K 5	0 1 0 6 2 0 3	2	3 1 4 2

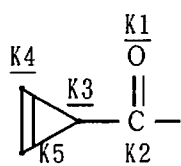
被検索化合物構造式



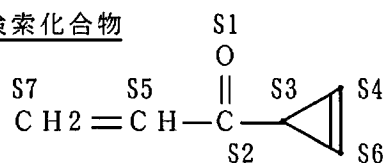
原子 I D	原子コード M M A A X B B	コード数	結合相手原子・結合種
S 1	0 1 0 8 1 0 2	1	2 2
S 2	0 1 0 6 3 0 4	1	1 2 3 1 5 1
S 3	0 1 0 6 3 0 3	1	2 1 4 1 6 1
S 4	0 1 0 6 2 0 3	3	3 1 6 2
S 5	0 1 0 6 2 0 3	3	2 1 7 2
S 6	0 1 0 6 2 0 3	3	3 1 4 2
S 7	0 1 0 6 1 0 2	1	5 2

# セットリダクション実行手順

検索用キー構造



被検索化合物

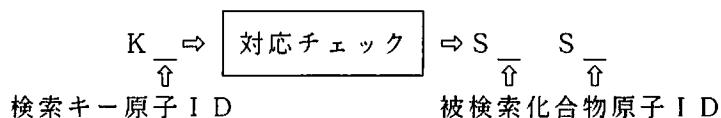


検索キー原子 K \_

## □ 原子基準セットの作成

手順 1) 原子情報の収集

目的：検索キー構造式の各原子と被検索化合物構造式の各原子間の対応をチェックし、検索キー全原子に関する原子基準セットを作成する。



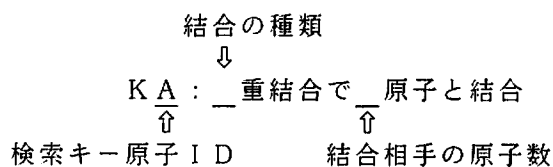
## □ 原子基準セット

検索キー原子 ID	被検索化合物 原子基準セット						
	1	2	3	...	...	7	
K _	0	0	0	0	0	0	0
.....	0	0	0	0	0	0	0
.....	0	0	0	0	0	0	0
K _	0	0	0	0	0	0	0

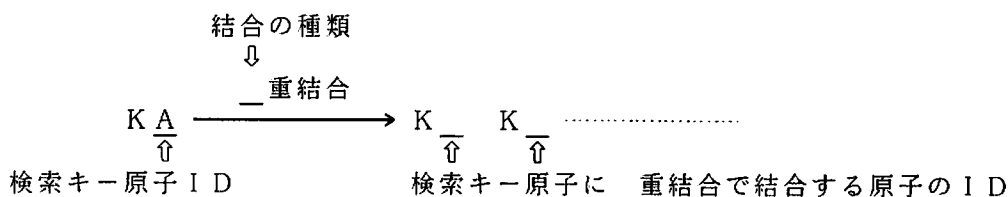
手順 2) 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

目的：検索キー原子に隣接する原子に関する情報と検索キー原子に対応する被検索化合物原子の隣接原子情報の収集

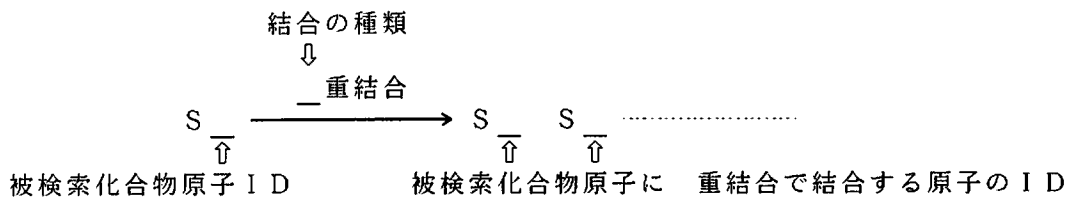
・検索キー原子の結合の種類ごとにまとめる



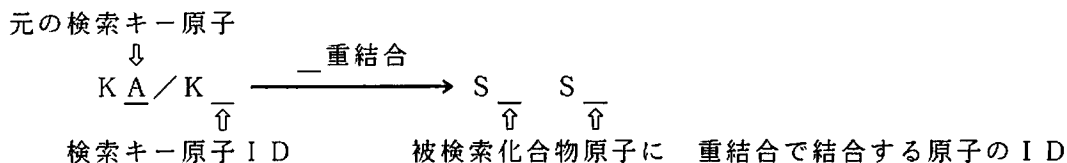
### ① 検索キー構造式原子と隣接する原子のリスト作成



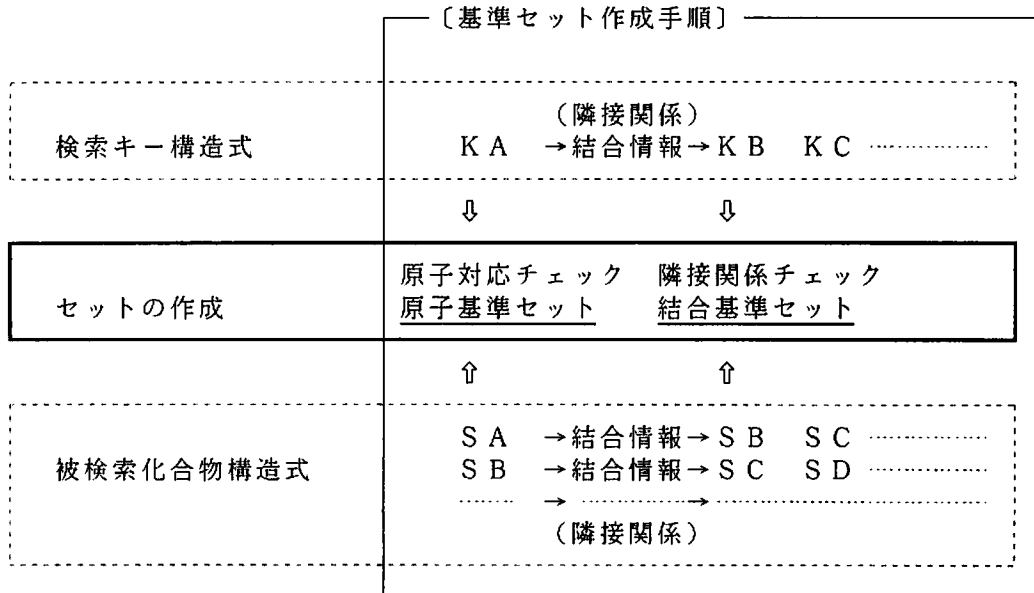
- ② 検索キー原子と対応する被検索化合物構造式原子と、与えられた結合条件下に結合している原子のリスト作成



- ③ 検索キー原子 K\_ の隣接原子 K\_ に対応する被検索化合物原子リスト作成による、結合基準セットの作成



□ 結合基準セット作成手順図



□ 結合基準セット様式

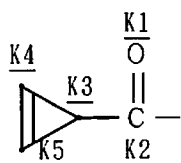
		結合基準セット						
		1	2	3	4	5	6	7
K A ⇒ K_	↑      ↑	0	0	0	0	0	0	0
元の検索キー原子	↑							
A原子の隣接検索キー原子 I D	↑							

- ④ ブール代数積による検索キー原子 K\_ に対する第1次情報セットの作成

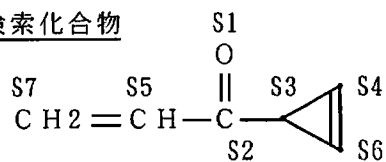
	原子基準セット	結合基準セット	ブール代数積	第1次情報セット
	1 2 3 4 5 6 7	1 2 3 4 5 6 7		1 2 3 4 5 6 7
K_ ⇒ K A	0 0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0	⇒	0 0 0 0 0 0 0
.....	.....	.....	⇒	.....
K_ ⇒ K A	0 0 0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0 0	⇒	0 0 0 0 0 0 0

# セットリダクションの実行例

検索用キー構造



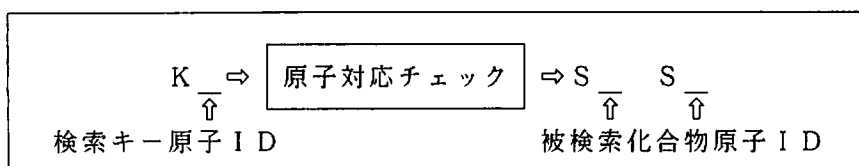
被検索化合物



## □ 原子基準セット作成

手順 1) 原子情報の収集 (原子基準セットの作成)

目的: 検索キー構造式の各原子と被検索化合物構造式の各原子間の対応をチェックし、検索キー全原子に関する原子基準セットを作成する。



検索キー構造式		被検索化合物	
原子 ID	原子コード	原子 ID	原子コード
	M M A A X B B		M M A A X B B
K 1	0 1 0 8 1 0 2	S 1	0 1 0 8 1 0 2
K 2	0 1 0 6 3 0 4	S 2	0 1 0 6 3 0 4
K 3	0 1 0 6 3 0 3	S 3	0 1 0 6 3 0 3
K 4	0 1 0 6 2 0 3	S 4	0 1 0 6 2 0 3
K 5	0 1 0 6 2 0 3	S 5	0 1 0 6 2 0 3
		S 6	0 1 0 6 2 0 3
		S 7	0 1 0 6 1 0 2

## □ 原子対応リスト

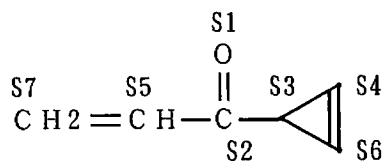
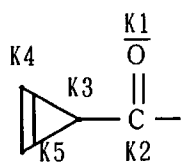
検索キー原子 ID	対応被検索化合物原子 ID
K 1	S 1
K 2	S 2
K 3	S 3
K 4	S 4 S 5 S 6
K 5	S 4 S 5 S 6

## □ 最終原子基準セット

検索キー原子 ID	原子基準セット
	1 2 3 4 5 6 7
K 1	1 0 0 0 0 0 0
K 2	0 1 0 0 0 0 0
K 3	0 0 1 0 0 0 0
K 4	0 0 0 1 1 1 0
K 5	0 0 0 1 1 1 0

検索用キー構造

被検索化合物



検索キー原子 K 1

手順 2) 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

K 1 : 2 重結合で 1 原子と結合

① 検索キー構造式中の隣接原子

2 重結合

K 1  $\longrightarrow$  K 2

② 検索キー構造式原子に対応する被検索化合物構造式原子の隣接原子

2 重結合

S 1  $\longrightarrow$  S 2

③ 結合基準セットの作成

K 1 $\Rightarrow$ 2 重結合 $\Rightarrow$ K 2	$\downarrow$	結合基準セット	$\downarrow$	結合基準セット
原子対応	$\uparrow$		$\uparrow$	
S 1 $\Rightarrow$ 2 重結合 $\Rightarrow$ S 2				

	結合基準セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 1 $\Rightarrow$ K 2	0	1	0	0	0	0	0

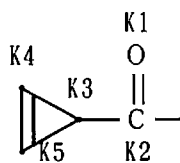
④ ブール代数積による第 1 次検索情報セットの作成

	原子基準セット							結合基準セット							ブール 代数積	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	6	7
K 1 $\Rightarrow$ K 2	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	$\Rightarrow$	0	1	0	0	0	0	0

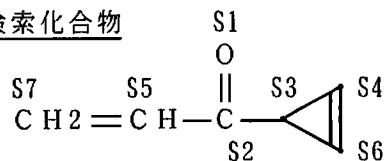
⑤ K 2 に対する第 1 情報検索情報セット

検索キー原子 I D	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 2	0	1	0	0	0	0	0

検索用キー構造



被検索化合物



検索キー原子 K 2

手順 2 ] 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

K 2 : 2重結合で1原子と結合  
: 1重結合で1原子と結合

① 検索キー構造式原子

2重結合

K 2 → K 1

② 被検索化合物構造式原子

2重結合

S 2 → S 1

③ 結合基準セットの作成

		結合基準セット						
		1	2	3	4	5	6	7
K 2 ⇒ 2重結合 ⇒ K 1	↓							
原子対応	結合基準セット	K 2 ⇒ K 1	1	0	0	0	0	0
↑	↑							
S 2 ⇒ 2重結合 ⇒ S 1								

④ ブール代数積による第1次情報セットの作成

	原子基準セット	結合基準セット	ブール代数積	第1次情報セット
	1 2 3 4 5 6 7	1 2 3 4 5 6 7		1 2 3 4 5 6 7
K 2 ⇒ K 1	1 0 0 0 0 0 0	1 0 0 0 0 0 0	⇒	1 0 0 0 0 0 0

① 検索キー構造式原子

1重結合

K 2 → K 3

② 被検索化合物構造式原子

1重結合

S 2 → S 3 S 5

③ 結合基準セットの作成

		結合基準セット						
		1	2	3	4	5	6	7
K 2 ⇒ 1重結合 ⇒ K 3	↓							
原子対応	結合基準セット	K 2 ⇒ K 3	0	0	1	0	1	0
↑	↑							
S 2 ⇒ 1重結合 ⇒ S 3 S 5								

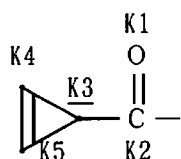
④ ブール代数積による第1次情報セットの作成

	原子基準セット	結合基準セット	ブール代数積	第1次情報セット
	1 2 3 4 5 6 7	1 2 3 4 5 6 7		1 2 3 4 5 6 7
K 2 ⇒ K 3	0 0 1 0 0 0 0	0 0 1 0 1 0 0	⇒	0 0 1 0 0 0 0

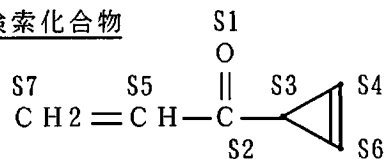
⑤ K 2 に対する第1情報検索情報セット

検索キー原子	第1次情報セット
ID	1 2 3 4 5 6 7
K 1	1 0 0 0 0 0 0
K 3	0 0 1 0 0 0 0

検索キー構造



被検索化合物

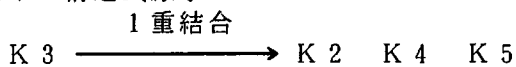


検索キー原子 K 3

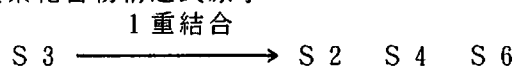
手順 2) 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

K 3 : 1 重結合で 3 原子と結合

① 検索キー構造式原子



② 被検索化合物構造式原子



③ 結合基準セットの作成

		結合基準セット						
		1	2	3	4	5	6	7
K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒	K 2   K 4   K 5							
↓	↓							
原子対応	結合基準セット							
↑	↑							
S 3 ⇒ 1 重結合 ⇒	S 2   S 4   S 6	0	1	0	1	0	1	0
		0	1	0	1	0	1	0
		0	1	0	1	0	1	0

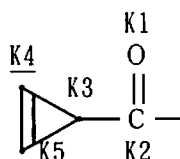
④ ブール代数積による第 1 情報セットの作成

	原子基準セット							結合基準セット							ブール代数積	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	6	7
K 3 ⇒ K 2	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	⇒	0	1	0	0	0	0	0
K 3 ⇒ K 4	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	⇒	0	0	0	1	0	1	0
K 3 ⇒ K 5	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	⇒	0	0	0	1	0	1	0

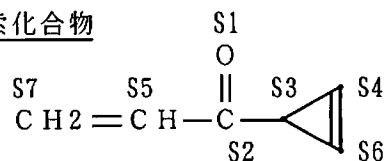
⑤ K 2 に対する第 1 情報検索情報セット

検索キー原子	第 1 次情報セット						
ID	1	2	3	4	5	6	7
K 2	0	1	0	0	0	0	0
K 4	0	0	0	1	0	1	0
K 5	0	0	0	1	0	1	0

検索用キー構造



被検索化合物

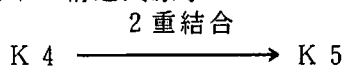


検索キー原子 K 4

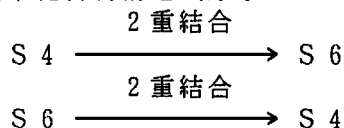
手順 2) 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

K 4 : 2 重結合で 1 原子と結合、 1 重結合で 1 原子と結合

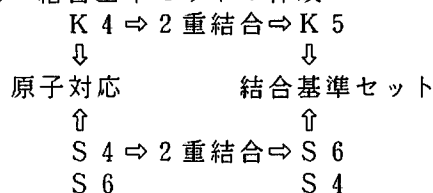
① 検索キー構造式原子



② 被検索化合物構造式原子



③ 結合基準セットの作成

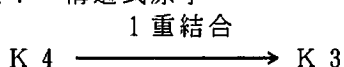


	結合基準セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 4 ⇒ K 5	0	0	0	1	0	1	0

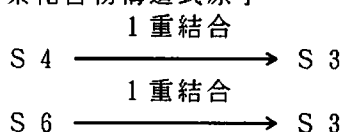
④ ブール代数積による第 1 情報セットの作成 (2 重結合)

	原子基準セット							結合基準セット							ブール代数積	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	6	7
K 4 ⇒ K 5	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	1	0	1	0	⇒	0	0	0	1	0	1	0

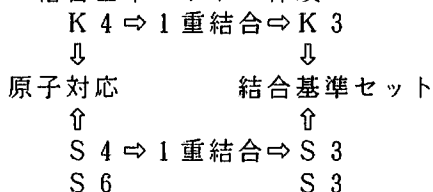
① 検索キー構造式原子



② 被検索化合物構造式原子



③ 結合基準セットの作成



	結合基準セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 4 ⇒ K 3	0	0	1	0	0	0	0

④ ブール代数積による第 1 情報セットの作成 (2 重結合)

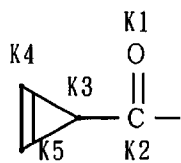
	原子基準セット							結合基準セット							ブール代数積	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	6	7
K 4 ⇒ K 3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	⇒	0	0	1	0	0	0	0

⑤ K 2 に対する第 1 情報検索情報セット

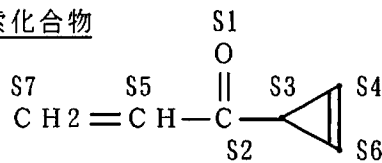
検索キー原子	第 1 次情報セット						
ID	1	2	3	4	5	6	7
K 3	0	1	0	0	0	0	0
K 5	0	0	0	1	0	1	0



検索用キー構造



被検索化合物

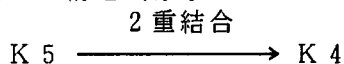


検索キー原子 K 5

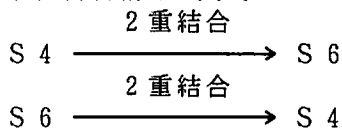
手順 2) 隣接情報の収集 (結合基準セットの作成)

K 5 : 2重結合で1原子と結合、 1重結合で1原子と結合

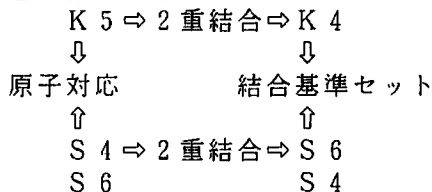
① 検索キー構造式原子



② 被検索化合物構造式原子



③ 結合基準セットの作成



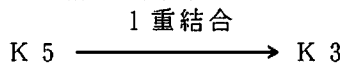
結合基準セット  
1 2 3 4 5 6 7

K 5 ⇒ K 4      0 0 0 1 0 1 0

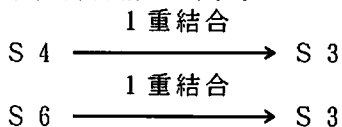
④ ブール代数積による第1情報セットの作成 (2重結合)

	原子基準セット 1 2 3 4 5 6 7	結合基準セット 1 2 3 4 5 6 7	ブール 代数積	第1次情報セット 1 2 3 4 5 6 7
K 5 ⇒ K 4	0 0 0 1 1 1 0	0 0 0 1 0 1 0	⇒	0 0 0 1 0 1 0

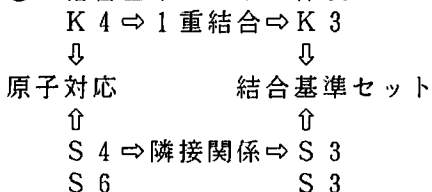
① 検索キー構造式原子



② 被検索化合物構造式原子



③ 結合基準セットの作成



結合基準セット  
1 2 3 4 5 6 7

K 5 ⇒ K 3      0 0 1 0 0 0 0

④ ブール代数積による第1情報セットの作成 (2重結合)

	原子基準セット 1 2 3 4 5 6 7	結合基準セット 1 2 3 4 5 6 7	ブール 代数積	第1次情報セット 1 2 3 4 5 6 7
K 5 ⇒ K 3	0 0 1 0 0 0 0	0 0 1 0 0 0 0	⇒	0 0 1 0 0 0 0

⑤ K 2 に対する第1情報検索情報セット

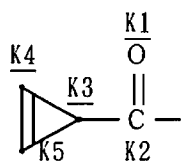
検索キー原子 I D	第1次情報セット 1 2 3 4 5 6 7
K 3	0 1 0 0 0 0 0
K 4	0 0 0 1 0 1 0

検索キー原子に対応する  
第 1 次情報セット

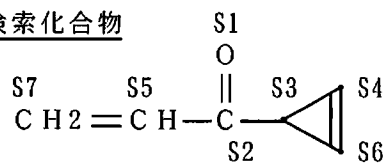
	原子基準セット							結合基準セット							ブール 代数積	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7	1	2	3	4	5	6	7		1	2	3	4	5	6	7
K 2 ⇒ K 1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	⇒	1	0	0	0	0	0	0
K 1 ⇒ K 2	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	⇒	0	1	0	0	0	0	0
K 2 ⇒ K 3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	⇒	0	0	1	0	0	0	0
K 3 ⇒ K 4	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	⇒	0	0	0	1	0	1	0
K 3 ⇒ K 5	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	⇒	0	0	0	1	0	1	0

最終第 1 次情報セット

検索用キー構造



被検索化合物



最終第 1 次情報セット

検索キー原子 I D	第 1 次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 1	1	0	0	0	0	0	0
K 2	0	1	0	0	0	0	0
K 3	0	0	1	0	0	0	0
K 4	0	0	0	1	0	1	0
K 5	0	0	0	1	0	1	0

表より検索キー原子 K 1、K 2、K 3 は被検索化合物原子の S 1、S 2、S 3 と 1 対 1 で対応することがわかる。また、検索キー原子 K 4 および K 5 は被検索化合物原子の S 4 と S 6 の 2 原子に対応していることがわかる。

セットリダクション法においては、検索キー原子と被検索化合物原子とが総て 1 対 1 に対応するまで行うことが必要である。1 対 1 の対応により、検索キー構造式が被検索化合物中に組み込まれていることになる。

検索キー原子 K 4、K 5 が複数の被検索化合物原子に対応していることは、このセットリダクションは完了していないことを意味している。この 1 対複数対応の関係を明確にするためにセットリダクションではさらに 2 次、3 次といったより遠い部分の隣接原子対応のチェックが必要となる。





1. 原子の対応関係のチェック

最終原子基準セット

検索キー原子 I D	原子基準セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 1	1	0	0	0	0	0	0
K 2	0	1	0	0	0	0	0
K 3	0	0	1	0	0	0	0
K 4	0	0	0	1	1	1	0
K 5	0	0	0	1	1	1	0

第1次結合基準セット

検索キー原子 I D	結合基準セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 1	1	0	0	0	0	0	0
K 2	0	1	0	0	0	0	0
K 3	0	0	1	0	1	0	0
K 4	0	1	0	1	0	1	0
K 5	0	1	0	1	0	1	0

■ 検索キー原子の対応する第1次情報セット

	原子基準セット							結合基準セット	ブール 代数積	第1次情報セット										
	1	2	3	4	5	6	7			1	2	3	4	5	6	7				
K 2 ⇒ K 1	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K 1 ⇒ K 2	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K 2 ⇒ K 3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
K 3 ⇒ K 4	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0	0
K 3 ⇒ K 5	0	0	0	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0	0

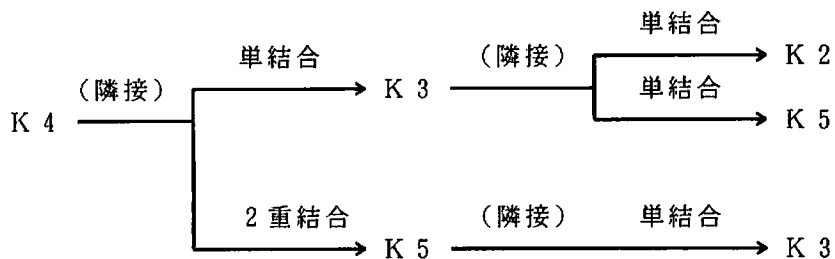
原子及び隣接原子を考慮した対応チェック

最終第1次情報セット

検索キー原子 I D	第1次情報セット						
	1	2	3	4	5	6	7
K 1	1	0	0	0	0	0	0
K 2	0	1	0	0	0	0	0
K 3	0	0	1	0	0	0	0
K 4	0	0	0	1	0	1	0
K 5	0	0	0	1	0	1	0

2. 高次（第2次）隣接関係のチェック

検索キー原子の隣接関係（K 4）



K 4 原子を出発点とする隣接関係

K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 2 K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 5
K 4 ⇒ 2 重結合 ⇒ K 5 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3

検索キー原子の隣接関係（K 5）

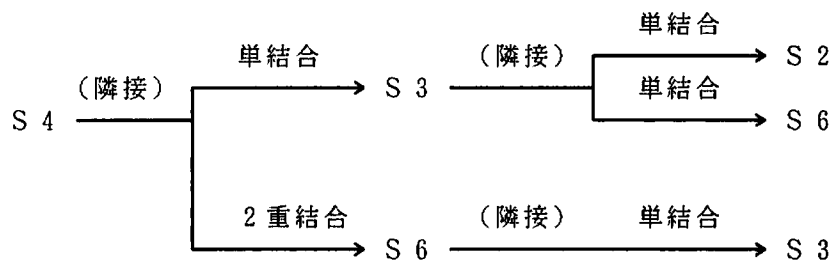


K 5 原子を出発点とする隣接関係

K 5 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 2 K 5 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 4
K 5 ⇒ 2 重結合 ⇒ K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3

## 2. 高次（第2次）隣接関係のチェック

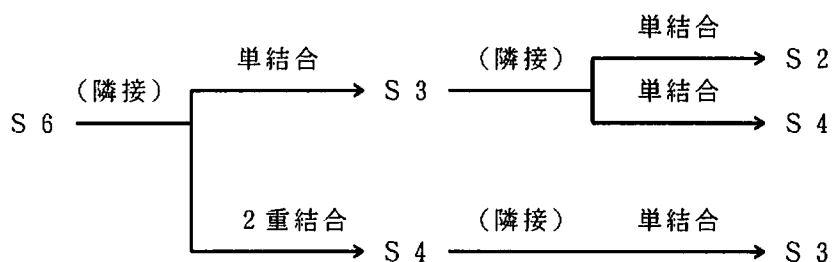
被検索化合物原子の隣接関係（S4）



S4原子を出発点とする隣接関係のチェック

S4 ⇒ 1重結合 ⇒ S3 ⇒ 1重結合 ⇒ S2 S4 ⇒ 1重結合 ⇒ S3 ⇒ 1重結合 ⇒ S6
S4 ⇒ 2重結合 ⇒ S6 ⇒ 1重結合 ⇒ S3

被検索化合物原子の隣接関係（S6）



S6原子を出発点とする隣接関係

S6 ⇒ 1重結合 ⇒ S3 ⇒ 1重結合 ⇒ S2 S6 ⇒ 1重結合 ⇒ S3 ⇒ 1重結合 ⇒ S4
S6 ⇒ 2重結合 ⇒ S4 ⇒ 1重結合 ⇒ S3

3. 第2次隣接関係を用いた結合基準セットの作成手順

□ K 4 原子を出発点とする検索キー構造式の隣接関係

検索キー原子 K 4 を出発原子とした時、第1及び第2隣接関係までをチェックすると以下のような表となる。

K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 2
K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 5
K 4 ⇒ 2 重結合 ⇒ K 5 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3

一方で、第1次情報セットから検索キーの K 4 原子は被検索化合物原子の S 4 および S 6 と対応していることがわかっている。

検索キー原子 I D	第1次情報セット S-1 2 3 4 5 6 7
K 4	0 0 0 1 0 1 0
K 5	0 0 0 1 0 1 0

従って、被検索化合物の隣接関係チェックは S 4 および S 6 を出発原子とした一連の隣接関係をあわせることが必要である。

S 4 からは以下の隣接関係が得られる。

S 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 2
S 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 6
S 4 ⇒ 2 重結合 ⇒ S 6 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3

S 6 からも同様に以下の隣接関係が得られる。

S 6 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 2
S 6 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 4
S 6 ⇒ 2 重結合 ⇒ S 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ S 3

これらの表のうち、検索キー原子の隣接関係で K 4 から K 2 および K 5 にいたる経路は 1 重結合を 2 回とおっている。この経路と同じものを被検索化合物原子の S 4 および S 6 についてみると、S 2、S 4、S 6 となっている。従って、新たに形成された第2次隣接関係のチェックによる結合基準セットは以下ようになる。

K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 2	0 1 0 1 0 1 0
.....	S-1 2 3 4 5 6 7
K 4 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1 重結合 ⇒ K 5	0 1 0 1 0 1 0



同様に、2重結合と1重結合を経由する隣接関係のチェックから得られる結合基準セットは以下のようなになる。

K 4 ⇒ 2重結合 ⇒ K 5 ⇒ 1重結合 ⇒ K 3	$\begin{array}{r} \text{S-1} \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 7 \\ \hline 0 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \end{array}$
-------------------------------	---

・ K 5 原子を出発原子とした時  
 検索キー原子のK 5を出発原子とした時もK 4を出発原子とした時と全く同様な過程を経て以下のような結合機銃セットが得られる。

K 5 ⇒ 1重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1重結合 ⇒ K 2	0 1 0 1 0 1 0
K 5 ⇒ 1重結合 ⇒ K 3 ⇒ 1重結合 ⇒ K 4	$\begin{array}{r} \text{S-1} \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 7 \\ \hline 0 \quad 1 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \end{array}$
K 5 ⇒ 2重結合 ⇒ K 4 ⇒ 1重結合 ⇒ K 3	0 0 1 0 0 0 0

□ 第2次隣接関係による第2次情報セット  
 先に求めてあった原子基準セットと第2次隣接関係により求めた結合基準セット同志のブール代数積から第2次情報セットを求める。

	原子基準セット	結合基準セット	ブール 代数積	第2次情報セット
	1 2 3 4 5 6 7	1 2 3 4 5 6 7		1 2 3 4 5 6 7
K 2	0 1 0 0 0 0 0	0 1 0 1 0 1 0	⇒	0 1 0 0 0 0 0
K 3	0 1 0 0 0 0 0	0 0 1 0 0 0 0	⇒	0 0 1 0 0 0 0
K 4	0 0 0 1 1 1 0	0 1 0 1 0 1 0	⇒	0 0 0 1 0 1 0
K 5	0 0 0 1 1 1 0	0 1 0 1 0 1 0	⇒	0 0 0 1 0 1 0

□ 第1次情報セットと第2次情報セットとの比較

検索キー原子 I D	第1次情報セット	第2次情報セット	
	1 2 3 4 5 6 7	1 2 3 4 5 6 7	
K 1	1 0 0 0 0 0 0	—————	
K 2	0 1 0 0 0 0 0	—————	
K 3	0 0 1 0 0 0 0	—————	
K 4	0 0 0 1 0 1 0	⇒ ⇒ 0 0 0 1 0 1 0	変化無し
K 5	0 0 0 1 0 1 0	⇒ ⇒ 0 0 0 1 0 1 0	変化無し

第1次情報セットと第2次情報セットとを比較した時、変化が全くみられない。従って、この部分構造検索はこの時点で部分構造が発見されたとして終了する。

## □ セットリダクションにおける検索の終了判定アルゴリズム

部分構造検索が終了したか同化を最終的に判定するアルゴリズムが必要となる。ここでは、検索でマッチングが発生した場合とマッチングの無い場合（ミスマッチング）とをわけて説明する。

### ● マッチングが発生した場合の収束アルゴリズム

- ① 検索キー原子の総てについて被検索化合物原子のどれかと1対1の対応が取れた時。
- ② 検索キー原子の総てが被検索化合物原子の複数原子と対応している時。  
この場合は複数の検索キー構造式が被検索化合物中に含まれていることになる。
- ③ 多重類質同形があった時、高次隣接原子のチェックを行った後、低次隣接原子チェックで得られた第n次情報セットとで変化が見られなくなった時。

通常の実験では検索キー構造式が一個でも被検索化合物中に含まれていればその時点で検索は完了する。しかし、検索システムによっては検索キー構造式が化合物中のどの部分に組み込まれているかを明確に色分けして示す機能を備えたものもある。この機能は単に検索を目的とするのとは異なり、構造-活性相関等における化合物の共通関係を基本とした検索時には極めて有効な機能である。

全検索キー原子と被検索化合物原子とが1対1の対応がとれている時、この検索キー原子が被検索化合物原子のどの部分に組み込まれているのかは明確である。しかし、複数の検索キー構造式が被検索化合物中に組み込まれている時には検索キー原子と被検索化合物の原子についてのアトムバイアトム検索を行うことが必要となる。

### ● ミスマッチングとなった時の収束判定

- ① 第1次情報セットが0となる時
- ② 多重アサインが生じた時

多重アサインは2通り発生する。

一つは、原子コードで特定される同一種類の検索キー原子が被検索化合物の原子数を超えている時であり、この条件を満たす被検索化合物はセットリダクションを行う前のプレスクリーニングにより予め取り除かれている。

もう一つの多重アサインは、被検索化合物の原子が複数の検索キー原子にアサインされている（多重類質同形（MULTIPLE ISOMORPHISM）は除く）場合。

## □ ジェネリック検索への展開

検索手法として重要なものにジェネリック検索がある。この検索手法は検索時の制限をゆるめた幅の広い検索を行うことができるため、部分構造検索等では利用頻度の高い手法の一つとなっている。このジェネリック検索をセットリダクション手法で行うには原子の種類に特別なものを設定しておくことが必要である。例えば、以下に示すような特性を持つものを特別な原子として登録する。

- X：ヘテロ原子、共役系
- Y：ヘテロ原子、非共役系
- Z：炭素原子

これらの記号を原子の一種として、他の原子と同列にして扱うことでセットリダクションによるジェネリック検索を行うことが可能となる。この場合前記X、Y、Zの条件を満たすセットの要素部分は総て1が立ち、条件を満たさない時は0が立つことになる。

オブジェクト指向

オブジェクト指向は、ものごとの対象のとらえかたに関する考えかたの一つである。

オブジェクト指向誕生までの歴史

計算機のプログラムはノイマン型計算機の特徴に従ったもので、時系列型で論理的な記述様式を要求するものであった。これらの型を実現するプログラム言語としては、COBOLやFORTRAN、そしてLISPやBASISといったものがある。

オブジェクト指向はソフトウェア工学におけるプログラミングの最新の技術として誕生した。

歴史的には最初に「構造化定理」が提唱された。

〔構造化定理〕とは、

「入／出力が各々一方向である時、全てのプログラムは①順次 (Sequence), ②選択 (IF THEN ELSE), ③繰り返し (DO WHILE) の 3 命令を用いて表現することが出来る」

「構造化定理」は、プログラミングに始めて「構造」という概念を取り入れたもので、プログラミングの作業を前記 3 構造 (命令) だけで表現使用とするものである。

この結果、この構造化の定理に従って作成されたプログラムは、

①プログラムの構造が明確になる。

②保守性が向上する。

より具体的には、

(a)プログラムは 3 つの機能単位で構成され、その内容が明確になる

(b)モジュール単位への分割により、プログラムの部品化と再利用が可能となった

(c)プログラムの修正の影響がモジュール単位となり、保守等が楽になった。

(d)プログラムを分割して作成することが可能となり、大規模なプログラムでも複数の人間で開発可能となる。

構造化定理を実現したプログラミングは構造化プログラミングと言われる。

言語としては、PASCALやC等がある。

構造化プログラミング実行上の手続き

RDBMSとODBMS

RDBMS（リレーショナルデータベース管理システム）とODBMS（オブジェクト指向データベース管理システム）

RDBMS：文字や数値情報を扱うように設計されている

ODBMS：画像／音声等の非定型情報の扱いに適している

マルチメディアデータベース

文字／数値データの他に、静止画／動画／音声等も記録し、自由に取り出し出来るシステムを言う。構造上は「オブジェクト指向」と定義される。