

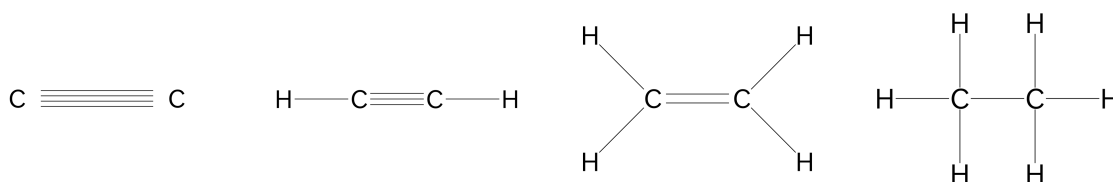
炭化水素列挙 RTA をつまみ食い

すむーずぷりんちゃん (@mat_der.D)

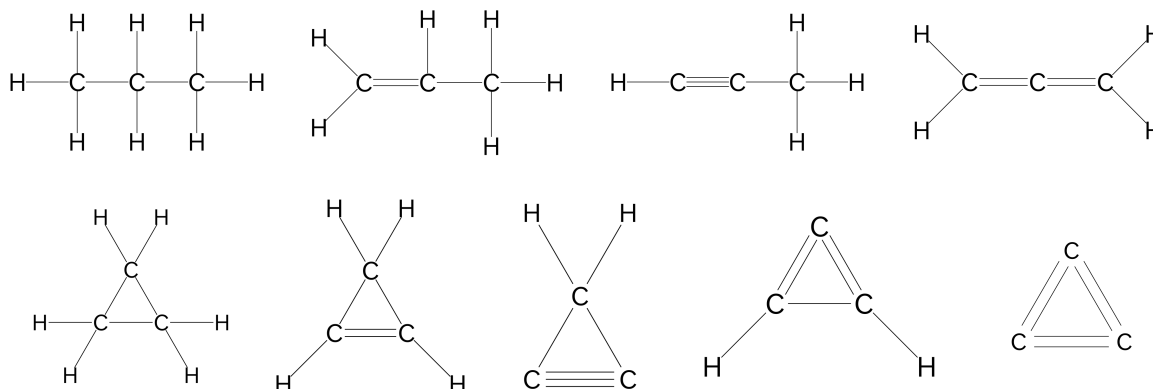
2025 年 10 月

1 炭化水素列挙 RTA とは

炭化水素とは、炭素と水素からなる化合物のことです。炭素 2 個でできる炭化水素の分子を列挙すると、以下の 4 種類になります。



炭素 3 個でできる炭化水素の分子を列挙すると、以下の 9 種類があることが分かります。



炭素を 4 個, 5 個, 6 個, ... と増やしていくと, 37 種類, 146 種類, 772 種類, ... とどんどん増えていきます。とても手作業では数えられないので, コンピューターで数えることになります。これをどこまで高速化できるか, という遊びが**炭化水素列挙 RTA** です。

2 講演で扱うこと

以下のトピックのうちいくつかを, 時間の許す範囲で紹介します。途中, 行列を使った議論が出てくるので, 線形代数のごく基礎的な内容については既知とします。

- グラフ理論に入門し, 炭化水素列挙をグラフの問題に焼き直す
- 基本的な探索アルゴリズムを用いて列挙する方法を考える
- 枝刈りを利用して探索範囲を絞る
- 不変量をうまく見つけて探索範囲を絞る
- 分子構造の対称性を活用して探索範囲を絞る