



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Study on Atom-to-Atom Mapping Using Ising Computing [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	Mohammad, Ali
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(総合化学)
Dissertation Number	甲第16539号
Issue Date	2025-06-30
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/95721
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Mohammad_Ali_review.pdf, 審査の要旨



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（総合化学） 氏名 ALI Mohammad

審査担当者	主査	教授	武次 徹也	(産業技術総合研究所)
	副査	教授	小松崎 民樹	
	副査	教授	高橋 啓介	
	副査	教授	伊藤 肇	
	副査	主任研究員	水野 雄太	

学 位 論 文 題 名

Study on Atom-to-Atom Mapping Using Ising Computing
(イジング計算を用いた原子間マッピングの研究)

化学反応は化学構造の変化を伴う現象であり、反応物中の各原子が生成物中のどの原子に対応するかという問いは、古くから議論されている。本研究では、反応物と生成物の原子間に対応関係を構築する「原子対応マッピング (Atom-to-Atom Mapping, AAM)」に着目している。近年、AAM はケモインフォマティクス分野における様々な応用に不可欠な要素となっているが、未知または複雑な反応に対して短時間で高精度な AAM を実現することは、組合せ的計算量爆発や適切な反応則の適用が困難である例も多いことが知られており、依然として大きな課題であった。

本研究では、特定の反応則に依存せず、反応における結合の切断および形成を最小限に抑えることを作業仮説として設定し、その条件下、“全ての”原子対応候補を全列挙する新たな AAM アルゴリズムを提案するものである。この組合せ最適化問題に対処するために、本研究では複雑な最適化問題を高速に解く手法として注目されるイジング計算 (Ising Computing) を導入した。その結果、37 原子からなる反応など従来手法のアルゴリズムでは 4.9×10^5 年ほど掛かるところを 1 時間以下で全列挙するなど、本手法は従来法と比較して計算時間の大幅な短縮を実現し、反応則非依存の AAM を実用的な時間内で行えることを実証した。さらに、本アルゴリズムはベンチマークデータセットにおいて一貫して正確な原子対応を導出し、最適なマッピングを網羅的に列挙することの重要性を示した。本研究のアプローチは、イジング計算を用いることでこの課題に対して有効な解を提供できることを明らかにしている。以下に、この論文の概要を示す。

本論文は以下の 5 章で構成される。

第 1 章「序論」では、化学反応における AAM の役割と本研究の動機、および研究目的について説明している。

第 2 章「従来手法とその限界」では、従来の AAM 手法について概説し、手動によるマッピングおよび各種自動化アルゴリズムとその限界について整理している。さらに、AAM をグラフ理論の問題として定式化する方法と、その際に直面する課題についても詳解している。

第 3 章「提案手法」では、組合せ最適化問題の解法としてのイジング計算の原理を紹介した後、最大クリークの全列挙に基づくアルゴリズムについて述べ、開発した AAM への応用方法を詳細に解説している。

第 4 章「結果と考察」では、提案アルゴリズムの計算性能と化学的妥当性に関する評価を行っている。最大クリーク列挙に要する計算時間の比較、AAM 結果の精度評価を通じて、本手法の有効性を検証し、最適な原子対応を全て列挙することの必要性について考察している。特に、複数の既存手法いずれにおいても、挙げられなかった原子対応が現実的に起こりえる反応であることを考察し、計算時間の迅速化だけでなく、本開発手法の優位性を具体的に示している。

第 5 章「結論」では、本研究の主要な成果を総括し、提案手法の利点と限界を整理し、さらに、今後の研究の展望についても述べている。

以上が本論文の要旨である。これを要するに、化学反応における原子マッピング (AAM) に対する新たな方法論を開発し、提案手法は、反応物と生成物の原子間の対応のうち開裂・生成する結合の数が最小になるものを求めるという作業仮説に基づき、AAM 問題を最大クリーク問題とよばれる数学の

問題に落とし込むものである。最大クリーク問題を解く従来アルゴリズムでは、数十原子の問題を解くにも天文学的な時間を要するが、本手法ではイジング計算を用いた独自の列挙アルゴリズムを適用することでその計算量的困難の解決に成功している。さらに既知の反応則ベース/機械学習ベースのAAM手法との比較を通じて、本手法の化学的な利点も明らかにしている。

よって著者は、北海道大学博士（総合化学）の学位を授与される資格あるものと認める。