

Folding of the Randomly Triangulated Surface ¹

北里大学 理学部 守 真太郎 ²

自己排除高分子の折り畳みに関連して Meander 問題を取り上げ、研究の流れを概観する。

1 幾何学的物体の折り畳み問題

幾何学的物体とは「Geometric Object」を日本語に直訳したものである。念頭においているのは、高分子、脂質膜（液体膜）、高分子化膜、ゲルといった高分子物理で登場する物質や、超伝導や流体力学での磁束、渦線、相転移などでの界面で、それらの共通点は熱的に激しく揺らいでいることである。また、量子重力での時空というの、揺らぐ原因は「量子論」と異なるが、熱的なゆらぎと量子論的なゆらぎの類似から Geometric Object の対象となる。こうした、幾何学的物体の統計物理や量子論を展開する上で、その状態を全て数え上げることが基本であり、そのためには連続体モデルより格子モデルのほうが都合がよい場合がある。以下、自己排除高分子のシンプルなモデルを導入し、その状態の数え上げと密接に関連する Meander 問題の最近の発展 [1] を解説する。

1次元の幾何学的物体であるポリマー（高分子）を考える。ポリマーとは、モノマーとよぶ構成単位が1次元的に連なってできた物質である。もっともモノマーという現実の物質を重合して1次元の長い物体（ポリマー）にするという文字どおりの意味でモノマーという単語を使うこともあれば、曲げ弾性とよばれる曲げに対する抵抗がなくなる長さのスケールでポリマーを切った場合の1単位をモノマーと呼ぶこともある。

図1ではモノマーを黒丸で、モノマーをつなぐボンドを実線で表した。モノマーの総数は $N + 1$ 個、それらに番号 $i = 1, 2, \dots, N + 1$ をふり、 i 番目のモノマーと $i + 1$ 番目のモノマーをつなぐボンドの（規格化された）接線ベクトルを \vec{t}_i で表すとする。単純化のためにボンドの長さは一定とし、モノマー間の相互作用も無視、また、ボンドのねじれを考えないとすると、モノマーでのボンドの折れ曲がりのみでポリマーのエネルギーは決まることになる。さらに単純化して、ボンドの曲げのエネルギーを接線ベクトルの内積で与えるとする。すると、ポリマーのエネルギーは、曲げ弾性係数を J として、

$$E = -J \sum_{i=1}^N \vec{t}_i \cdot \vec{t}_{i+1} \quad (1)$$

¹この原稿は、2003年12月の基研研究会「確率モデルの統計力学」の講演内容です。講演では幾何学的物体の折り畳み問題一般を扱いましたが、この原稿では自己排除高分子の折り畳みと Meander 問題のみを扱っています。

²E-mail: mori@sci.kitasato-u.ac.jp

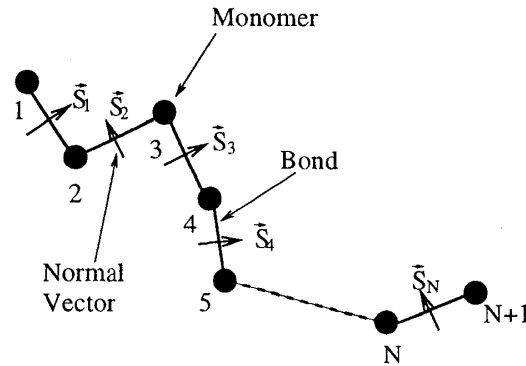


図 1: 高分子、モノマー、ボンド

となる。二次元空間では、接線ベクトル \vec{t} の代わりに、ボンドの法線ベクトル \vec{S} が一意に（ボンドを右から左に横切る方向）定まり、エネルギーは次の式で与えられる。

$$E = -J \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \quad (2)$$

この高分子のモデルを一次元空間に埋め込むことを考える。つまり、一次元空間中の高分子の問題を考える。すると、ボンドはモノマーをヒンジとして完全に折れ曲がっているか、完全に延びた状態のどちらかの状態だけを取りうることになる。ボンドがのびた平らになる場合のエネルギーは $-J$ 、180度完全に曲がっている場合のエネルギーは J となる。法線ベクトルの向き \vec{S}_i

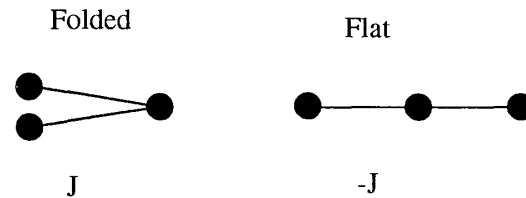


図 2: 高分子を一次元空間に埋め込んだ場合の 2 つのボンドの状態。完全にのびた状態 (Flat)、完全に折れ曲がった状態 (Fold) の 2 つの可能性がある。曲げ弾性係数を J とする。

は、埋め込まれた際に埋め込む一次元空間の法線ベクトルとおなじ向きか、逆向きかの 2 つの場合しかなく、対応してイジングスピン変数 $S_i = \pm 1$ を導入することができる。系のエネルギーは

$$E = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} \quad (3)$$

という一次元イジング模型とおなじものになり、系の熱力学的物理量の計算は容易である。また、状態の数も単に 2^N で与えられる。

しかし、自己排除を考慮して、次のふたつの状態を区別すると問題は一気に難しくなる。図 3 では、3 つのモノマーからなる 2 つのボンドの状態を示した。自己排除を考慮しない場合、いわゆるファントム (Phantom) の場合、モノマーはおなじ場所に来ることができるので、図に示したふたつの状態を区別する必要はない。一方、自己排除 (Self-Avoidance) を考慮する場合、ふたつの

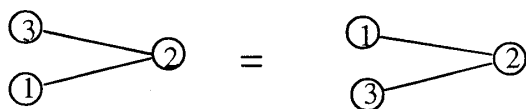


図 3: 高分子を一次元空間に埋め込んだ場合の 2 つのボンドの状態。自己排除を考慮しない (Phantom) 場合、2 つの状態を同一視する。自己排除を考慮した場合、1 番目と 3 番目のモノマーはおなじ場所に来ることはできず、1 次元空間に埋め込んだ場合でも、上にあるのか下にあるのかを区別しなくてはならない。

モノマーがおなじ場所に来ることは禁止される。一次元空間に埋め込んだ場合、無限に小さなモノマー、無限に細いボンドを考えると、モノマーやボンドは重なることはできるが、図に示したふたつの状態は区別する必要がある。この場合、一次元イジング模型の計算をそのまま使って系の熱力学を議論することはできず、状態の数え上げの問題すら非常に難しい問題となる。

2 自己排除高分子の折り畳みと Meander 問題

自己排除ポリマーの折り畳まれた状態を数え上げる問題は、Meander 問題に関連して古くから研究されてきた。Meander³とは「曲がりくねった道」を意味する言葉である。数学では、「半無限の線を、 n 個の交点で自己交差せずに結ぶ場合の数を求める問題」として定式化される。半無限の線を「川」、川の端を「池」と考えると、「池」から流れ出した川に n 個の橋があると、それらの橋を自己交差せずに結ぶ「道」の施設の仕方の場合の数を数え上げる問題ということもできる。

たとえば、図 4 に橋が 1 本、2 本の場合の Meander を、また図 5 には橋が 3 本の場合の Meander を示した。Meander 数 M_n^k で、道の数が k 、橋の数が n での場合の数を表すとする。以上の図

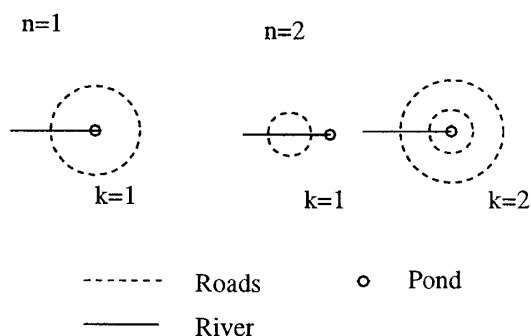


図 4: 橋の数 n が、 $n = 1, 2$ の場合、道の数 k の場合の Meander。Meander 数は $M_1^1 = 1, M_2^1 = 1, M_2^2 = 1$ となる。

から

$$M_1^1 = 1, M_2^1 = 1, M_2^2 = 1, M_3^1 = 2, M_3^2 = 2, M_3^3 = 1$$

となるのがわかる。

³正確には、半無限の線の場合を Semi-Meander、両端のない無限の線の場合を Meander と区別する。Meander は Semi-Meander の特殊な場合（巻く付き数ゼロの Semi-Meander）であることがわかっており、ここではより本質的な Semi-Meander のみを扱う。また、Meander とは Semi-Meander の意味で用いるものとする。

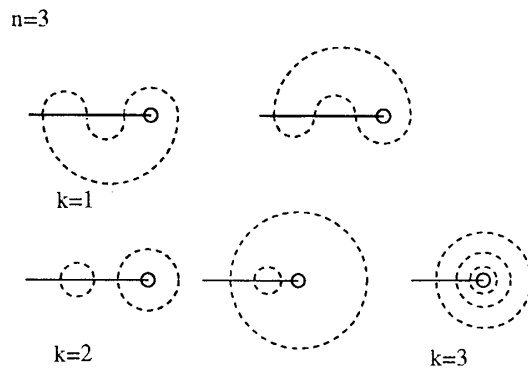


図 5: 橋の数 n が、 $n = 3$ の場合、道の数 k の場合の Meander。Meander 数は $M_3^1 = 2, M_3^2 = 2, M_3^3 = 1$ となる。

Meander 問題と高分子の折り畳み問題の関係を解説しよう。高分子を完全に、つまり高分子全体を一つのボンドに完全に重ねる折り畳み状態 (Compactly Folded State) と Meander との間には 1 対 1 の対応関係がある。図 6 を参照してほしい。一番上の、台に固定された 2 個のボンドか

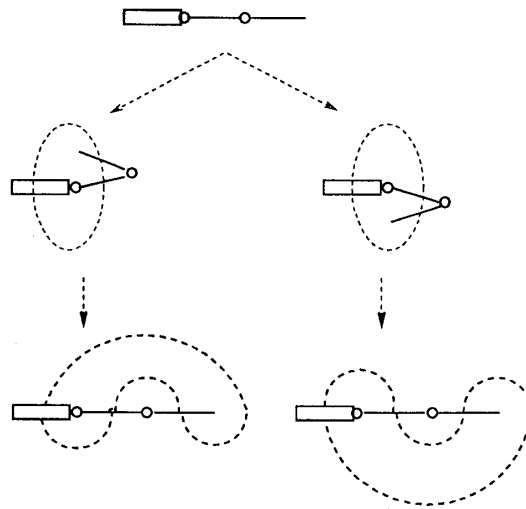


図 6: コンパクトに折り畳まれた高分子と Meander の対応関係

らなる高分子をコンパクトに折り畳むことを考える。この場合、蝶番にあたるモノマーは 1 個であり、真ん中の図にあるように、右端のボンドを中央のボンドの上に折り畳むか、下に折り畳むかの 2 通りしかない。このコンパクトに折り畳まれた状態に Meander を対応させるには、まず折り畳まれた高分子を、図で示したように台とボンドを貫く点線を描く。そして、高分子の右端を引っ張り出して伸ばした状態にし、右端を「池」、高分子と台を「川」、点線を「道」とみなせばよい。橋の数はボンドの数 + 1、道の数 k は $k = 1$ となる。逆に Meander から出発してコンパクトに折り畳まれた高分子の状態を構成すること、また、これらのマップは互いに逆であることもわかっている。よって、 n 個のモノマーからなる高分子がコンパクトに折り畳まれた状態と橋の数が $n + 1$ 、道の数 $k = 1$ の meander は 1 対 1 に対応することが示されたことになる。

また、一般の、必ずしもコンパクトではない、折り畳まれた高分子と一般の k の Meander の対

応関係（図7を参照）もある。この場合、折り畳まれた高分子の（折り畳まれたときの）長さの

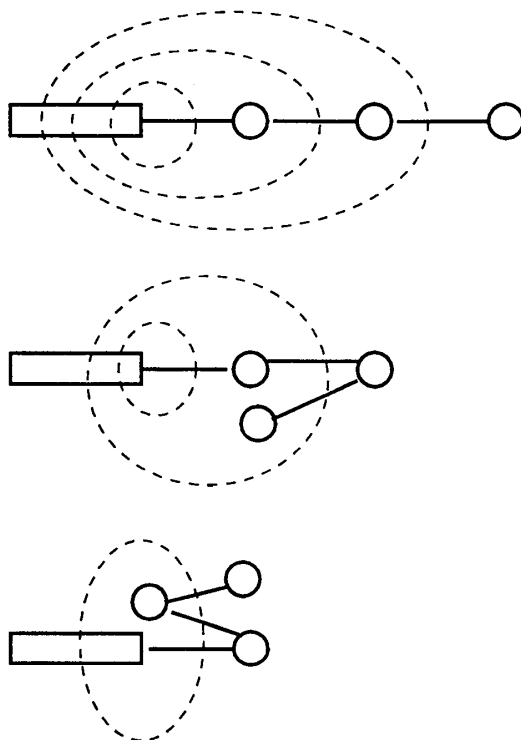


図 7: コンパクトに折り畳まれた高分子と Meander の対応関係

分だけ点線を描くため、道の数是一般に複数になる。たとえば、図に示したボンドの数が $N = 3$ の高分子を伸びた状態から折り畳んでいく課程は、 $n = 6, k = 3$ の Meander から $n = 5, k = 2$ の Meander、最後のコンパクトに折り畳まれた高分子は $n = 4, k = 1$ の Meander に対応する。

次の表は $n \leq 9$ の Meander 数を表したものである。この表は計算機で数え上げることにより得られたものである。数え上げの方法は、他のさまざまな近似法、数値計算の方法の基礎となるものなので後に解説する。

表をみながら Meander 数の性質をのべよう。まず、 $k = n$ の場合、可能な道の施設の仕方は池を中心とした同心円のみであり $M_n^n = 1$ となる。次の $k = n - 1$ の場合は、隣り合った橋のペアを結ぶ最小の円と、それ以外の橋は池を中心とする同心円となる場合で、最小の円の可能な組み合わせは $n - 1$ 通りなので、 M_n^{n-1} となる。

$$M_n^n = 1 \quad \text{and} \quad M_n^{n-1} = n - 1 \quad (4)$$

このように、対角線近傍の Meander 数は比較的容易に計算でき、 $M_n^k (k \geq n - 7)$ については解析的な結果が得られている。

表の数を列にそって和を取るとカタラン (Catalan) 数 C_n となる。カタラン数の定義は

$$C_n = \frac{1}{2n+1} {}_{2n+1}C_n = \frac{2n!}{n!(n+1)!} \quad (5)$$

表 1: Meander 数 M_n^k 。 n は橋の数、 k は道の数を意味する。 $(1 \leq n \leq 9)$ $n \leq 29$ までの結果が得られている。

$k \setminus n$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1	1	2	4	10	24	66	174	504
2	0	1	2	6	16	48	140	428	1308
3	0	0	1	3	11	37	126	430	1454
4	0	0	0	1	4	17	66	254	956
5	0	0	0	0	1	5	24	104	438
6	0	0	0	0	0	1	6	32	152
7	0	0	0	0	0	0	1	7	41
8	0	0	0	0	0	0	0	1	8
9	0	0	0	0	0	0	0	0	1

であり、 $C_1 = 1, C_2 = 2, C_3 = 5, C_4 = 14$ となる。つまり、 Meander 数 M_n^k と C_n の間には

$$\sum_{k=1}^n M_n^k = C_n \tag{6}$$

が成立する。この関係はカタラン数 C_n が位数 n (橋のペアの数) のアーチの種類の数であること、また、 Meander はアーチと対応することから理解できる。アーチというのは、無限の直線上の n ペアの橋を上半平面で交差せずに結んで得られる図形 (図 2 参照) のことである。アーチの種類

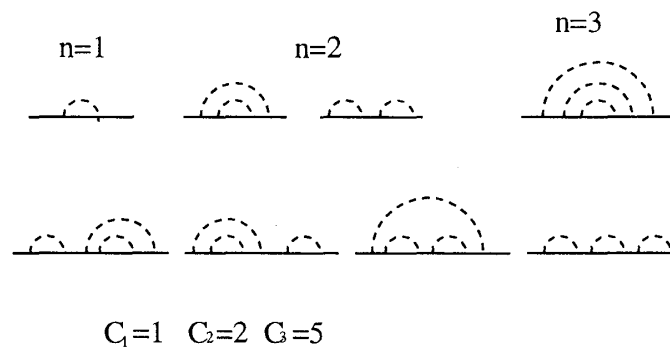


図 8:

の数を与えるのがカタラン数である。たとえば、図 2 には、位数 $n = 1, 2, 3$ の場合のアーチを示した。アーチの種類はそれぞれ 1 種類、 2 種類、 5 種類で、カタラン数 C_1, C_2, C_3 と対応していることがわかる。

アーチの種類数を求め、それがカタラン数で与えられることを見よう。それには漸化的な関係を用いる。まず、左端の橋からでていく道がつながっている橋の位置を $2j+2 (j = 0, 1, \dots, n-1)$ で示す。すると、図 2 からわかる通りいま結んだペアの内側には位数 j のアーチが入り、外側には位数 $n-j-1$ のアーチがくる。位数 n のあらゆるアーチの種類数を C_n と書くと、次の漸化

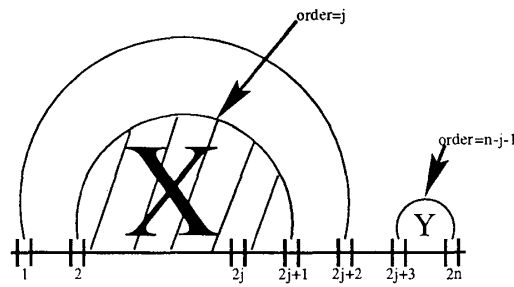


図 9:

式が得られる。

$$C_n = \sum_{j=0}^{n-1} C_j \times C_{n-j-1} \quad \text{with } C_0 = 1 \tag{7}$$

母関数 $C(x)$ を導入すると

$$C(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n = 1 + C_1 x + C_2 x^2 + \dots \tag{8}$$

$C(x)$ は次の代数的関係式を満たすことがわかる。

$$xC(x)^2 = C(x) - 1 \tag{9}$$

これを解くことにより母関数 $C(x)$ が得られる。

$$C(x) = \frac{1 - \sqrt{(1 - 4x)}}{2x} \tag{10}$$

テイラー展開すると、式 (5) を再現することがわかる。

アーチと Meander の関係は Meander の Open-River 表示から理解できる。図 10 を参照してほしい。図の左側の $n = 3$ の Meander に対して川を 2 重化し、そのまま扇を開くように 180 度まで開いていく。すると、右図が得られるが、この図形は上半分がアーチ、下半分が同心円のアーチ (Rainbow) となる。

$$\text{Meander} = \text{Arch} + \text{Rainbow} \tag{11}$$

こうして得られたものを Open-River 表示での Meander と呼ぶ。すると、全ての Meander を考えることは、Rainbow はそのまま、上半分のアーチについて全てのものを考えることになる。つ

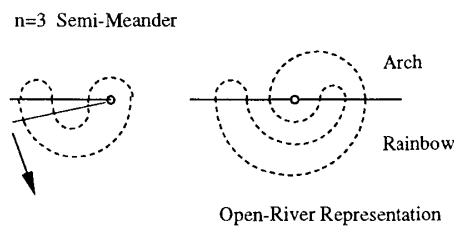


図 10: Arch + Rainbow = Meander

まり、Meander と Arch は 1 対 1 に対応し、よって Meander 数の道の数 k についての和がアーチの種類の数であるカタラン数となることがわかる。

以上、Meander の定義、性質について述べてきたが、重要な問題は高分子のコンパクト折り畳みに対応した $k = 1$ の Meander である。また、 $k \ll n$ の場合の Meander 数にも興味がある。特に、 $n \gg 1$ での漸近的な振る舞い

$$M_n^k \simeq \frac{R_k^n}{n^{\gamma_k}} \quad (12)$$

において、係数 R_k 、臨界指数 γ_k を求めたい。また、道の数に対する Fugacity q を用いて Meander 数から定義された Meander 多項式 $M_n(q)$

$$M_n(q) = \sum_{k=1}^n M_n^k q^k \quad (13)$$

も興味ある量である。この多項式は、 $q = 1$ ではカタラン数になり、また、 $q \rightarrow \infty$ では、 $M_n^n = 1$ より

$$M_n(1) = C_n \text{ and } \lim_{q \rightarrow \infty} M_n(q) \simeq q^n \quad (14)$$

となることがわかっていて、 $1/q$ 展開の出発点となる。

Meander の研究方法には以下のものがある。

- 数え上げる (Enumeration)
- モンテカルロ法
- Temperley-Lieb 代数
- 転送行列の方法
- 行列模型の方法

数え上げというのは、 $n = 1$ の Meander から出発して、漸化的に n のおおきな Meander を構成していくものであり、 $n = 29$ までの結果が知られている。モンテカルロ法も、基本は数え上げで用いた漸化的な構成方法である。ただし、数え上げ法での「しらみつぶし」ではなく、漸化的な構成方法をランダムに行うことにより $n = 400$ 程度までの Meander のサンプリングを行うことを可能とする。ただし、ランダムに行う方法としては、最近研究がすすんでいる「Population Method」というランダムウォーカーを多数用意してパラレルに相空間を探索する方法を用いる。第 3 の Temperley-Lieb 代数の方法は、アーチとブレイド (組み紐) の対応関係を用いる。転送行列は、川の流れの方向を時間軸とした転送行列を考える数値的手法である。行列模型は、川と道が 4 本足の交差点で交わるランダムグラフであると Meander の問題を一般化し、さらに川の Fugacity p をゼロとする極限で Meander 多項式を求める手法である。

数え上げで用いる漸化的な Meander の構成方法を解説しよう。Open-River 表示での Meander は、下半分が Rainbow、上半分がアーチであった。そこで、アーチを漸化的に構成していけばよ

い。それには、図 11 に示されている二つの手順を位数の低いアーチに適用し、それによって位数の高いアーチを構成する。手順 1 は、アーチの中で外部に露出している道を切断し、そのまま外側にまわし、川に新たに付け加えられた橋のペアに接続する。下半分の Rainbow もそれにあわせて位数を 1 増やした Rainbow とする。この手順では道の数は増えず、単に橋のペアの数のみプラス 1 される。

$$n \rightarrow n+1 \quad k \rightarrow k \quad \text{手順 1 の場合} \tag{15}$$

第 2 の手順は、アーチの外側に新たな道を覆うように付け加えるものである。下半分の Rainbow は手順 1 の時と同様に位数を 1 増やす。この手順では橋のペアの数も道の一数もともに 1 プラスされる。

$$n \rightarrow n+1 \quad k \rightarrow k+1 \quad \text{手順 2 の場合} \tag{16}$$

あるアーチに対して、手順 1 をあらゆる外部に露出した道に左から順番に行い、それが終わると

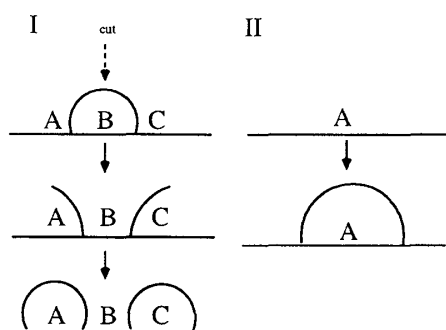


図 11: アーチの生成：手順 1（左図）と手順 2（右図）

手順 2 を行い、橋のペアの数（位数）が 1 大きなアーチを構成していく。その際、手順 1 では道の数は不変、手順 2 では道の数が 1 増加ということを記憶することにより、Meander 数 M_n^k を求めることができる。図 12 では、 $n \leq 3$ でのアーチおよび Meander の漸化的な生成の様子を示して

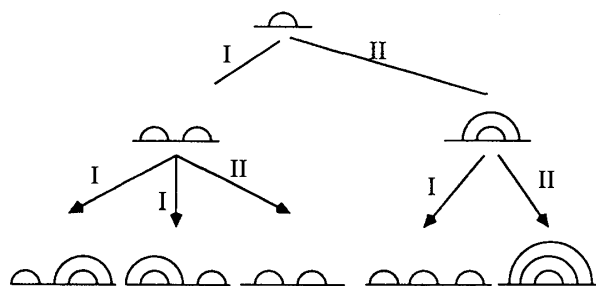


図 12: アーチ ($n \leq 3$)

いる。位数 1 ($n = 1$) のアーチを出発点として、左は手順 1 を行った場合のアーチ、右のアーチは手順 2 を行った場合である。よって、 $M_2^1 = 1, M_2^2 = 1$ と Meander 数が求まる。さらに、左側のアーチは 2 個の露出した道路があるので、手順 1 は二つの選択肢がある。よって、 $M_3^1 = 2$ となる。一方、 $n = 1$ での左側のアーチに手順 2 を行くと道の数が 1 増加して $k = 2$ となり、また、

$n = 1$ の右のアーチに手順 1 を行うと $k = 2$ のままで変化なし。よって、 $M_3^2 = 2$ となる。最後に $n = 2$ の右のアーチに手順 2 を行うと、 $k = 3$ となり、 $M_3^3 = 1$ であることがわかる。

こうして、露出した道路すべてに手順 1、それが終わったら手順 2 というのを繰り返すことにより M_n^k を計算することができる。しかし、この「しらみつぶし」の方法では $n \leq 29$ までで限界で、計算機がいくら早くなっても最大の位数はそれから 2、3 増えるだけである。なぜなら、カタラン数は漸近的に $C_n \simeq 4^n$ と振る舞うのでアーチの数は位数 n が 1 増えるごとに 4 倍となるからである。

そこで、アーチの相空間をランダムにサンプリングすることによりよりおおきな位数 n の Meander の諸量の平均、Meander 数 M_n^k を求めることが考えられる。そのためには、アーチの漸近的な構成をランダムに行うことにより、つまり、図 12 に示したような木構造をもつアーチの相空間上をランダムウォークすることによりサンプリングする方法が考えだされ、 M_n^k や他の量の統計的な性質が調べられた。その結果の一部が以下に示した Meander 数 M_n^k の漸近的な振る舞いの指数と係数である。

$$M_n^k \simeq \frac{R_k^N}{n^{\gamma_k}} \tag{17}$$

$k = 1$ の場合は O.Golinelli[2] が $n \leq 400$ までサンプリングすることにより、また、 $k \geq 2$ の場合は S.Mori[3] が $n \leq 100$ までサンプリングすることにより得たものである。まず、 $k = 1$ の場合は、

$$R_1 \simeq 3.5018(3) \text{ and } \gamma_1 = 2.056(10) \tag{18}$$

また、 $k \geq 2$ の場合は、次の表にまとめた。これらの結果から、エントロピーの係数 R_k は k に依

表 2: γ_k

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
γ_k	2.0	1.4	0.45	-0.57	-1.53	-2.53	-3.53	-4.53	-5.53	-6.6

表 3: R_k

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\log(R_k/3.5)$	0.0	0.005	0.003	0.001	0.001	0.0001	0.001	0.001	0.001	0.001

存しないこと、また、臨界指数 γ_k は k とともに変化し、系のトポロジー（この場合は成分の数）に強く依存することがわかった。

謝辞

京大基研研究会「確率モデルの統計力学」の世話人のみなさま、講師のみなさまありがとうございました。この講演で扱った研究分野は日本ではほとんど知られていず、紹介することができ

たのは幸いです。今回の原稿では書くことができなかった膜の折り畳み問題の部分の原稿やさらに詳しい内容は私のホームページ⁴ で公開していく予定です。

3 参考文献について

高分子、膜の折り畳み問題の総合報告は文献 [1] を参照のこと。

参考文献

- [1] P.Di Francesco, Matrix Model Combinatorics: Applications to Folding and Coloring, math-ph/9911002.
- [2] O.Golinelli, A Monte-Carlo study of meanders, preprint cond-mat/9906329 to appear in EPJ B(2000). E80 (1996), 1213.
- [3] S.Mori, in preparation.

⁴<http://sharaku.sci.kitasato-u.ac.jp/mori/index.html>