

二部グラフの完全マッチング ——共鳴理論からのアプローチ——

お茶大 人間文化研究科

大上 純子
Ohkami Noriko

1. 序

合同な正六角形が辺を共有することによりつながってできる図形, *hexagonal animal* は, 芳香族縮合多環炭化水素と呼ばれる一群の分子の, 炭素原子の骨格構造を表わしている。

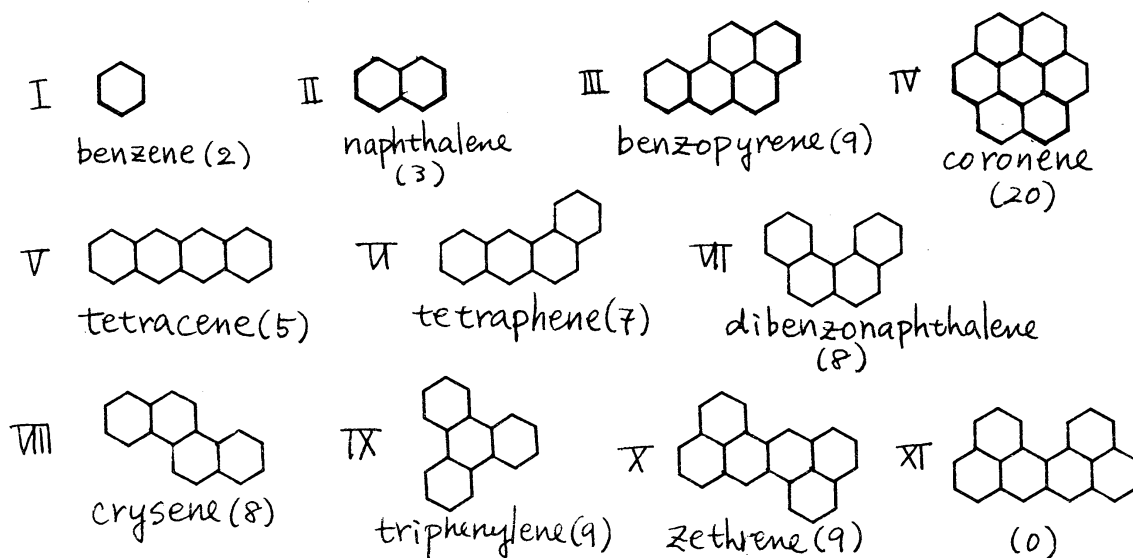


図 1. Polyhex graph の例

() 内の数字はグラフの完全マッチングの数。

図1に示したのはいくつかの hexagonal animal の例と、その構造をもつ分子の名称である。またそのような分子は、分子を構成する六角形の数により tetrahex, pentahex などと呼ばれ、一般には polyhex と呼ばれる。それらを特に数学的なグラフとみなしている時は polyhex graph と呼ぶ。さらに polyhex はその六角形の中心に点を置き、辺を共有している六角形の点同志を線で結んで得られるグラフが tree であるか non-tree であるかにより, catafusene と perifusene に分類される(図2)。 n 個の六角形よりなる polyhex の数え上げは非常に難しい問題であるが, catafusene の数については, Harary と Read により漸化式が与えられている。¹⁾

さて, polyhex graph でその構造を表わされる polyhex の性値は, 分子を表わす graph の matching に関する性値と非常に密接な関係にあることが化学の分野では古くから知られ

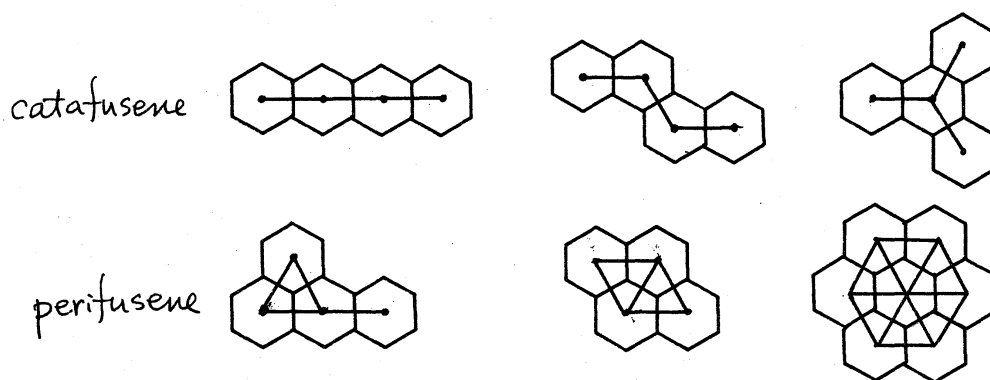


図2. Catafusene と Perifusene

ている。そして、共鳴理論の名のもとに polyhex graph の matching に関する問題が分子の性質と関連させて多く議論されてきた。ここでは詳細は省くが次の重要な二点だけ記しておく。

1. 化学的に安定な polyhex の炭素原子骨格を表わす polyhex graph には、少なくとも1つの完全 matching が存在する。逆に、完全 matching が不可能であるような polyhex graph に相当する分子は通常の条件下では存在しない。
2. 同数の炭素原子と水素原子からなる polyhex (このことはグラフの上では、次数2の点の数と次数3の点の数がそれぞれ等しいことと等価) では、完全 matching の数が最も大きいグラフに相当する構造を持った分子が化学的に一番安定である。つまり、図1中の物質 V — IX の中では V が最も不安定、IX が最も安定である。ここで 1, 2 は単に経験による法則ではなく、量子化学理論によってきちんと裏づけられたことだからである。

2-1 Sextet polynomial の定義

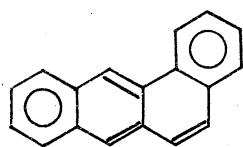
序に記したような理由により、polyhex の安定性をグラフと関連して議論しようとするとき、扱うグラフは polyhex graph のうちでも完全 matching が可能なものだけである。そ

ここでそのようなグラフの集合を P としよう。 $G \in P$ であるようなグラフ G に対し次のような定義をする。

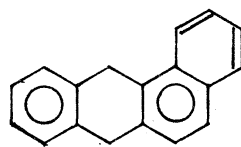
i) $G - r_i$: G からある六員環 r_i とそれに隣接する辺を全て除いた時できる G の部分グラフ。

ii) $M(G)$: G の完全マッチングの数。ここではグラフ中で二重線で描かれた辺がある完全マッチングに含まれた辺である。また、 $M(\phi) = 1$ である。

iii) $r(G, k)$: resonant sextet number. G の中から互いに resonant な k 個の六員環 (sextet)^{脚注} を選ぶ場合の数。ただし六員環 r_i と r_j は $M(G - r_i - r_j) \neq 0$ であるとき互いに resonant であるという。またグラフで表わす時、選ばれた resonant な sextet は六角形の中に丸を描いて表わすこととする。



resonant



not resonant

上記のような定義を用いると $G (G \in P)$ に対し sextet polynomial $B_G(x)$ は次式で定義される。²⁾

注：炭化水素分子において、benzene の六角形上にある 6 つの電子は非常に安定な核をなし、それを aromatic sextet と呼ぶ。そこからここでは六員環に対しこの語を用いた。

$$B_G(x) = \sum_{k=0} r(G, k) x^k$$

この多項式は数え上げ多項式であり, 問題は $r(G, k)$ を求めることにある。ただし $r(G, 0) = 1$ と定義する。図3に示したようにごく小さなグラフ

では $r(G, k)$ は “めのこ” で求められる。しかし, グラフが大きくなるにつれて手間は急速に増大してしまう。そのとき $B_G(x)$ は漸化式を使えば, より小さなグラフの $B_G(x)$ から代数的処理により求めることができるのである。

2-2 Sextet polynomial の性質

表1にグラフ I — X の Sextet polynomial を示した。表からわかるようにこの多項式には次の

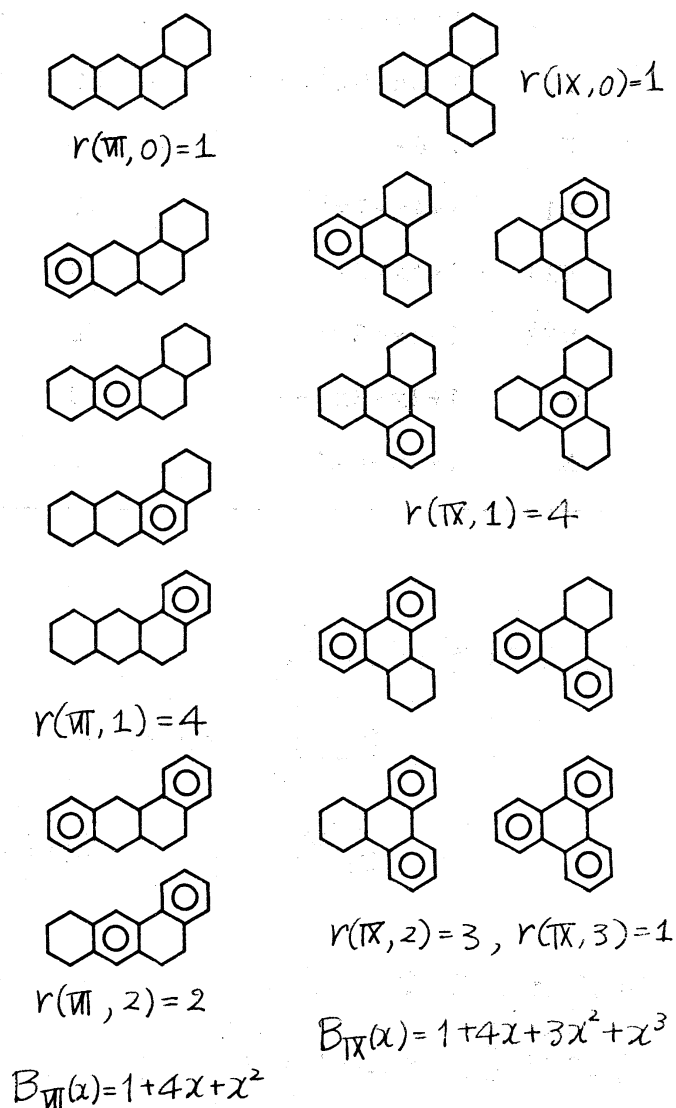


図3. Sextet polynomial の求め方

Table 1. Examples of Sextet polynomial

G	$B_G(x)$	$B_G(1)$	$B'_G(1)$	$M(G)$	$\sum M(G-r_i)$
I	$1+x$	2	1	2	1
II	$1+2x$	3	2	3	2
III	$1+5x+3x^2$	9	11	9	11
IV	$1+8x+9x^2+2x^3$	20	32	20	32
V	$1+4x$	5	4	5	4
VI	$1+4x+2x^2$	7	8	7	8
VII	$1+4x+3x^2$	8	10	8	10
VIII	$1+4x+3x^2$	8	10	8	10
IX	$1+4x+3x^2+x^3$	9	13	9	13
X	$1+4x+4x^2$	9	12	9	12

ような性質がある。

$$i) \quad B_G(1) = M(G)$$

$$ii) \quad \left. \frac{d}{dx} B_G(x) \right|_{x=1} = B'_G(1) = \sum_i M(G-r_i)$$

i) は G の完全マッチングの数に関するもの, ii) はグラフの部分分的性質の総和 (表2) で共に化学的には非常に意味のある量である。

2-3 性質 i) の証明

まず, Π を部分グラフとして含まない polyhex graph の集合

Table 2. The values of $M(G-r_i)$.The number in the sextet r_i is $M(G-r_i)$.

I		II		III		IV	
V		VI		VII		VIII	
IX		X					

matching patterns sextet patterns

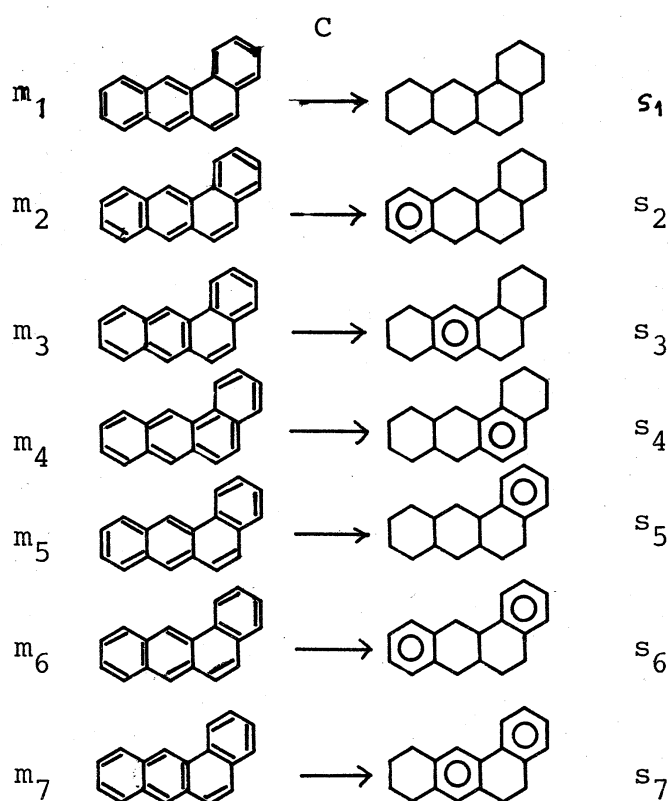


Fig. 4 Matching and sextet patterns

P_1 を考えてみよう。 G
 $(\in P_1)$ に対して i) は
 帰納法により簡潔に証
 明することができる (4
 -2 参照)。また別法と
 して, どの辺が完全マ
 ッチングに含まれるか
 を示す matching pattern
 と選ばれた resonant の
 sextet の位置を示す
 sextet pattern との間に
 1対1の関係が成立す

ることを利用する方法がある。ここではそれについて少し詳しく述べてみよう。

$\{m_i | i=1, 2, \dots, M(G)\}$ を $G \in P_1$ の matching patterns の集合, $\{S_i | i=1, 2, \dots, n\}$ を G の sextet patterns の集合とする。 m_i に対し operator $\mathcal{C}$ は, m_i 中で六員環の中に  のような構造をもつものの全てが resonant sextets であるような sextet pattern S_i を生成するものとする(図4)。ただしこの時 G は六角形の向きが  ではなく  の向きに置かれていなくてはならない。また, もちろん $\mathcal{C}$ として  の構造を resonant sextet とするような同様な operator を定義してもよいが, 結果は同じである。この時, 次のような Lemma を利用する(証明は原論文参照³⁾)。

Lemma $\forall G \in P$ に対し $\{m_i\}$ の中に  を1つももたない matching pattern (これを non-sextet pattern と呼ぶ。) がただ1つだけ存在する。

したがって,

Case 1. $\mathcal{C}(m_i) = S_i$, $\mathcal{C}(m_j) = S_j$ とするとき,
 $i \neq j$ ならば $S_i \neq S_j$ ($\because$ Lemma)
 $\therefore M(G) \leq n$

Case 2. S_i に対し resonant sextet  の位置に  を持つような matching pattern m_i が少なく

とも1つ存在する。($\because$ resonant sextet の定義より)。したがって $n \leq M(G)$ 。

Case 1, 2 より $M(G) = n$. Q. E. D.

また Sextet polynomial の性質 ii) を利用して容易に証明することができる。³⁾

2-4 Super sextet の導入

ところが, $G \in P-P_1$ であるような G では operator $\mathcal{C}$ を用させた時, 2つの matching patterns m_i, m_j から同じ sextet pattern s_i が生成してしまう(図5)。そこで, 六員環を取り巻く18員環 R_i

を考え, $M(G-R_i)$

が0ならば R_i

を super sextet

として Sextet

polynomial に x

の寄与をもつも

のとする。IVに

対する Sextet

polynomial は正

確には $B_{IV}(x) =$

Super sextet
を考えた時

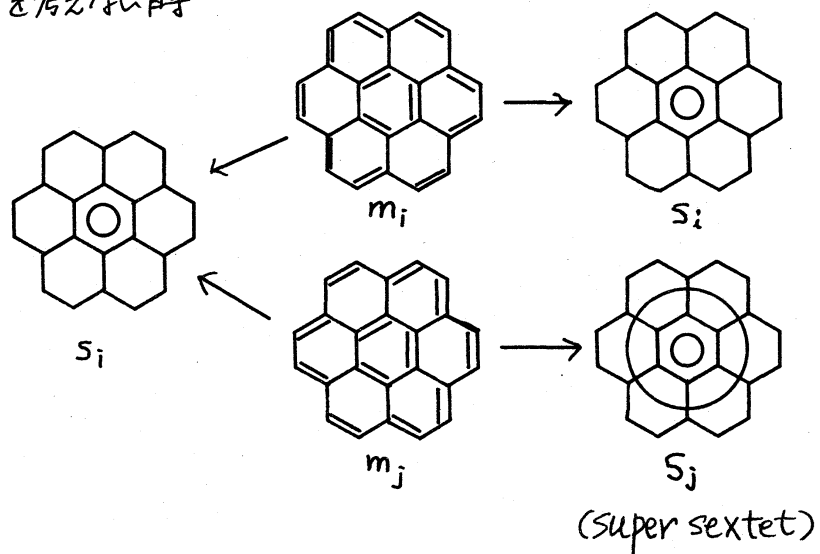
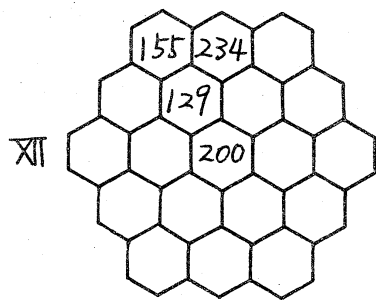


図5 Super sextet の導入

$1+7x+9x^2+2x^3$ に super sextet からの寄与 x を加えたものである。このような super sextet は G が大きくなると様々な形で現われる (図 6) が, 漸化式を用いて Sextet polynomial を求める際には, この super sextet による補正項も含めて計算することができる。



$$B_{XII}(x) = 1 + 27x + 162x^2 + 350x^3 + 310x^4 + 114x^5 + 15x^6 + x^7$$

$$B_{XII}(1) = M(XII) = 980$$

$$B'_{XII}(1) = \sum_i M(XII - \gamma_i) = 3305$$

Super sextet による寄与 (上段は x , 中段は x^2 , 下段は x^3 の寄与を $B_{XII}(x)$ にもつ。)

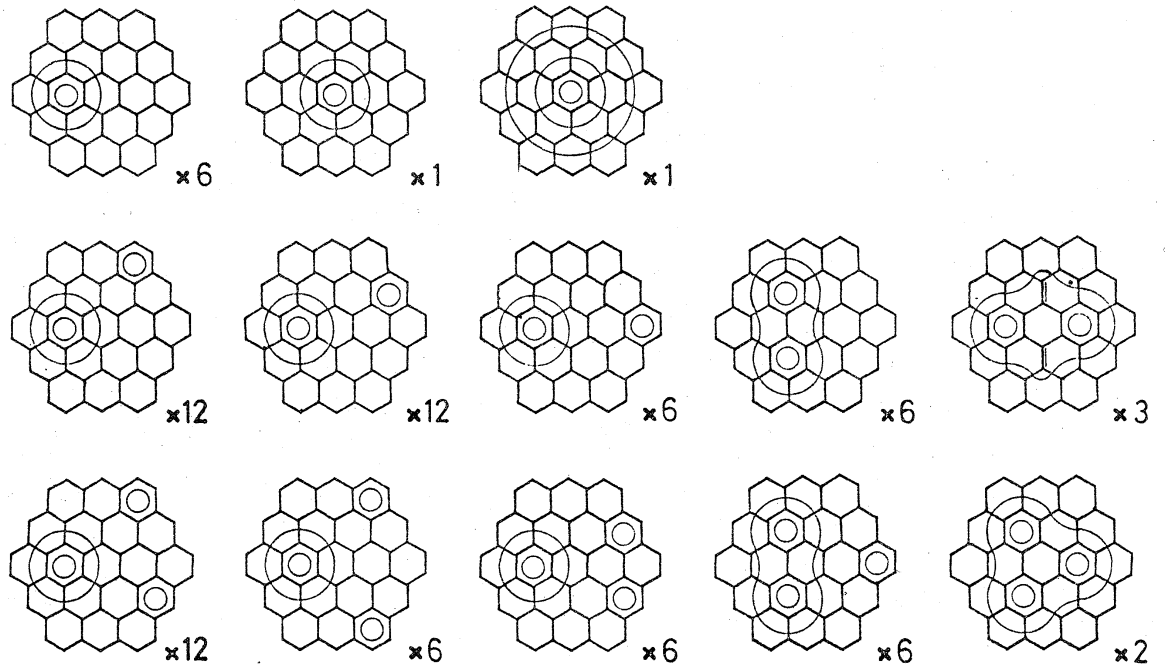
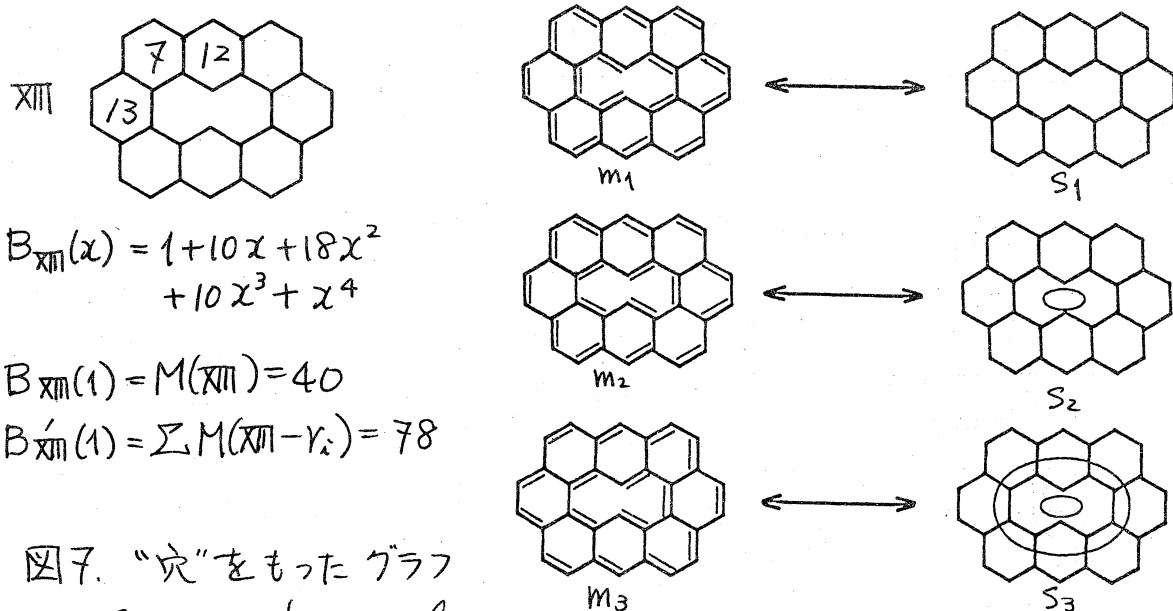


図6 大きなグラフでの super sextets.

2-5 “穴”をもった polyhex graph への拡張

グラフ XIII のように六員環によって作られる“穴”をもつグラフの場合, 3つの non-sextet patterns が存在してしまう(図7).
しかし, ここでも中央の十員環とそれを取り巻く22員環に enlarged sextet^(S₂), enlarged super sextet^(S₃) を定義すれば性質 i), ii) を満たすような sextet polynomial が得られる。六員環以外のものを含むグラフに対する sextet polynomial にはもはやさほどの化学的な意味での重要性はない。しかしながら, グラフ中の有限領域の周上の交互閉路の性質と, 完全 matching の数との関係というより一般的な方向が見えてくるのである。



matching patterns m_1, m_2, m_3 は共に non-sextet pattern に相当するが S_2, S_3 を定義することにより, i), ii), を満たす多項式が得られる。

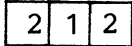
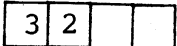
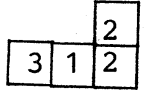
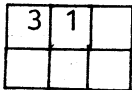
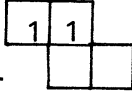
3-1 Domino polynomial

合同な正方形が辺を共有してつながることができるグラフのうち、やはり完全マッチングが可能なものの集合を $\mathcal{D}$ としよう。 $G \in \mathcal{D}$ に対し Sextet polynomial と同様な多項式 Domino polynomial $D_G(x)$ が次式で定義されている。⁴⁾

$$D_G(x) = \sum_{k=0} d(G, k) x^k$$

ただし $d(G, k)$ は G の中から k 個の互いに resonant な正方形 (sextet をもじってここでは quartet と呼ぶ) を選ぶ場合の数で、

Table 3. Examples of Domino polynomial

G	$D_G(x)$	$D_G(1)$	$M(G)$	$D'_G(1)$	$\Sigma M(G-r_i)$
1 *	$1+x$	2	2	1	1
	$1+2x$	3	3	2	2
	$1+3x+x^2$	5	5	5	5
	$1+4x+3x^2$	8	8	10	10
	$1+4x+2x^2$	7	7	8	8
	$1+6x+4x^2$	11	11	14	14
	$1+4x$	5	5	4	4

*: The number in the quartet r_i is $M(G-r_i)$.

2個の正方形 r_i と r_j は $M(G - r_i - r_j) \neq 0$ であるとき resonant であるという。いくつかの例を表3に示した。この Domino polynomial は sextet polynomial と同様な性質をもっており、

$$D_G(1) = M(G) \quad , \quad D'_G(1) = \sum_i M(G - r_i)$$

が成り立つ(表3)。そしてグラフ中の正方形に交互に+と-の符号をつけ次のような operator C' を G の matching patterns に対して定義する。

C' : +の符号を持つ正方形中に  のような交互閉路が存在するとき、その正方形を resonant quartet  とする。また、-の符号を持つ正方形中に  のような交互閉路が存在するとき、その正方形を resonant quartet  とする。

すると、 G の matching patterns と quartet patterns との間に1対1の関係が明らかになる(図8)。

さらに、図9のXIVのような構造を含むグラフでは sextet polynomial の時と同様 super quartet を導入しなければならぬ。グラフ XIV においては図9に示したように、36個の matching patterns に C' を作用させた時、2つの matching patterns m_1 と m_2 が q_1 に対応することになってしまう。そこで m_2 には super quartet ~~q_2~~ を導入し、matching patterns と

quartet patterns との間の 1対1 の関係が成り立つようにするのである。これにより Domino polynomial の持つ性質は保持することができ、そのグラフ理論的な証明はまだなされていない。

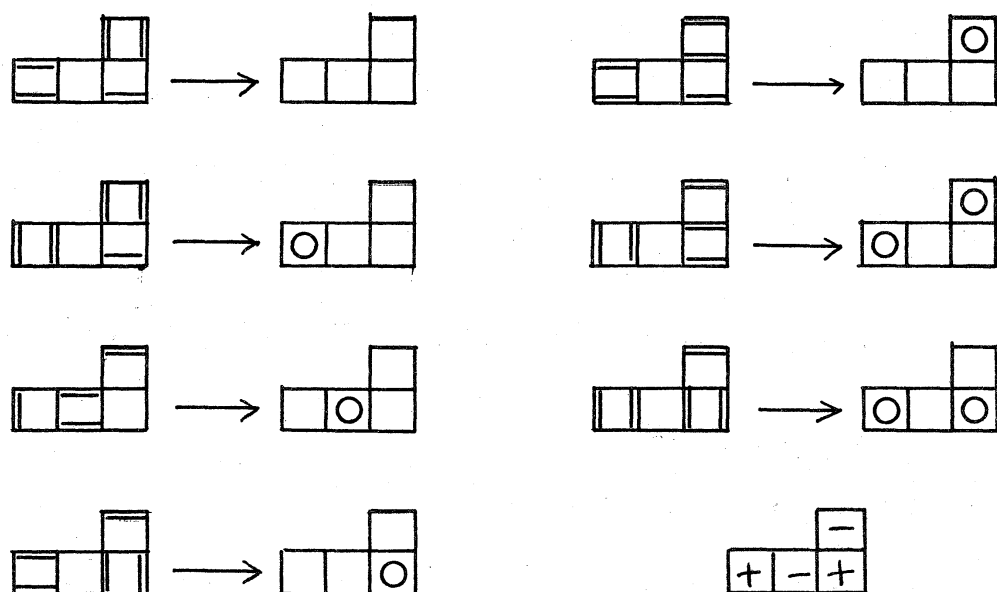


図8. Matching patterns と quartet patterns の対応

$$B_{XIV}(x) = 1 + 10x + 16x^2 + 8x^3 + x^4$$

$$B_{XIV}(1) = M(XIV) = 36.$$

$$B'_{XIV}(1) = \sum M(XIV - \gamma_i) = 70$$

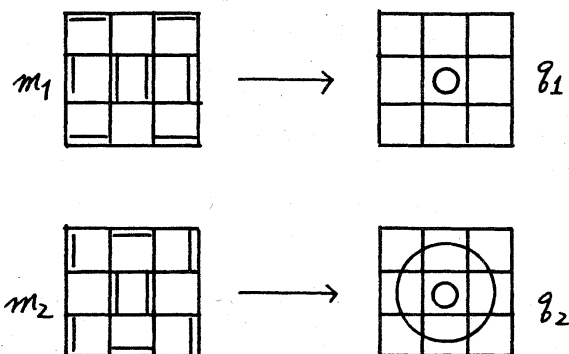
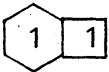
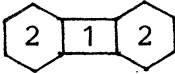
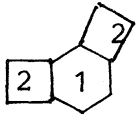
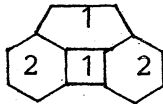


図9. Super quartet の導入

4-1 Ring polynomial

偶数員環が辺を共有してつながっているような二部グラフが polyhex graph や正方形がつながってできるグラフの一般化として考えることができる。このとき、グラフは有限領域の大きさが最小になるような形で表わされるものとする。そのようなグラフのうち、やはり完全 matching が可能なものの集合を A とする。 $G \in A$ に対し、前出の 2 つの多項式と同様な数え上げ多項式 Ring polynomial $R_G(x_4, x_6, \dots, x_m)$ が定義されている。ただし、ここでは異なった大きさの有限領域の周(以後これを ring と呼ぶ。)を考えることになるので、式の形は

Table 4. Examples of Ring polynomial

G	$R_G(x_4, x_6)$	$R_G(1, 1)$	$M(G)$	$R_G^-(1, 1)$	$\sum M(G-r_i)$
 *	$1+x_4+x_6$	3	3	2	2
	$1+x_4+2x_6+x_6^2$	5	5	5	5
	$1+2x_4+x_6+x_4^2$	5	5	5	5
	$1+x_4+3x_6+x_6^2$	6	6	6	6

*: The number in the ring r_i is $M(G-r_i)$.

多少複雑となる。G中の最大のringの大きさをmとすると、

$$R_G(\chi_4, \chi_6, \dots, \chi_m) = \sum_R r(G; k_4, k_6, \dots, k_m) \chi_4^{k_4} \chi_6^{k_6} \dots \chi_m^{k_m}$$

$r(G; k_4, k_6, \dots, k_m)$ はグラフGの中から互いに resonant な4員環を k_4 個, 6員環を k_6 個, ..., m員環を k_m 個選ぶ場合の数である(表4)。このとき, やはり

$$R_G(1, 1, \dots, 1) = M(G),$$

$$\frac{\partial}{\partial \chi_4} \frac{\partial}{\partial \chi_6} \dots \frac{\partial}{\partial \chi_m} R_G(\chi_4, \chi_6, \dots, \chi_m) = R'_G(\chi_4, \chi_6, \dots, \chi_m) \text{ とおくと}$$

$$R'_G(1, 1, \dots, 1) = \sum_i M(G - r_i)$$

が成り立つ。この関係はGが catafusene-type のもの, つまり ring 内に1点をおき点を共有している ring間の点を線で結ぶことによって得られる graph が tree であるときには漸化式を用いて帰納的に証明することができる。

4-2 $R_G(1, 1, \dots, 1) = M(G)$ の証明

Aに属するグラフのうち catafusene-type のものの集合を A_1 とする。また $G - r_i^0$ によりGから ring r_i のみに属するような辺と点を除いて得られるグラフを表わす。

まず, 1つの ring だけのグラフ G_0 を考えてみる。そ

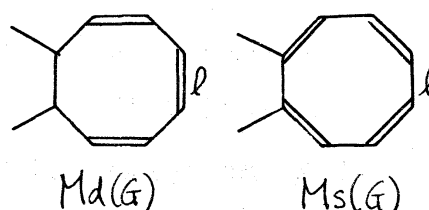
の ring の大きさを n とすれば, 明らかに

$$R_{G_0}(x_n) = 1 + x_n, \quad R_{G_0}(1) = 2 = M(G).$$

次に G より小さな A_1 に属するグラフでは $R_G(1, 1, \dots, 1) = M(G)$ が成り立つとする。 $\forall G \in A_1$ においては必ず 1 辺だけを他の ring と共有する 端の ring r_1 が存在する。 r_1 だけに属する辺のうちの 1 辺を l とすると, $M(G)$ は l を完全 matching に含むものの数 $M_d(G)$ と含まないものの数 $M_s(G)$ とに分けることができる。さらに右の図から

わかるように

$$\begin{aligned} M(G) &= M_d(G) + M_s(G) \\ &= M(G - r_1^o) + M(G - r_1) \end{aligned}$$



また r_1 の大きさを i とすれば

$$\begin{aligned} R_G(x_4, x_6, \dots, x_m) &= R_{G-r_1^o}(x_4, x_6, \dots, x_m) + x_i \cdot R_{G-r_1}(x_4, x_6, \dots, x_m) \\ \therefore R_G(1, 1, \dots, 1) &= R_{G-r_1^o}(1, 1, \dots, 1) + R_{G-r_1}(1, 1, \dots, 1) \\ &= M(G - r_1^o) + M(G - r_1) \\ &= M(G) \end{aligned}$$

Q. E. D.

A に属するグラフ全体を考えた時には, super sextet, super quartet に相当する補正が必要になるが, そのような補正が

完全マッチングの数を数え上げる上、必要は十分である
 ことの証明はなされてはいない。今後の課題である。

References

- 1) F. Harary and R. C. Read, *Proced. Edin. Math. Soc.*, 12(9), 1-13 (1970).
- 2) H. Hosoya and T. Yamaguchi, *Tetrahedron Lett.*, 52, 4659-4662 (1975).
- 3) N. Ohkami, A. Motoyama, T. Yamaguchi, H. Hosoya, and I. Gutman, *Tetrahedron*, 37, 1113-1122 (1981).
- 4) A. Motoyama and H. Hosoya, *J. Math. Phys.*, 18, 1485-1490 (1977).
- 5) I. Gutman, *Bull. Soc. Chim. Beograd*, 46, 17-22 (1981).