数理解析研究所講究録
第471巻 1982年 33-50

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　徳子
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。

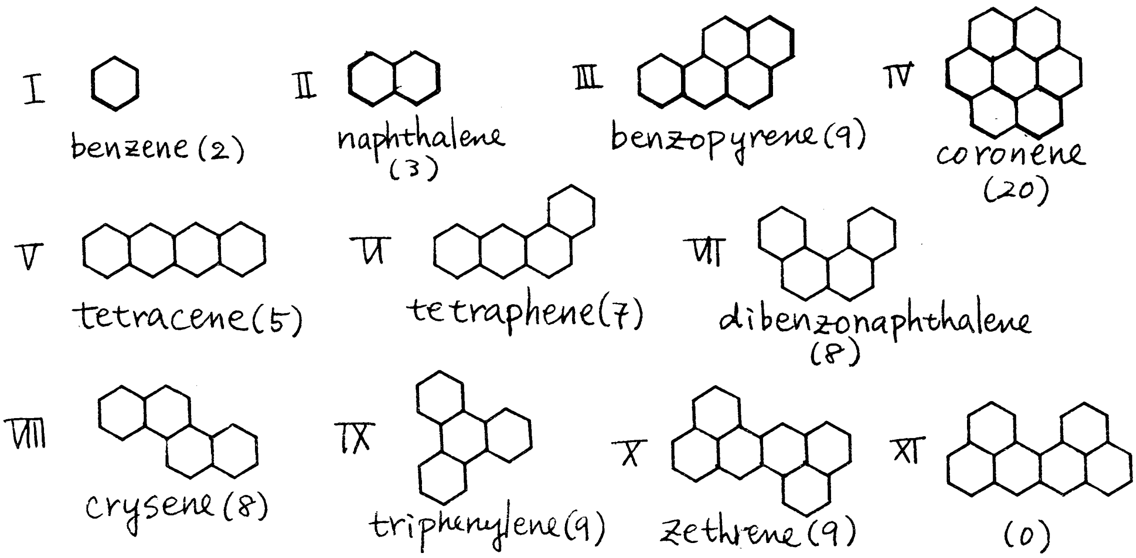


図1.　Polyhex graph の例
( )内の数字はグラフの完全マッチングの数

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 の性質は，分子を表わす graph の matching に関する性質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

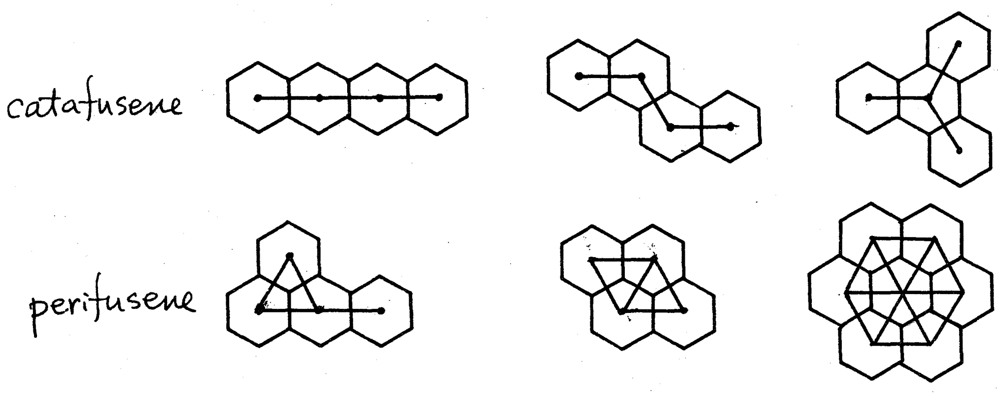


図2． Catafusene と Perifusene

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2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。図1のグラフⅪに物質名が入っていないのは，そのような物質が存在しないからである.　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の点の数と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されたことがらである。

2-1　Sextet polynomial の定義

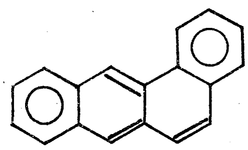
序に記したような理由により，polyhex の安定性をグラフと関連して議論しようとするとき，取扱うグラフはpolyhex graph のうちでも完全matchingが可能なものだけである。そ

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。

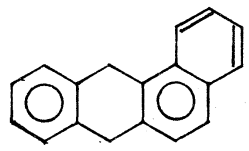
i) $G - r_i$ ： Gからある六員環r_iとそれに隣接する辺を全て除いた時できるGの部分グラフ。

ii) $M(G)$ ： Gの完全マッチングの数。ここではグラフ中で2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$G (\in P)$に対して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

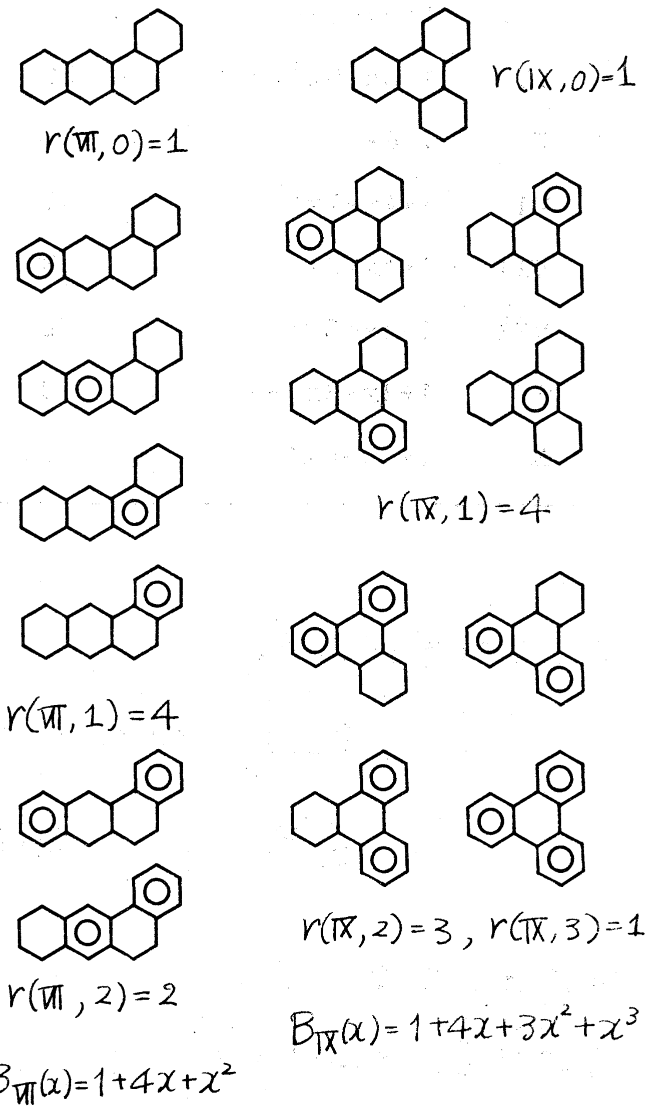


図3. Sextet polynomialの求め方

Table 1. Examples of Sextet polynomial

G	$B_G(x)$	$B_G(1)$	$B'_G(1)$	M(G)	$\Sigma\ M(G-r_i)$
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) $B_G(1)=M(G)$

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

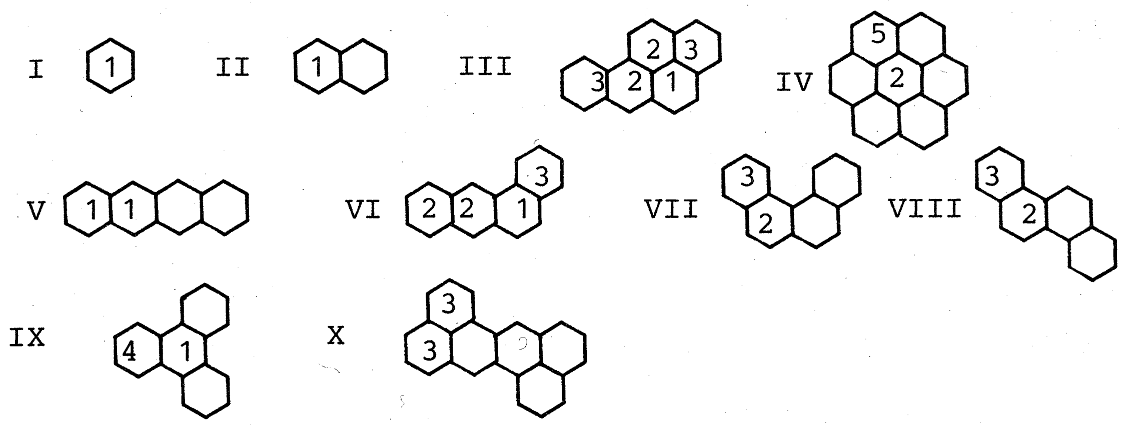
i)はGの完全マッチングの数に関するもの，ii)はグラフの部分的性質の総和（表2）で共に化学的には非常に意味のある量である。

2−3　性質 i)の証明

まず，IV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 $M(G-r_i)$.



matching patterns sextet patterns

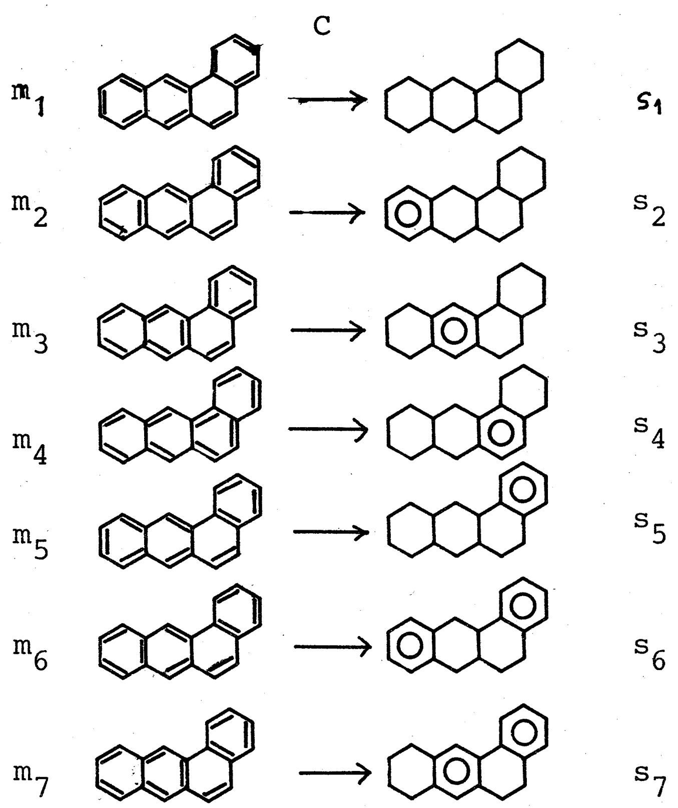
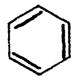
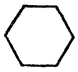
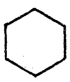


Fig. 4 Matching and sextet patterns

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 な 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。

$\{m_i \mid i=1, 2, \cdots, M(G)\}$ を $G(\in P_1)$ の matching patterns の集合, $\{S_i \mid i=1, 2, \cdots, n\}$ 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]）。

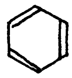
Lemma　$^\forall G \in P$ に対し $\{m_i\}$ の中に  を1つももたない matching pattern (これを non-sextet pattern と呼ぶ.) がただ1つだけ存在する。

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 $S_i \neq S_j$ （∵ Lemma）

$\therefore \quad M(G) \leq n$

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。(∵ 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) は i) 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 C を作用させた時，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，$M(G-R_i) \neq 0$ 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 $B_{IV}(x) =$

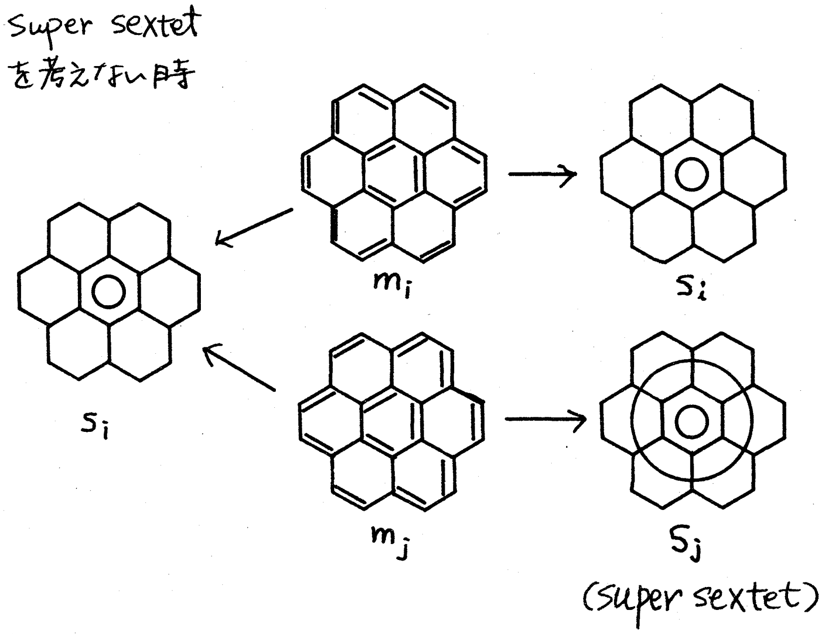
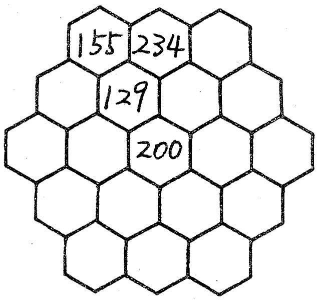


図5 Super sextet の導入

$1+7x+9x^2+2x^3$ 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。

XII 

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

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

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

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。）

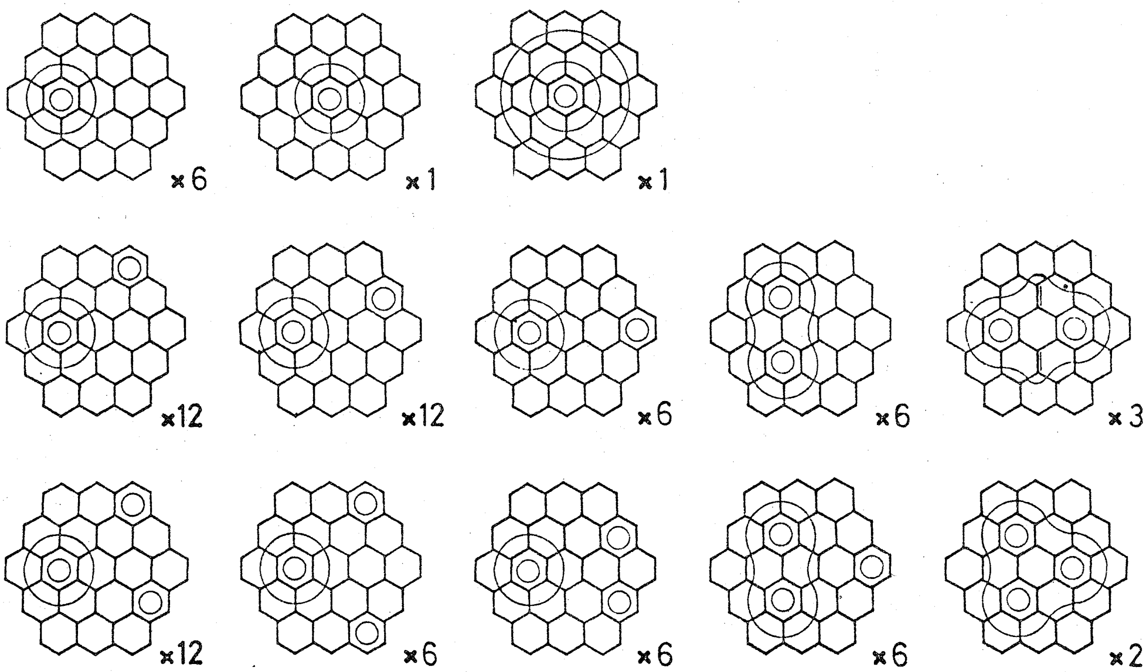
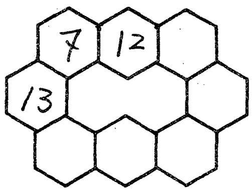


図6　大きなグラフでの super sextets

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 (S_2), enlarged super sextet (S_3) 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。

XIII 

$$B_{XIII}(x) = 1+10x+18x^2+10x^3+x^4$$

$$B_{XIII}(1) = M(XIII) = 40$$

$$B'_{XIII}(1) = \sum M(XIII - r_i) = 78$$

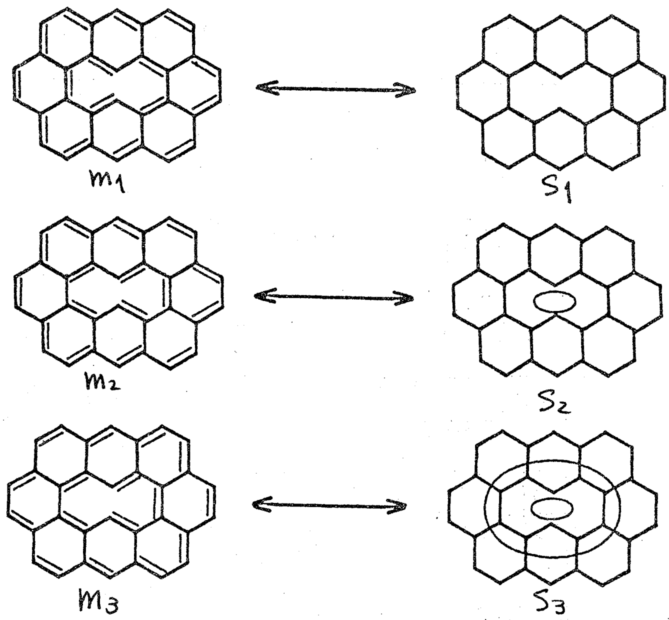


図7. "穴"をもったグラフの Sextet polynomial.

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), をみたす多項式が得られる。

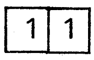
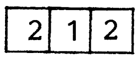
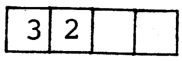
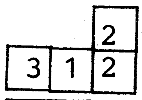
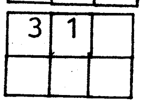
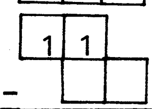
3-1 Domino polynomial

合同な正方形が辺を共有してつながって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ない。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 のもつ性質は保持することができるが，そのグラフ理論的な証明はまだなされていない。

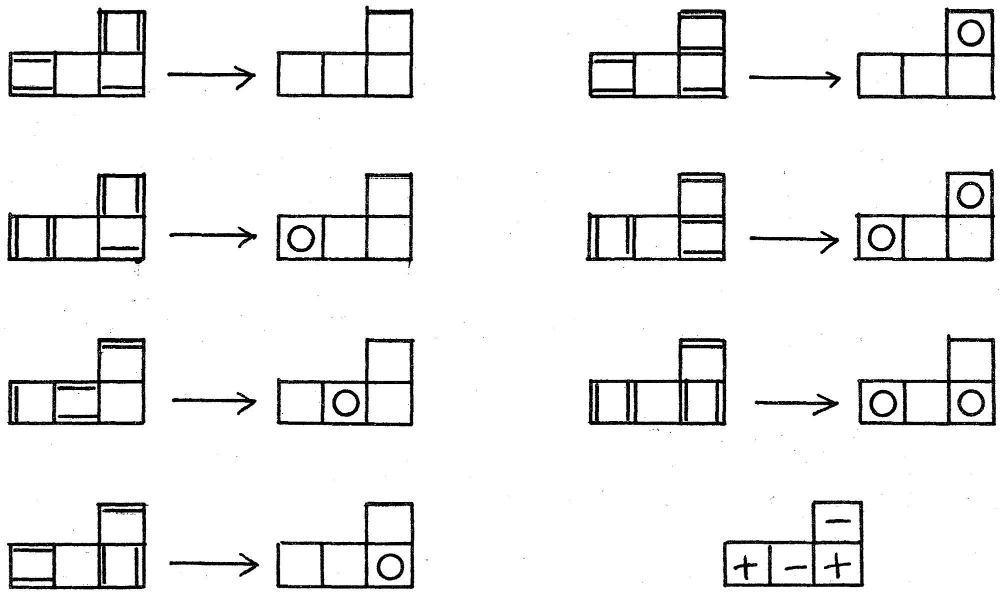


図8.　Matching patterns と quartet patterns の対応

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

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

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

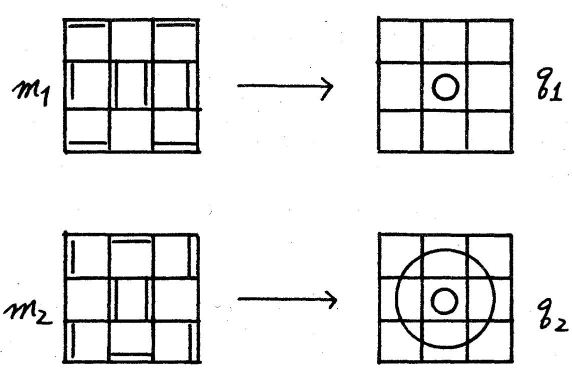
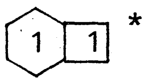
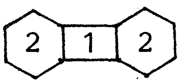
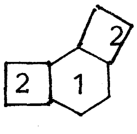
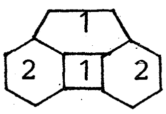


図9.　Super quartet の導入

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(∈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 $R_G(x_4, x_6, \cdots x_m)$ 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)	$R_G^-(1,1)$	$\Sigma M(G-r_i)$
 *	$1+x_4+x_6$	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，

$$R_G(x_4, x_6, \cdots, x_m) = \sum_k r(G; k_4, k_6, \cdots, k_m) x_4^{k_4} x_6^{k_6} \cdots x_m^{k_m}$$

$r(G; k_4, k_6, \cdots k_m)$ 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

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

$$\frac{\partial}{\partial x_4}\frac{\partial}{\partial x_6}\cdots\frac{\partial}{\partial x_m} R_G(x_4, x_6, \cdots, x_m) = R_G'(x_4, x_6, \cdots, x_m)$$ とすると

$$R_G'(1, 1, \cdots, 1) = \sum_i M(G - r_i)$$

が成り立つ。この関係はGがcatafusene-typeのもの，つまりring内に1点をおき辺を共有している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　$R_G(1, 1, \cdots, 1) = M(G)$ の証明

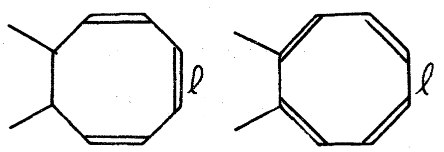
Aに属するグラフのうちcatafusene-typeのものの集合をA_1とする。また$G - r_i^{\circ}$によりGからring r_iのみに属するような辺と点を除いて得られるグラフを表わす。

まず，1つのringだけからなるグラフ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

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

次にGより小さなA_1に属するグラフでは $R_G(1, 1, \cdots, 1) = M(G)$ 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



$M_d(G)$　　$M_s(G)$

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

また r_1の大きさをiとすれば

$$R_G(x_4, x_6, \cdots, x_m) = R_{G-r_1^\circ}(x_4, x_6, \cdots, x_m) + x_i \cdot R_{G-r_1}(x_4, x_6, \cdots, x_m)$$

$$\begin{aligned} \therefore R_G(1, 1, \cdots, 1) &= R_{G-r_1^\circ}(1, 1, \cdots, 1) + R_{G-r_1}(1, 1, \cdots 1) \\ &= M(G - r_1^\circ) + M(G - r_1) \\ &= M(G) \end{aligned}$$

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で，必要かつ十分であることの証明はなされていない。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).