数理解析研究所講究録
第534巻 1984年 316-327

種々の系列グラフの完全マッチングとトポロジカル・インデックス

お茶大理　細矢治夫
(Haruo Hosoya)

グラフGの完全マッチングの数，K(G)，は統計力学や量子力学の種々の問題にも関係した興味深い量であるが，具体的な系列のグラフについてのK(G)の値を系統的に解析した例は非常に少ない。本報では2次元の正方格子，3次元の立方格子，及びそれらのトーラスについての結果を中心に解析を行う。またK(G)を求めるために用いた演算子法(operator technique)及びトポロジカル・インデックス(topological index)との関連についても議論する。

§1 トポロジカル・インデックス[1,2]

グラフGの中でk本の互いに隣り合わない線を選ぶ組合わせの数を非隣接数(non-adjacent number) $p(G,k)$ と定義する。$p(G,0)=1$ とする。Z-計数多項式(Z-counting polynomial) $Q_G(X)$ は次のように定義する。

$$Q_G(X)=\sum_{k=0}^{m} p(G,k)\,X^k \qquad (1)$$

トポロジカル・インデックスは次のように定義する。

$$Z_G=\sum_{k=0}^{m} p(G,k)=Q_G(1) \qquad (2)$$

Gの点の数をNとし，$N=2m$ ならば，完全マッチング数は

$$K(G)=p(G,m) \qquad (3)$$

である。

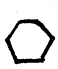
表1，2に経路グラフ(path graph) S_N と環グラフ(cycle graph)の $p(G,k)$，Z_G を示す。$K(G)$ に当たる $p(G,m)$ には下線を付してある。

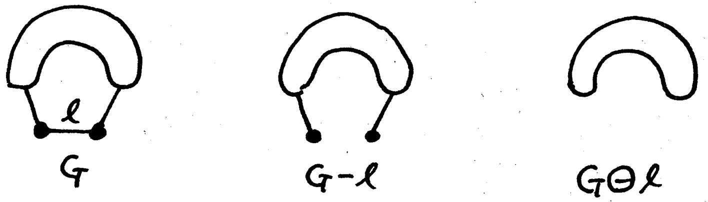
これらの量を求めるための漸化式がいくつか得られているが，何れも図1の包除原理がもとになっている。

表 1

N	S_N	$p(G,k)$ $k=0$	1	2	3	4	Z_G
1	•	1					1
2	—	1	$\underline{1}$				2
3	Λ	1	2				3
4		1	3	$\underline{1}$			5
5		1	4	3			8
6		1	5	6	$\underline{1}$		13
7		1	6	10	4		21
8		1	7	15	10	$\underline{1}$	34

表 2

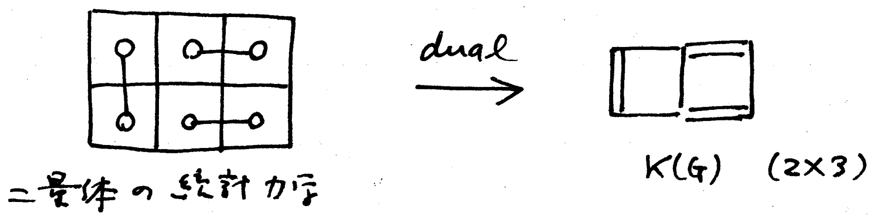
C_N	$p(G,k)$ $k=0$	1	2	3	4	Z_G
•	1					1
	1	$\underline{2}$				3
	1	3				4
	1	4	$\underline{2}$			7
	1	5	5			11
	1	6	9	$\underline{2}$		18
	1	7	14	7		29
	1	8	20	16	$\underline{2}$	47



$$
\left.\begin{aligned}
p(G,k) &= p(G-\ell,k) + p(G\ominus\ell,k-1)\\
Q_G(X) &= Q_{G-\ell}(X) + X\cdot Q_{G\ominus\ell}(X)\\
Z_G &= Z_{G-\ell} + Z_{G\ominus\ell}
\end{aligned}\right\}\quad(4)
$$

図1　包除原理と漸化式

正方形を単位として，それをつなぎ合わせてできるグラフをポリオミノ（polyomino）という。正方形を $n\times m$ の長方形のように配列したポリオミノを $n\times m$ と呼ぶことにする。$n\times m$ のポリオミノの dual は $(n-1)\times(m-1)$ のポリオミノになる。二量体の統計力学は，その dual graph 上のマッチ

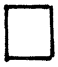
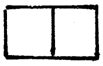


ングを数える問題と同じである。表3に $2\times n$ グラフの $p(G,k)$ と Z_G を示す。$2\times n$ グラフの $Q_G(X)$ を $A_n(X)$ と書くと，

$$A_n(X) = (1+2X)A_{n-1}(X) + X A_{n-2}(X) - X^3 A_{n-3}(X) \quad (2\times n)^{3)} \qquad (5)$$

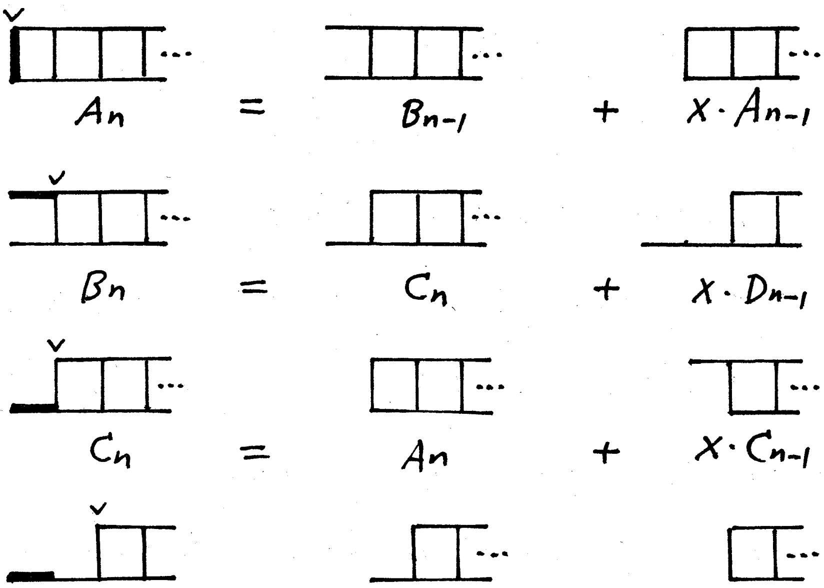
という漸化式の成立することがわかる。このような漸化式を容易に求めるための演算子法を説明する。

表 3

$G=2\times n$	$p(G,k)$							Z_G
	$k=0$	1	2	3	4	5	6	
	1	4	2					7
	1	7	11	3				22
	1	10	29	26	5			71
	1	13	56	94	56	8		254
	1	16	92	234	263	114	13	737

§2 演算子法[4,5]

2×n グラフ A_n に漸化式(4)を使い，出て来た新しいグラフに逐次(4)を適用すると，次のような連立漸化式が得られる。



$$
\left.
\begin{aligned}
A_n &= B_{n-1} + x\cdot A_{n-1} \\
B_n &= C_n + x\cdot D_{n-1} \\
C_n &= A_n + x\cdot C_{n-1} \\
D_n &= C_n + x\cdot A_n
\end{aligned}
\right\} \qquad (6)
$$

なお太線は切断する線，∨印は n 番目の点を示している。

次のような step-up operator $\hat{Q}$ を定義する。

$$\hat{Q} F_{n-1} = F_n \qquad (F = A, B, C, D) \tag{7}$$

(7) を (6) に適用すると (8) が得られる。

$$\left.\begin{array}{llll}
(\hat{Q}-x) A_n & - B_n & & = 0 \\
 & \hat{Q} B_n - \hat{Q} C_n & - x D_n & = 0 \\
\hat{Q} A_n & - (\hat{Q}-x) C_n & & = 0 \\
x A_n & + C_n & - D_n & = 0
\end{array}\right\} \tag{8}$$

$\{F_n\}$ が non-trivial な解をもつためには，(8) の係数行列式が 0 にならなければならない。即ち，

$$\begin{vmatrix}
\hat{Q}-x & -1 & 0 & 0 \\
0 & \hat{Q} & -\hat{Q} & -x \\
\hat{Q} & 0 & -(\hat{Q}-x) & 0 \\
x & 0 & 1 & -1
\end{vmatrix} = 0 \tag{9}$$

これを展開すると，

$$\hat{Q}^3 - (1+2x)\hat{Q}^2 - x\hat{Q} + x^3 = 0 \qquad (2 \times n) \tag{10}$$

が得られる。これを operator polynomial と呼ぶ。これを A_{n-3} に作用させると (5) が得られる。この中には

$$\begin{aligned} p(A_n, k) = p(A_{n-1}, k) + 2p(A_{n-1}, k-1) \\ + p(A_{n-2}, k-1) - p(A_{n-3}, k-3) \end{aligned} \tag{11}$$

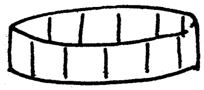
や，
$$Z_n = 3Z_{n-1} + Z_{n-2} - Z_{n-3} \tag{12}$$

という関係式が含まれている。

$2\times n$ のトーラス $\overline{2\times n}$ についても同様に演算子多項式が得られるが，それには(10)式が因子として含まれていることに注意。

$$\hat{\theta}^4-(1+x)\hat{\theta}^3-2x(1+x)\hat{\theta}^2-x^2(1-x)\hat{\theta}+x^4$$
$$=(\hat{\theta}+x)\{\hat{\theta}^3-(1+2x)\hat{\theta}^2-x\hat{\theta}+x^3\} \qquad (\overline{2\times n}) \qquad (13)$$

なお(10)(13)の中から $x^l\hat{\theta}^{m-l}$ $(l=0,1,\cdots m)$ の係数だけを拾うと，



$\overline{2\times n}$

$$K(2\times n)=K_n=K_{n-1}+K_{n-2} \qquad (14)$$

$$K(\overline{2\times n})=\overline{K_n}=\overline{K_{n-1}}+2\overline{K_{n-2}}-\overline{K_{n-3}}-\overline{K_{n-4}} \qquad (15)$$

が得られるが，(14)(15)を表わす演算子多項式の間の関係も興味深い。

$$\hat{\theta}^2-\hat{\theta}-1=0 \qquad (2\times n) \qquad (16)$$

$$\hat{\theta}^4-\hat{\theta}^3-2\hat{\theta}^2+\hat{\theta}+1$$
$$=(\hat{\theta}^2-1)(\hat{\theta}^2-\hat{\theta}-1)=0 \qquad (\overline{2\times n}) \qquad (17)$$

表4に $K(2\times n)$ と $K(\overline{2\times n})$ の値を示すが，前者は Fibonacci 数列，後者は Lucas 数列を少し変えたものになっている。

表4

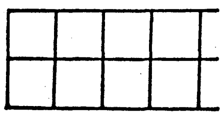
n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$K(2\times n)$	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89
$K(\overline{2\times n})$		1	5	4	9	11	20	29	49	76	125
Lucas	2	1	3	4	7	11	18	29	47	76	123

§3 結果

3×n についての $Q_G(X)$ を表5に示す。

表 5

k	n = 1	2	3	4	5	6	7	8	9
						p(G,k)[a]			
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	2	7	12	17	22	27	32	37	42
2		11	44	102	185	293	426	584	767
3		3	56	267	758	1654	3080	5161	8022
4			18	302	1597	5256	13254	28191	53292
5				123	1670	9503	35004	99183	235800
6				11	757	9401	56456	227262	708881
7					106	4603	53588	355396	1450678
8						908	27688	308330	1993990
9						41	6716	165871	1786876
10							540	46801	991849
11								5580	313290
12								153	48319
13									2554
Z_G	3	22	131	823	5096	31687	196785	1222550	7594361



この漸化式は

$$A_n(x) = (1+3x)A_{n-1}(x) + x(2+7x+5x^2)A_{n-2}(x) + x^2(1+x-2x^2)A_{n-3}(x) - x^4(2+3x+5x^2)A_{n-4}(x) + x^6(1-x)A_{n-5}(x) + x^9 A_{n-6}(x) \qquad (3\times n) \quad (18)$$

となる。完全マッチングが可能なのはnが偶数の場合だけである。3×2n, 3×(2n−2), 3×(2n−4) … の系列で 1-factor (○—○) の数は3ずつ小さくなっているから、(18)の漸化式のnに2n

を入れ, $X^{3l}A_{2n-2l}(X)$ $(l=0,1,2,3)$ の係数だけを拾うと, $K(3\times 2n)$ の漸化式が得られる。

$$K(3\times 2n)=K_{2n}=5K_{2n-2}-5K_{2n-4}+K_{2n-6} \qquad (19)$$

これに対応する演算子多項式は $\hat{Q}^6-5\hat{Q}^4+5\hat{Q}^2-1$ であるが, 実際にはこれを $\hat{Q}^2-1$ で割った

$$\hat{Q}^4-4\hat{Q}^2+1=0 \qquad (3\times 2n) \qquad (20)$$

が $K(3\times 2n)$ の漸化式であることがわかる(表5の数列 3, 11, 41, 153 ...)。

これに対して $\overline{3\times n}$ のトーラスの $Q_G(X)$ の漸化式は

$$\begin{aligned}A_n(X)=&(1+2X)A_{n-1}(X)+X(3+10X+6X^2)A_{n-2}(X)\\&+X^2(3+7X)A_{n-3}(X)-X^3(-1+3X+12X^2+10X^3)A_{n-4}(X)\\&-X^5(3+3X+4X^2)A_{n-5}(X)+X^7(3+2X+6X^2)A_{n-6}(X)\\&-X^9(1-2X)A_{n-7}(X)-X^{12}A_{n-8}(X) \qquad (\overline{3\times n}) \qquad (21)\end{aligned}$$

となる。(18) と (21) の関係は演算子多項式に還元すると明らかとなる。すなわち,

$$\begin{aligned}&(\hat{Q}^2+X\hat{Q}-X^3)\{\hat{Q}^6-(1+3X)\hat{Q}^5-X(2+7X+5X^2)\hat{Q}^4\\&\quad -X^2(1+X-2X^2)\hat{Q}^3+X^4(2+3X+5X^2)\hat{Q}^2-X^6(1-X)\hat{Q}-X^9\}\\&=\hat{Q}^8-(1+2X)\hat{Q}^7-X(3+10X+6X^2)\hat{Q}^6-X^2(3+7X)\hat{Q}^5\\&\quad +X^3(-1+3X+12X^2+10X^3)\hat{Q}^4+X^5(3+3X+4X^2)\hat{Q}^3\\&\quad -X^7(3+2X+6X^2)\hat{Q}^2+X^9(1-2X)\hat{Q}+X^{12}=0 \qquad (22)\end{aligned}$$

左辺の第2因子が $3\times n$ の, 右辺が $\overline{3\times n}$ の式になっている。

同様に $\overline{3\times n}$ の完全マッチングの数 $K(\overline{3\times 2n})$ の漸化式と $K(3\times 2n)$ の間の関係は、

$$\hat{Q}^6-5\hat{Q}^4+5\hat{Q}^2-1=(\hat{Q}^2-1)(\hat{Q}^4-4\hat{Q}^2+1) \quad (\overline{3\times 2n}) \qquad (23)$$

のようになっている（$K(\overline{3\times 2n})$ は 12, 32, 108, 392, 1452… という数列をつくる）。

このようにして $4\times n$, $\overline{4\times n}$ についても演算子多項式の間の興味ある関係式とその有用性がわかった。

§4 他の系列グラフへの拡張

正方格子（$m\times n$）のグラフについての $K(m\times n)$ はすでに、

$$K(2m\times 2n)=2^{2mn}\prod_{k=1}^{m}\prod_{l=1}^{n}\left(\cos^2\frac{k\pi}{2m+1}+\cos^2\frac{l\pi}{2n+1}\right)$$

$$K(2m-1\times 2n)=2^{2mn}\prod_{k=1}^{m}\prod_{l=1}^{n}\left(\cos^2\frac{k\pi}{2m}+\cos^2\frac{l\pi}{2n+1}\right) \qquad (24)$$

が示されている。[6,7] これを使うと、

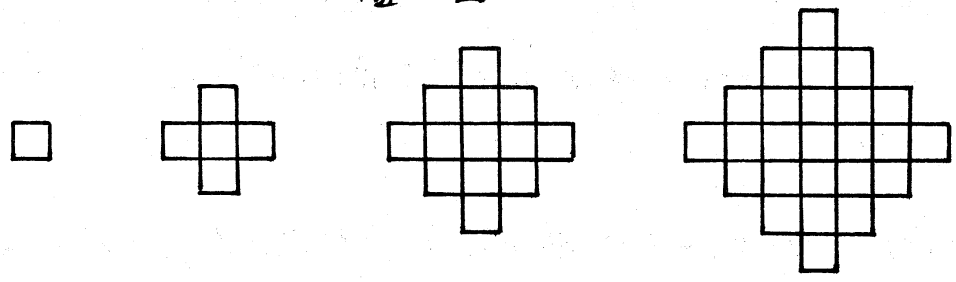
$K(2\times 2)=2$ $\quad K(4\times 4)=36=2^2\cdot 3^2$

$K(6\times 6)=6728=2^3\cdot 29^2$ $\quad K(8\times 8)=12988816=2^4\cdot 17^2\cdot 53^2$

のように、平方数とその半分という数が交互に現れるが、この先はまだ求められていない。[8,9]

一方図2のような系列については $K_n=2^{\sum_1^n k}$ という式が経験的に得られているが、証明はまだできていない。

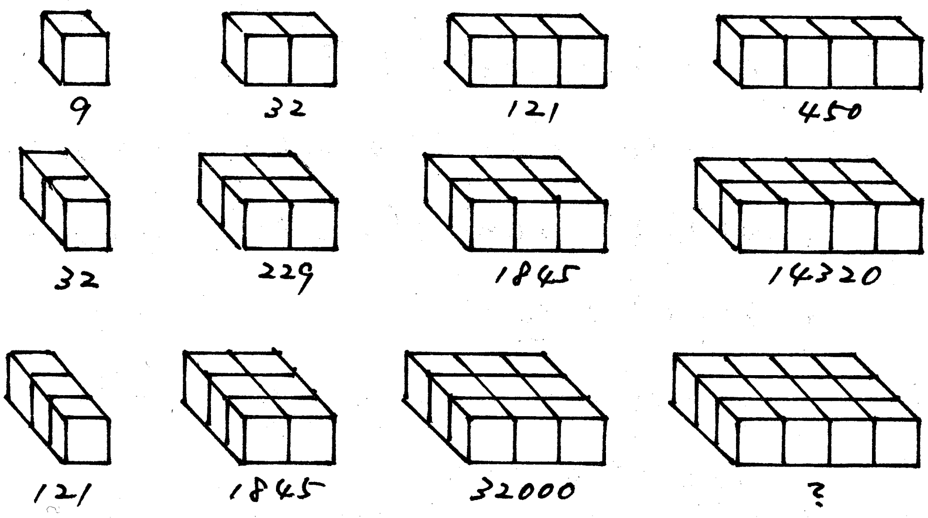
図 2



2	8	64	1024
2^1	2^{1+2}	2^{1+2+3}	$2^{1+2+3+4}$

次に3次元の系列のグラフを考える。完全マッチングの数は，図3のように図形の対称性が高くなるときれいな素因数分解ができるようになるが，その原因はまだわからない。

図 3



特に $2\times2\times n$ のグラフでは，(24)に似た

$$K(2\times2\times2m) = \left\{2^{2m}\prod_{k=1}^{m}\left(\cos^2\frac{k\pi}{2m+1}+\frac{1}{2}\right)\right\}^2$$

$$= 2^{4m}\prod_{k=1}^{m}\left(\cos^2\frac{k\pi}{2m+1}+\cos^2\frac{\pi}{2+1}+\cos^2\frac{\pi}{2+1}\right)^2$$

(25)

$$K(2\times2\times2m-1) = 2^{4m-1}\prod_{k=1}^{m}\left(\cos^2\frac{k\pi}{2m}+\frac{1}{2}\right)^2$$

という一般式が得られたが，完全な証明は得られていない。
なお $2\times2\times n$ の $Q_G(x)$ は次のような漸化式に従うことがわかっている。[10)]

$$
\begin{aligned}
A_n(x) = {} & (1+7x+6x^2)A_{n-1}(x) + x(1+6x+6x^2-7x^3)A_{n-2}(x) \\
& -2x^3(1+5x+13x^2+4x^3)A_{n-3}(x) + x^5(1+2x+6x^2+9x^3)A_{n-4}(x) \\
& +x^8(1-x+2x^2)A_{n-5}(x) - x^{12}A_{n-6}(x) \qquad (2\times2\times n) \qquad (26)
\end{aligned}
$$

最後に正多面体についての $Q_G(x)$ を表6に示す。

表 6

正4面体	$1+6x+\underset{\sim}{3}x^2$
正6面体	$1+12x+42x^2+44x^3+\underset{\sim}{9}x^4$
正8面体	$1+12x+30x^2+\underset{\sim}{8}x^3$
正12面体	$1+30x+375x^2+2540x^3+10155x^4+24474x^5+34805x^6+27300x^7+10260x^8+1400x^9+\underset{\sim}{36}x^{10}$
正20面体	$1+30x+315x^2+1400x^3+2535x^4+1482x^5+\underset{\sim}{125}x^6$

正4面体を除いて，完全マッチング数は何れも平方数か立方数になっていることが注目される。対称性の低い多面体についてはこういうことは一般には見られない。

文献

1) H. Hosoya, Bull. Chem. Soc. Jpn., 44, 2332 (1971).

2) H. Hosoya, Fibonacci Quarterly, 11, 255 (1973).

3) R. B. McQuistan, S. J. Lichtman, J. Math. Phys., 11, 3095 (1970).

4) H. Hosoya, N. Ohkami, J. Comput. Chem., 4, 585 (1983).

5) H. Hosoya, A. Motoyama, J. Math. Phys., submitted.

6) P. W. Kasteleyn, Physica, 27, 1209 (1961).

7) H. N. V. Temperley, M. E. Fisher, Phil. Mag., 6, 1061 (1961).

8) D. Klarner, J. Pollack, Discrete Math., 32, 45 (1980).

9) R. C. Read, Fibonacci Quarterly, 18, 24 (1980).

10) J. H. Hock, R. B. McQuistan, J. Math. Phys., 24, 1859 (1983).