ダイマー模型とその周辺

高崎金久 (Kanehisa Takasaki) 京都大学大学院人間・環境学研究科

Graduate School of Human and Environmental Studies

Kyoto University

1 はじめに

ダイマー (dimer, 2量体) はモノマーと呼ばれる分子が2つ重合した形 ●● の分子を意味する (ちなみに、モノマーが多数重合した分子がポリマーである). ダイマー模型はダイマーのさまざまな配置 *M* に関する状態和 (分配函数)

$$Z = \sum_{M} e^{-E(M)}$$

で定義される統計力学的模型である. 重み(Boltzmann weight) $e^{-E(M)}$ が 1 の場合にはダイマー配置の数え上げの問題になる.

ダイマー模型を数学的に定式化するにはグラフ理論の言葉を用いる.グラフ理論の言葉では、ダイマーの配置は2部グラフの完全マッチングに他ならない.これは単なる定式化の便宜にとどまらない意味をもつ.離散数学の分野では「マトロイド構造」の一種としてよく知られていることだが、完全マッチング同士は「回転」という操作で互いに移り合う.グラフ理論ではこのことが完全マッチングに関する諸問題(特にある種の最適化問題)を解く鍵となる.じつは、ダイマー模型の分配函数を扱う際にもこの「回転」という見方が重要な手がかりを与える.このことは1960年代のKasteleynの研究によって明らかになった.

Kasteleyn は平方格子グラフの上のダイマー模型に対して分配函数のある表式 (興味深いことに、2次元イジング (Ising) 模型の分配函数とほとんど同じ形をし ている)を得た[1]. この表式から模型の熱力学的極限における自由エネルギーが厳密な形で求められた. さらに Kasteleyn は同じ考え方が一般の平面的 2 部グラフの場合にも通用することを示した[2]. これらの研究において Kasteleyn が用いたのは、グラフの隣接行列に適当な重みと符号を乗じて得られる反対称行列(今日では「カステレイン(Kasteleyn)行列」と呼ばれる)である. Kasteleyn はダイマー模型の分配函数がこの行列のパフ式(Pfaffian)として表せることを示し、特に平方格子グラフの場合にこのパフ式(実際にはそれと同等な行列式)を具体的に計算して、イジング模型の分配函数の表式に似た表式を導いたのである.

Kasteleyin が 1960 年代に行った研究は 2000 年前後から再び関心を集めるようになり、ダイマー模型自体に対する理解が深まった(Kenyon の解説 [3] 参照)だけでなく、数論や幾何学などとの思いがけない関連も見出された(植田の解説記事 [4] 参照). その後現在まで続く研究の中でも特筆すべきな進展として、Kenyon、Okounkov、Sheffield の成果 [5] が掲げられる. 彼らは周期的境界条件のもとでのダイマー模型(トーラス上の 2 部グラフで定式化される)を一般的な設定で考察し、熱力学的極限における自由エネルギーを決定した. そして、そこにある種の平面代数曲線(スペクトル曲線)とそれに付随する「アメーバ」と呼ばれる幾何学的構造との思いがけない関連を見出した.

アメーバはローラン多項式のニュートン多面体に幾何学的解釈を与えることを動機として生まれた概念であり [6],本来は多変数超幾何函数の研究と密接に関連するものだったが、その後「トロピカル幾何学」などの観点でも研究されている。さらに、ローラン多項式からは「ロンキン(Ronkin)函数」と呼ばれる函数が定義されるが、それはニュートン多面体やメーバの幾何学的特徴と密接に関連する著しい性質をもつ [7]. (以上の話題については Mikhalkin [8] や Kirillov と前野 [9] の解説がある.)

Kenyon たち [5] は周期的ダイマー模型の「スペクトル曲線」が特別な性質をもつ平面代数曲線であることに注目し、熱力学極限の自由エネルギーがこの代数曲線に伴うロンキン函数に他ならないことを明らかにした。この方面の研究はその後も続いている [10, 11]. 他方では、超弦理論やゲージ理論の研究との思いがけない関連も見出されている [12, 13, 14, 15, 16].

以下ではこのダイマー模型について基礎的な部分を解説する.特に,平面的2部グラフの場合に分配函数がパフ式や行列式として表せる仕組みを丁寧に解説する. 周期的ダイマー模型に付随して現れるアメーバやロンキン函数についても最

後に簡単に触れる. さらに詳しいことについては、最後に示す参考文献を参照されたい.

2 グラフ理論を少しだけ

2.1 グラフとその表現方法

グラフは「点と線」の構造であり、いくつかの(場合によっては無限個の)頂点とその間を結ぶ辺からなる。グラフを図形的に描いて考えることも多いが、抽象的な意味でのグラフは頂点の集合 V と辺の集合 E の組 G=(V,E) に過ぎない。任意の 2 頂点間に辺が高々 1 つしかないグラフでは、辺の両端 v,v' を指定すれば辺 e=(v,v') が決まる。以下では特に断らない限りそのようなグラフのみを考える(2 頂点間に複数の辺があるグラフは「多重グラフ」、そのような辺は「多重辺」呼ばれる1)、両端が同じであるような辺 (v,v) はループと呼ばれる.

辺に向きが指定されているか否かによってグラフは「有向グラフ」と「無向グラフ」に分かれる。無向グラフでは辺に向きがないので、(v,v') と (v',v) は同じ辺を表すものと解釈される。これらを区別すれば有向グラフとなる。以下では無向グラフのみを考えるので、「無向」という言葉を省いて単にグラフということにする。

グラフを与えることは頂点の集合 V の上に「隣接関係」を定めることと同等である。辺で結ばれた 2 頂点 v,v' は「隣接している」という。これは頂点の集合 V の上に 2 項関係、言い換えればブール函数

$$a: V \times V \rightarrow \{0,1\}, \quad a(v,v') = egin{cases} 1 & (v,v')$$
 が隣接するとき) $0 & (そうでないとき) \end{cases}$

を定める、この隣接関係を $V \times V$ の行列

$$A = (a(v, v'))_{v, v' \in V}$$

で表すこともできる. これを「隣接行列」という.

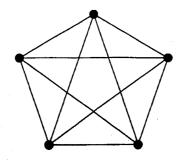


図 1: 完全グラフ K5

いう(有向グラフの場合には、始点であるか終点であるかによって2種類の接続関係が考える必要がある). これらを $V \times E$ 行列で表現したものを「接続行列」という、以下では接続行列は積極的に用いないので、特に記号は定めない.

例 n 個の頂点の間をすべて辺で結んだグラフを n 位の完全グラフと呼び、 K_n という記号で表す。たとえば K_5 は図 1 に示したようなグラフになる。隣接行列は(頂点をどの順序にラベル付けしても)次のようになる:

$$A = \left(\begin{array}{ccccc} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}\right)$$

平面上で辺が交叉しないように描けるグラフは平面的であるという。たとえば、4位までの完全グラフ K_2, K_3, K_4 は平面的だが, K_5 は平面的でない。6位以上の完全グラフは K_5 を含むので平面的ではない。

2.2 2部グラフと完全マッチング

頂点集合 V が共通部分をもたない 2 つの部分集合 V_1,V_2 に分かれて($V=V_0\cup V_1,V_2\cup V_1$),辺が V_1 と V_2 の間にのみ存在するようなグラフを 2 部グラフと呼び, $G=(V_1,V_2,E)$ (E は辺の集合)というように 3 つ組として定式化する.

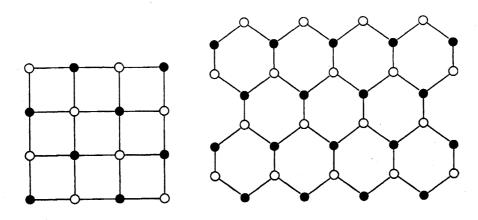


図 2: 2部グラフとしての平方格子・6角格子

2部グラフは2色に彩色されたグラフと考えることもできる.一般に,グラフの彩色とは,いくつかの色を用意して,各頂点にそのうちの一つを指定することである.ただし,隣接する2頂点の色は一致しないという条件を満たすものとする.2部グラフは2色で彩色できるグラフに他ならない,以下では, V_1 の頂点は白(white)に, V_2 の頂点には黒(black)に彩色されていると見なす.

例 平方格子や6角格子は2色に彩色可能であり、2部グラフと見なすことができる(図2). これらは平面的でもある.

2 部グラフ $G=(V_1,V_2,E)$ において端点を共有しないいくつかの辺からなる集合

$$M = \{(w_1, b_1), (w_2, b_2), \dots, (w_n, b_n)\}, \quad w_i \neq w_j, b_i \neq b_j \ (i \neq j)$$

をマッチングという. マッチングが

$$\{w_1, w_2, \cdots, w_n\} = V_1, \quad \{b_1, b_2, \cdots, b_n\} = V_2$$

というように G のすべての頂点を覆うとき、完全マッチングという(図 3).

与えられた2部グラフにおける完全マッチングは回転操作を通じて互いに移り合う.このことは二つの完全マッチングの違いを「交互閉路」と呼ばれるもので表現することによって説明される.

 $M \ge M'$ を 2 つの完全マッチングとする。これらを G 上に重ねて描いたものは互いに交叉しないいくつかの辺と単純閉路に分かれる(図 4)。このうち閉路以外の辺は $M \ge M'$ に共通のものであり、それが重なりあっているので一つの辺に

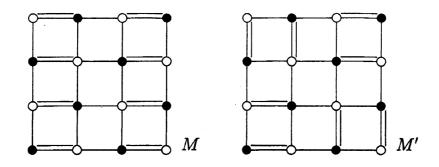


図 3: 平方格子グラフの完全マッチングの例(2重線はマッチングに属する辺を 表す)

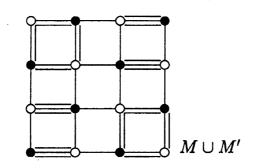


図 4: 図3の2つの完全マッチングを合併したもの(6つの辺と2つの単純閉路に分かれる)

見えている。他方、閉路は二つの完全マッチングが食い違っているところに相当する。この閉路は M に属する辺と M' に属する辺が交互に現れるという特徴をもつ。このような閉路を交互閉路という。M と M' の違いはこれらの交互閉路の集合 $\mathcal{C} = \{C_1, \cdots, C_k\}$ によって表現される。

見方を変えれば、交互閉路の集合 $C = \{C_1, \cdots, C_k\}$ は2つの完全マッチング M, M' の一方から他方へ乗り換えるためのデータと見なせる. M から M' へ乗り換えるには、 C_1, \cdots, C_k において M に属する辺と属さない辺(交互に並んでいる)を入れ替えればよい. M' から M へ乗り換える場合も同様である. この乗り換えの操作がマッチングの辺を閉路に沿って回転するように見えるので、「回転」と呼ばれるのである(図 5).

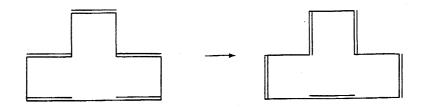


図 5: 交互閉路に沿ったマッチングの回転

3 ダイマー模型とは何か

3.1 ダイマー模型の定式化

2部グラフの言葉を用いれば、ダイマー模型は以下のように定式化される.

- 1) 2 部グラフ $G = (V_1, V_2, E)$ を指定する.
- 2) 各辺 e = (w, b) $(w \in V_1, b \in V_1)$ に対して正数 W(e) を指定する. W(e) は 1個のダイマー $\bullet \bullet \bullet$ を e に置くときの統計力学的重み (Boltzmann weight) を表す.
- 3) G の完全マッチング M に対してその重み W(M) を

$$W(M) = \prod_{e \in M} W(e)$$

と定める. これが M の各辺にダイマー ullet を配置した状態の分配函数への寄与となる.

4) 分配函数 Z = Z(G) を

$$Z = \sum_{M \in \mathcal{M}} W(M)$$

と定める. ここで M は G の完全マッチング全体の集合を表す.

見かけは異なるがこのようなダイマー模型に翻訳できる問題はいろいろある. その例をいくつか紹介する.

3.2 ドミノによるタイル張り

正方形を辺を境にして並べてできる図形に2個の正方形をつないだ「ドミノ」
「一」、 を隙間なく並べることはいわゆる「タイル張り」の一種である. これは
ダイマー模型に翻訳できる. 実際, 正方形の重心を結んで得られるグラフ(平方格子を平面的グラフと見なすときの「双対グラフ」に他ならない) は2部グラフ
であり, ドミノタイル張りはこの2部グラフの完全マッチングにちょうど対応するからである.

ドミノタイル張りの数え上げの簡単な例として、 $2 \times n$ の正方形を並べた場合

	·	•	•	•	
		•	•	•	

を説明しよう [17]. タイル張りの総数を f_n と表して、その漸化式を導くことを考える、右端の 2 列に注目すると、ドミノの配置は次の 2 通りに分かれる:

- 1) のようなタイル張りの総数は $2 \times (n-1)$ の場合のタイル張りの総数 f_{n-1} に等しい. また 2) のようなタイル張りの総数は $2 \times (n-2)$ の場合のタイル張りの総数 f_{n-2} に等しい. したがって

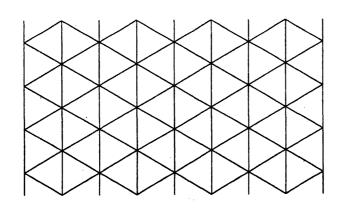
$$f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$$

という漸化式が得られる.他方,n=1,2 の場合には

$$f_1=1, \quad f_2=2$$

となる. こうして f_n がフィボナッチ数に他ならないことがわかった.

 $m \times n$ の場合のドミノタイル張りの総数はこのように簡単な考察ではわからないが、Kasteleyn と Fisher、Temperley は巧妙な方法によってそれを求めた。Kastelyn の方法についてはあとで説明する.



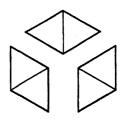
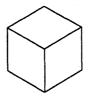


図 6: 菱形(右図のように3通りの置き方がある)による3角格子図形(左図)のタイル張り

3.3 菱形によるタイル張り

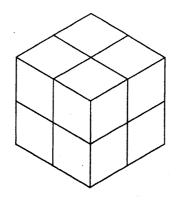
正3角形を辺を境にして並べてできる図形(3角格子の一部をなす)に対しては,正3角形を2つつないだもの(菱形になる)を並べるタイル張りが考えられる(図6).

このタイル張りは3次元空間内で座標軸に平行な立方体を積み上げた状態として解釈することもできる。このような立方体は3次元空間の(1,1,1)の方向から眺めれば



というように見える.この図は 3 次元空間から平面 x+y+z=0 への射影を描いたものであり,(1,1,1) の方から見える立方体の 3 つの面が 3 つの菱形となって現れている(裏側の 3 つの面はこれらを 120 度回転したものになる).この射影によって,3 次元空間内に立方体を積み上げた状態は平面上の菱形によるタイル張りに対応する(図 7).

3角格子の重心を隣接する3角形の間で結べば6角格子グラフ(もとの3角格子グラフの双対グラフ)ができる。これは2部グラフであり、菱形によるタイル張りはこの2部グラフに対するダイマーの配置と対応する(図8).こうして、このタイル張りもダイマー模型に翻訳できる。



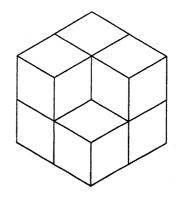
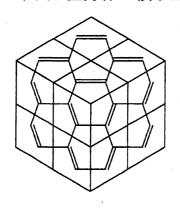


図 7: 立方体の積み上げを菱形タイル張りと見なす



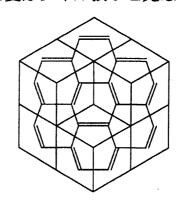


図 8: 図7に対応するダイマーの配置(2重線はダイマーを表す). 二つのダイマー配置が中央の6角形におけるマッチングの回転によって移り合うことに注意.

上のような立方体の積み上げ状態は平面分割(plane partition)によっても表現できる。通常の分割(partition)は与えられた正整数 n を

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_d = n$$

というように正整数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_d$ の和として表すことを意味する.順序を入れ替えたものは同じ分割と見なされるので, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_d$ という条件を置く. このような正整数の分割は n 個の正方形を並べた深さが d のヤング図形に対応する. さらに,d,n についての条件をはずして,一般に

$$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots), \quad \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots$$

という整数列 λ (ただし,ある番号から先は 0 が並ぶとする)を分割と呼ぶこともある.平面分割はその 2 次元化

$$\pi = (\pi_{ij})_{i,j \ge 1}, \quad \pi_{ij} \ge \pi_{i+1,j} \ge 0, \quad \pi_{ij} \ge \pi_{i,j+1} \ge 0$$

である。平面分割は3次元ヤング図形に対応する。すなわち、平面の第1象限に正方形を敷き詰めて、(i,j)番目の正方形の上に π_{ij} 個の立方体を積めば、3次元ヤング図形ができる。

このように、3角格子図形のタイル張り(言い換えれば6角グラフ上のダイマー配置)は平面分割・3次元ヤング図形と対応している。この見方が超弦理論のある種の問題を考える際にも有用であることが最近指摘されている [12].

4 分配函数のパフ式・行列式表示

4.1 カステレイン行列

以下では平面的 2 部グラフ $G=(V_1,V_2,E)$ の上でダイマー模型を考える. Kasteleyn [1,2] はこの場合の分配函数が

$$Z = |\operatorname{Pf} \tilde{K}| = |\det K| \tag{1}$$

と表示できることを示した($\operatorname{Pf} ilde{K}$ は $ilde{K}$ のパフ式を表す).ここに現れた行列

$$ilde{K} = \begin{pmatrix} 0 & K \\ -{}^{\mathrm{t}}K & 0 \end{pmatrix} \quad (V \times V \ \ ilde{T} \ \ ilde{D}), \quad K = (K_{wb})_{w \in V_1, b \in V_2} \quad (V_1 \times V_2 \ \ ilde{T} \ \ ilde{D})$$

がカステレイン行列である. $ilde{K}$ は G の隣接行列 $ilde{A}$ に重みと符号を付けたものである. すなわち, K の行列要素は

$$K_{wb} = \begin{cases} \pm W(w, b) & ((w, b) \in E) \\ 0 & ((w, b) \notin E) \end{cases}$$

という形をしている.以下では,この符号 \pm の定め方や,それによって Kasteleyn の公式が成立する仕組みを解説する.

注意 1) 隣接行列が対称行列であるのに対してカステレイン行列は反対称行列である。だからこそパフ式 $\operatorname{Pf} \tilde{K}$ が意味をもつ。頂点を $1,2,\cdots,2n$ でラベル付けして \tilde{K} の行列要素を \tilde{K}_{ij} $(i,j=1,\cdots,2n)$ と表せば,このパフ式は

$$\operatorname{Pf} \tilde{K} = \sum_{\mu \in \mathcal{M}_{2n}} \operatorname{sgn}(\mu) \tilde{K}_{\mu(1)\mu(2)} \cdots \tilde{K}_{\mu(2n-1)\mu(2n)}$$
 (2)

という展開をもつ、ここで、 \mathcal{M}_{2n} は $1,2,\cdots,2n$ の置換 μ で

$$\mu(1) < \mu(2), \ \mu(3) < \mu(4), \ \cdots, \ \mu(2n-1) < \mu(2n),$$

 $\mu(1) < \mu(3) < \cdots < \mu(2n)$

という条件を満たすもの全体の集合である.この展開式から完全マッチングとの関連が見えることに注意されたい.実際,行列の添字 $1,2,\ldots,2n$ を完全グラフ K_{2n} の頂点, $(\mu(2i-1),\mu(2i))$ をその辺と見なせば, $\mu\in\mathcal{M}_{2n}$ は K_{2n} の完全マッチング 2 と見なせる.

2) G は2部グラフであるから、隣接行列は

$$ilde{A} = \left(egin{array}{cc} 0 & A \ A & 0 \end{array}
ight), \quad A = (A_{wb})_{w \in V_1, b \in V_2}$$

というプロック構造をもつ. $ilde{K}$ のプロック構造

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} 0 & K \\ -{}^{\mathrm{t}}K & 0 \end{pmatrix}, \quad K = (K_{wb})_{w \in V_1, b \in V_2}$$

はこのことに由来する. このブロック構造から

$$Pf \,\tilde{K} = (-1)^{n(n-1)/2} \det K \tag{3}$$

3) \hat{K} のプロック構造はディラック作用素を連想させる. 無質量場のディラック作用素は場の成分のカイラリティによってプロック分け(カイラル表示)される. そこでは K に相当するものとしてワイル作用素が現れる(ちなみに,幾何学ではワイル作用素をディラック作用素と呼ぶことが多い). ワイル作用素の行列式は幾何学的に重要な対象である. ダイマー模型ではそれに相当するものが分配函数を与えることになる. この事実は大変示唆的であり,ダイマー模型の背後にフェルミオンが隠れていることを示唆している. このことはイジング模型(フェルミオンとの関係はよく知られている)との関係から見てももっともらしい. 実際,Kenyonはこのような観点から,カステレイン行列をワイル作用素(2次元時空の場合にはコーシー・リーマン作用素になる)の離散的類似として捉えて,離散的グリーン函数や離散的正則函数などを論じている(解説記事 [3] とその引用文献を参照されたい).

 $^{^2}K_{2n}$ は 2 は 2 部グラフではないが、グラフ理論ではこのような場合にも完全マッチングという言葉を用いる、 2 部グラフの完全マッチングはその特別な場合である.

4.2 予備的考察

2部グラフの隣接行列の各行列要素にダイマーの重み W(w,b) を乗じた行列(重み付き隣接行列)を改めて \tilde{A} という記号で表す.すなわち

$$ilde{A} = \left(egin{array}{cc} 0 & A \\ A & 0 \end{array}
ight), \quad A_{wb} = \left\{ egin{array}{cc} W(w,b) & ((w,b) \in E) \\ 0 & ((w,b)
otin E) \end{array}
ight.$$

以下では、 V_1,V_2 に属する頂点を共通の $1,2,\cdots,n$ でラベル付けする.これに伴って A の行列成分を A_{ij} $(i,j=1,2,\cdots,n)$ と表す. V_1 と V_2 の頂点を区別する必要がある場合には

$$V_1 = \{w_1, w_2 \cdots, w_n\}, \quad V_2 = \{b_1, b_2, \cdots, b_n\}$$

というラベル付けを用いることにする.

重み付き隣接行列のブロック A に対してそのパーマネント(permanent),すなわち行列式の定義から符号因子を取り除いたもの

$$\operatorname{perm} A = \sum_{\sigma \in S_n} A_{1\sigma(1)} \cdots A_{n\sigma(n)} \tag{4}$$

を考えてみよう. 右辺の各項 $A_{1\sigma(1)}\cdots A_{n\sigma(n)}$ に

$$M = \{(1, \sigma(1)), \cdots, (n, \sigma(n))\}\$$

という辺の集合を対応させれば

- (i) $A_{1\sigma(1)}\cdots A_{n\sigma(n)}\neq 0$
- (ii) M は2部グラフ G の完全マッチングである

という 2 条件は同値なので,0 でない項は G の完全マッチング M に 1 対 1 対応 し,その値は W(M) に等しい.こうしてダイマー模型の分配函数に対するパーマネント表示

$$Z = \operatorname{perm} A \tag{5}$$

が得られる.

このパーマネント表示³は残念ながら計算の役には立たない. パーマネントは行列式のもつ良い性質をもたないからである. 行列式表示ができれば, 固有値問題や対角化を利用して計算を行う道も開ける.

そこで,重み付き隣接行列 $A=(A_{ij})$ の行列要素に適当な符号因子 $\kappa_{ij}=\pm 1$ を乗じたもの

$$K_{ij} = \kappa_{ij} A_{ij} \tag{6}$$

を導入し, $K=(K_{ij})$ の行列式

$$\det K = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) K_{1\sigma(1)} \cdots K_{n\sigma(n)}$$
 (7)

の右辺のすべての項が**同符号**になるように符号因子 κ_{ij} を選ぶことを考える. そのような符号付けが可能であれば

$$\operatorname{sgn}(\sigma)K_{1\sigma(1)}\cdots K_{n\sigma(n)}=\pm A_{1\sigma(1)}\cdots A_{n\sigma(n)}$$
 (± は共通)

という等式が成立するので、分配函数が K の行列式として表せることになる.

4.3 符号付けに関する考察と定理

 $\det K$ の展開 (7) の 0 でない項は 2 部グラフ G のある完全マッチング M に対応している。すでに説明したように、任意の 2 つの完全マッチング M,M' はいくつかの閉路における回転操作によって互いに移り合う。したがって、(7) のすべての項が同一符号をもつことを示すには、一つの閉路における回転によって項の符号が変化しないことを確かめればよい。

G の頂点の列 $w_{i_1}, b_{j_1}, w_{i_2}, b_{j_2}, \cdots, w_{i_p}, b_{j_p}$ (V_1, V_2) の頂点を w_i, b_i と表す規約に従っている)をたどって w_{i_1} に戻る長さ 2p の閉路

$$C = (w_{i_1}, b_{j_1}, w_{i_2}, b_{j_2}, \cdots, w_{i_p}, b_{j_p}, w_{i_1})$$

を考える. M は C の辺のうち $(w_{i_1},b_{j_1}),(w_{i_2},b_{j_2}),\cdots,(w_{i_p},b_{j_p})$ を含み,それらの回転

によって M' に移るとする. (7) において M に対応する項は

$$\operatorname{sgn}\left(\begin{array}{cccc} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_1 & j_2 & \cdots & j_p & \cdots \end{array}\right) K_{i_1j_1} K_{i_2j_2} \cdots K_{i_pj_p} \cdots$$

という形をしている.ここで,項の構造を見やすくするため, $\operatorname{sgn}(\sigma)$ と $K_{1\sigma(1)}\cdots K_{n\sigma(n)}$ のそれぞれにおいて $i_1,\cdots,i_p,j_1,\cdots,j_p$ に対応する部分を前の方に寄せて表している.同様の意味で,M' に対応する項は

$$\operatorname{sgn}\left(\begin{array}{cccc} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_p & j_1 & \cdots & j_{p-1} & \cdots \end{array}\right) K_{i_1j_p} K_{i_2j_1} \cdots K_{i_pj_{p-1}} \cdots$$

となる、ここに現れた置換は巡回置換 $(j_1 j_2 \cdots j_p)$ によって

$$\begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_1 & j_2 & \cdots & j_p & \cdots \end{pmatrix} = (j_1 \ j_2 \ \cdots \ j_p) \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_p & j_1 & \cdots & j_{p-1} & \cdots \end{pmatrix}$$

という関係で結ばれているので、符号に関して

$$\operatorname{sgn}\left(\begin{array}{cccc} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_1 & j_2 & \cdots & j_p & \cdots \end{array}\right) = (-1)^{p-1}\operatorname{sgn}\left(\begin{array}{cccc} i_1 & i_2 & \cdots & i_p & \cdots \\ j_p & j_1 & \cdots & j_{p-1} & \cdots \end{array}\right)$$

という等式が成立する.したがって, A_{ij} に乗じた符号因子 κ_{ij} に対して

$$\kappa_{i_1j_1}\kappa_{i_2j_2}\cdots\kappa_{i_pj_p} = (-1)^{p-1}\kappa_{i_1j_p}\kappa_{i_2j_1}\cdots\kappa_{i_pj_{p-1}}$$
(8)

という等式が成立すれば、上の2項は同符号になる.

 $\det K$ の展開 (7) のすべての項が同符号であるためには,最後に示した等式がG のすべての閉路 C に対して成立すればよい.この等式をもう少し見やすい形に書き直せば

$$\prod_{e \in C} \kappa_e = (-1)^{|C|/2-1} \tag{9}$$

となる.ここで κ_e は辺 $e=(w_i,b_j)$ に対する符号因子 κ_{ij} であり,|C| は閉路 C の長さ(偶数になる)を表す.

G が平面的 2 部グラフである場合には、面の個数に関する帰納法によって、(9) を満たす符号付けが常に可能であることを示せる [2]. その証明を見れば、グラフの各面の境界に対して (9) が成立すれば十分であることもわかる. なお、このような符号付けは一意的ではないので、状況に応じて都合のよいものを選べばよい.

以上の結果をまとめると次のようになる.

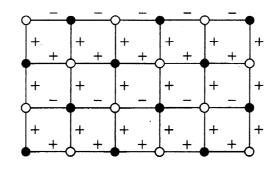


図 9: 平方格子グラフの場合の符号付けの例

定理(Kasteleyn) G が平面的 2 部グラフであれば、(9) を満たすような符号付け κ_e ($\kappa \in E$) が存在する.この条件が満たされれば

$$Z = |\det K| = |\operatorname{Pf} \tilde{K}|$$

という等式が成立する.

- 注意 1) Kasteleyn[2] は K のかわりに \tilde{K} を考えて、 $\operatorname{Pf} \tilde{K}$ の展開 (2) のすべて の項が同符号になるような条件として (9) を導いた. 本節では Kasteleyn が $\operatorname{Pf} \tilde{K}$ に対して用いた論法を $\det K$ の場合に焼き直して紹介した. パフ式による定式化は 2 部グラフ以外にも拡張できるという利点があるが、ここでは説明のしやすさを優先して行列式による定式化を採用した.
- 2) 平方格子グラフの場合には、各面(4角形をなす)の境界に沿う符号因子の積が-1であれば(9) の条件が満たされる。Kasteleyn は図9に示すような符号付けを行ったが、Kenyon[3] は符号因子の代わりに虚数単位 $i=\sqrt{-1}$ で重み付き隣接行列を修正して、分配函数の行列式表示を与えた。Kenyon の用いた行列は平方格子グラフに特化したものだが、行列式の計算が簡単になるという利点をもつ(植田の解説 [4] も参照されたい)。

4.4 平方格子グラフの場合

Kasteleyn[1] は上で紹介したパフ式・行列式表示を用いて任意の平方格子グラフに対する分配函数を具体的に求めた。格子のサイズを $m \times n$ (ただし m,n の少なくとも一方は偶数とする),水平方向と垂直方向のダイマーの重みを

$$W(\bullet - \bullet) = a, \quad W(\bullet) = b$$

とする. 垂直方向のすべての辺に + を, 水平方向については列ごとに交互に + を 割り当てれば (図 9), 符号付けの条件 (9) は満たされる. Kasteleyn はこの符号付けのもとで \tilde{K} を定義し、それを対角化して

$$Z = \prod_{j=1}^{m} \prod_{k=1}^{n} \left(4a^2 \cos^2 \frac{\pi j}{m+1} + 4b^2 \cos^2 \frac{\pi k}{n+1} \right)^{1/4}$$
 (10)

という分配函数の表示を得た.これはイジング模型の分配函数とほとんど同じ形をしており,2つの模型の密接な関連を示唆している(イジング模型との関係については,Kasteleynの解説 [2] を参照されたい).ちなみに,Kasteleyn は \tilde{K} を対角化する際に \tilde{K} に内在するテンソル積構造を利用したのだが,対角化の計算は多少の技巧を要する.Kenyon[3] の用いた行列はそれ自体がテンソル積の形をしているので,対角化の計算が著しく簡単になる.

微積分学でおなじみの区分求積法の公式を用いれば、こうして得られた分配函数の表示から熱力学極限におけるダイマーあたりの自由エネルギー

$$F = -\lim_{m,n\to\infty} \frac{\log Z}{mn}$$

がただちに求められる. その結果は

$$F = -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\pi} d\tau \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \tau)$$

$$= -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\pi} d\tau \log(a^2 (e^{i\theta} + e^{-i\theta})^2 + b^2 (e^{i\tau} + e^{-i\tau})^2)$$
(11)

という形の積分になる.これを $z=e^{2i\theta}$, $w=e^{2i\tau}$ に関する複素周回積分に書き直せば,あとで紹介する「ロンキン函数」の特殊値と見なせる.この積分は数論・双曲幾何学などとも関連している(詳しくは Kenyon や植田の解説 [3, 4] とその引用文献を参照されたい).

5 周期的ダイマー模型とアメーバ、ロンキン函数

5.1 トーラス上の2部グラフに対するダイマー模型

Kasteleyn は2重周期的境界条件のもとでの平方格子グラフ(言い換えればトーラス上の平方格子グラフ)のダイマー模型の分配函数も計算した[1]. その計算法は平方格子グラフの直積構造を利用するものだった. Kenyon, Okounkov, Sheffield

[5] は直積構造を持たない2重周期的2部グラフ(典型的には6角格子と平方8角格子)にも通用する新たな方法を考案した.

Kenyon たちも一種のカステレイン行列を用いるのだが,それは 2 個の複素変数 z,w に依存する $V_1 \times V_2$ 行列 K(z,w) である.その定義は平面グラフの場合と同様であるが,すでに説明した符号因子に加えて,辺 e=(w,b) がトーラスの基本領域の境界と交叉するときに $z^{\pm 1}$ や $w^{\pm 1}$ が因子として現れる(\pm のいずれを選ぶかは e と境界の交叉の仕方で決まる).z,w は周期的境界条件下の固有値問題ではおなじみのブロッホ乗数に他ならない.今の場合にはトーラスの 2 つの周期についての周期的境界条件に伴って 2 個のブロッホ乗数が現れる.

K(z,w) の行列式として特性多項式

$$P(z,w) = \det K(z,w)$$

を定義する。これはz, wのローラン多項式となる。さらに、スペクトル曲線を

$$P(z,w)=0$$

という方程式によって定義する.正確に言えば、複素代数曲線としてのスペクト ル曲線

$$\Gamma = \{ (z, w) \in \mathbf{C}^2 \mid P(z, w) = 0 \}$$
 (12)

とその実部

$$\Gamma_{\mathbf{R}} = \{ (z, w) \in \mathbf{R}^2 \mid P(z, w) = 0 \}$$
 (13)

を区別する必要がある.

Kenyon たちはこれらを用いて次のような結果を示した.

1) 周期的ダイマー模型の分配函数は

$$Z = \frac{1}{2} \left(-P(1,1) + P(1,-1) + P(-1,1) + P(-1,-1) \right) \tag{14}$$

と表せる.

2) スペクトル曲線の実部 $\Gamma_{\mathbf{R}}$ は「ハルナック(Harnack)性」あるいは「極大性」と呼ばれる良い性質をもつ実代数曲線である。あとで説明するスペクトル曲線 Γ からアメーバへの対数写像もこの性質を反映した特徴をもつ。

- 3) 熱力学的極限(基本領域上のグラフの $N \times N$ 個のコピーを縦横 N 倍の周期のトーラス上に並べて、 $N \to \infty$ の極限を考える)が意味をもつ.
- 4) 熱力学極限における基本領域あたりの自由エネルギーは

$$F = -\oint_{|z|=1} \frac{dz}{2\pi i z} \oint_{|w|=1} \frac{dw}{2\pi i w} \log |P(z, w)|$$
 (15)

という積分で与えられる.

4) 同様のことが一様磁場 (B_x, B_y) の存在する場合にも言える. この場合の基本領域あたりの自由エネルギー(表面張力)は P(z, w) のロンキン函数 $R(B_x, B_y)$ からルジャンドル変換を経由して決まる.

要するに、これらの結果は周期的ダイマー模型が一種の可解模型であることを示している。ちなみに、(14)は Kasteleyn[1]が平方格子グラフの場合に見出していた事実である。右辺の4つの項はトーラスの4つのスピン構造に対応する。また、(15)は非周期的平方格子グラフの熱力学的極限から得られた結果(11)を一般化したものと見なせる。アメーバとロンキン函数については節を改めて説明するが、Kenyon たちはこの幾何学的・函数論的概念からダイマー模型の熱力学的極限の相構造や相関函数の性質などに関してもさまざまな結論を引き出している(詳しくは原論文[5]やその後の研究[10,11]を参照されたい)。

5.2 アメーバとロンキン函数

ロンキン函数は (15) の積分を特殊値 R(0,0) として与える函数であり、

$$R(x,y) = \oint_{|z|=1} \frac{dz}{2\pi i z} \oint_{|w|=1} \frac{dw}{2\pi i w} \log |P(e^x z, e^y w)|$$
 (16)

という積分によって定義されて、以下のような性質をもつ.

- 1) R(x,y) は \mathbf{R}^2 上の凸函数である.
- 2) R(x,y) は P(z,w) のアメーバ

$$A = \{ (\log |z|, \log |w|) \mid (z, w) \in \Gamma \}$$
 (17)

の上で狭義凸である.

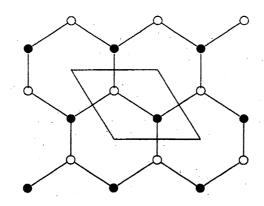


図 10: 周期的6角格子の基本領域(平行四辺形で囲まれた部分)

- 3) アメーバの補集合 $\mathbf{R}^2\setminus A$ はいくつかの連結成分に分かれる. R(x,y) の勾配 $\nabla R(x,y)$ は各連結成分の上で一定である. 言い換えれば, R(x,y) はアメーバの補集合上で区分的に線形である.
- 4) R(x,y) はアメーバの上でモンジュ・アンペール方程式

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \frac{\partial^2 R}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x \partial y}\right)^2 = \frac{1}{\pi^2} \tag{18}$$

を満たす.

- 5) 一様磁場 (B_x, B_y) の下での基本領域あたりの自由エネルギーは $R(B_x, B_y)$ のルジャンドル変換 $\sigma(s,t)$ で与えられる. $\sigma(s,t)$ は P(z,w) のニュートン 多角形上の函数で、やはりモンジュ・アンペール方程式を満たす.
- 例 6角格子上の周期的ダイマー模型では白頂点と黒頂点をちょうど 1 個ずつ含むような基本領域を選ぶことができる(図 10). こうして得られるトーラス上の 2 部グラフは白頂点と黒頂点を 1 個ずつ持ち,その間を 3 重辺で結んだものになる.対応するカステレイン行列 K(x,y) は 1×1 ,すなわちスカラーであり,それ自体が特性多項式に等しい.具体的には

$$P(z,w) = 1 + z + w$$

となる(ダイマー自体の重みは 1 にしている).右辺の 3 つの項は白頂点と黒頂点を結ぶ 3 つの辺に対応する.P(z,w)=0 から w=-z-1 となるので,この多項式のアメーバは

$$A = \{ (\log |z|, \log |z+1|) \mid z \in \mathbf{C} \}$$

と表せる. すなわち, 平面の点 (x,y) が A に属するのはある複素数 z に対して

$$e^x = |z|, \quad e^y = |z+1|$$

という等式が成立するときである。幾何学的に見れば、これは底辺の長さが 1、他の 2 辺の長さが e^x , e^y の 3 角形が存在する、ということであるから、A は 3 つの 3 角不等式

$$e^x + 1 \ge e^y$$
, $e^y + 1 \ge e^x$, $e^x + e^y \ge 1$

が成立するような (x,y) の集合である. これは x 軸の負の部分, y 軸の負の部分, 第 1 象限内の半直線 x=y を含む単連結領域になる(全体として見れば "T" の文字を無限に引き延ばしたような形をしている). その補集合は

(i)
$$e^x + 1 < e^y$$
 (ii) $e^y + 1 < e^x$ (iii) $e^x + e^y < 1$

という不等式で決まる 3 つの連結成分からなる. (i), (ii), (iii) における R(x,y) の 勾配は (0,1), (1,0), (0,0) である. この勾配の値は P(z,w) のニュートン多角形 (3 角形をなす) の頂点に対応している.

5.3 モンジュ・アンペール方程式について

ロンキン函数は一般のローラン多項式に対しても定義されて 1), 2), 3) の性質をもつが、その場合にはモンジュ・アンペール方程式 (18) を満たすとは限らない (代わりに一種の不等式が成立する [7]). モンジュ・アンペール方程式はスペクトル曲線の実部 $\Gamma_{\mathbf{R}}$ の極大性と関係している. その意味で、これは組み合わせ的な考察や代数的な計算から出せることではなく、いわば函数論的な結果である. その要点 [5] をごく手短かに説明しておこう.

鍵はスペクトル曲線からアメーバへの対数写像

$$\text{Log}: \ \Gamma \to A, \quad \text{Log}(z, w) = (\log |z|, \log |z|)$$

の性質にある。すでに述べたスペクトル曲線の極大性から,この対数写像がアメーバの内部 $A^{\rm int}$ では(正確にはその有限個の点を除いて) 2 対 1 である,ということがわかる。すなわち,(有限個を除く)任意の $(x,y) \in A$ に対して

$$P(z, w) = 0, \quad |z| = e^x, \quad |w| = e^y$$

という条件を満たす $(z,w) \in \mathbb{C}^2$ は 2 個(複素共役な対をなす)しかない.このことを Passare と Rullgård [7] が行っている考察と組み合わせれば,モンジュ・アンペール方程式 (18) が従うのである.

このような形でモンジュ・アンペール方程式が現れることは大変興味深い. 可積分系の観点からその意義を少し論じてみよう.

モンジュ・アンペール方程式はソリトン方程式とは異質の存在であり、むしろ無分散可積分系 [19, 20] や流体力学的可積分系 [21, 22] に近い. 熱力学極限へ移行する前の模型はフェルミオンと関係がありそうなので、熱力学的極限をフェルミオンの準古典極限 (無分散戸田階層や無分散 KP 階層はそのようなものとして理解できる) として扱うことができるならば無分散可積分系とつながる可能性がある. さらに、(18) を複素化したもの(複素モンジュ・アンペール方程式)

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial x \partial \bar{x}} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y \partial \bar{y}} - \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \bar{x} \partial y} = 1$$

がツイスター理論で扱えること[18] もヒントと言えるかもしれない(複素モンジュ・アンペール方程式の次元簡約として無分散戸田方程式や無分散 KP 方程式を導くことができる). このように状況証拠はいくつかあるが、他方では、モンジュ・アンペール方程式自体を無分散可積分系から導くことは難しい、という事実もある. ダイマー模型のロンキン函数を扱う枠組みとしては無分散可積分系よりも流体力学的可積分系の理論の方が適しているかもしれない.

Kenyon と Okounkov が立方体積み上げ型の模型の界面の「極限形 (limit shape)」に関して行った研究 [11] はこの問題とも関連しているように思われる。そこでは界面の極限形に関する微分方程式として複素バーガース方程式とその一般化が登場する。さらにこの研究は代数曲線のトロピカル極限を扱っている点においても注目される。

ダイマー模型とは異なる設定ではあるが、中津と前田が超対称ゲージ理論のインスタントン計算に関して行った研究 [16] もこの問題と無関係ではないように思われる。そこに登場する代数曲線はダイマー模型のスペクトル曲線とは異なるものだが(じつは周期的戸田格子のスペクトル曲線の類似物である)、極大性その他の性質は共通している。中津と前田はそのトロピカル極限についても超弦理論の観点から詳しく論じている。

参考文献

- [1] P. Kasteleyn, The physics of dimers on a lattice, Physica 27 (1961), 1209–1225.
- [2] P. Kasteleyin, Graph theory and crystal physics, in "Graph Theory and Theoretical Physics" (Academics Press, 1967), pp. 43–110.
- [3] R. Kenyon, An introduction to dimer models, arXiv:math.CO/0310326.
- [4] 植田一石, ドミノによるタイル張り, 城崎新人セミナー(2005年2月)報告集. http://insei.math.kyoto-u.ac.jp/2005/hokokushu/ueda.pdf.
- [5] R. Kenyon, A. Okounkov and S. Sheffield, Dimers and amoeba, Ann. of Math.(2) 163 (2006), 1019–1056. arXiv:/math-ph/0311005.
- [6] I.M. Gelfand, M.M. Kapranov and A.V. Zelevinsky, Discriminants, resultants and multidimensional determinants (Birkhäuser, Boston, 1994).
- [7] M. Passare and H. Rullgård, Amoebas, Monge-Ampère measures and triangulations of the Newton polygons, Duke Math. J. 121 (2004), 481–507.
- [8] G. Mikhalkin, Amoebas of algebraic varieties and tropical geometry, in "Different faces of geometry" (Kluwer/Plenum, 2004), pp. 257–300. arXiv:math.AG/0403015.
- [9] A.N. Kirillov, 前野俊昭, すばらしきアメーバたち, 数学 58 (2006), 39-52.
- [10] R. Kenyon and A. Okounkov, Planar dimers and Harnack curves, Duke Math.J. 131 (2006), 499-524. arXiv:math-ph/0311062.
- [11] R. Kenyon and A. Okounkov, Limit shapes and complex Burgers equations, arXiv:math-ph/0507007.
- [12] A. Okoukov, N. Reshetikhin and C. Vafa, Quantum Calabi-Yau and classical crystals, Seiberg-Witten theory and random partitions, in "The unity of mathematics", Prog. Math. vol. 244, (Birkhäuser, Bston, 2006), pp. 597-618. arXiv:hep-th/0309208.

- [13] A. Hanany and K.D. Kennaway, Dimer models and toric diagrams, arXiv:hep-th/0503149.
- [14] S. Franco, A. Hanany, K.D. Kennaway, D. Vegh and B. Wecht, Brane dimers and quiver gauge theories, JHEP **0601** (2006), no.096. arXiv:hep-th/0504110.
- [15] B. Feng, Y.-H. He, K.D. Kennaway and C. Vafa, Dimer models from mirror symmetry and quivering amoebae, arXiv:hep-th/0511287.
- [16] M. Maeda and T. Nakatsu, Amoeba and instantons, arXiv:hep-th/0601233.
- [17] R.L. グレアム, D.E. クヌース, O. パタシュニク, コンピュータの数学(有 澤誠他訳, 共立出版).
- [18] 髙崎金久, ツイスターの世界(共立出版 2005).
- [19] I.M. Krichever, The τ -function of the universal Whitham hierarchy, matrix models and topological field theories, Comm. Pure. Appl. Math. 47 (1994), 437–475.
- [20] K. Takasaki and T. Takebe, Integrable hierarchies and dispersionless limit, Rev. Math. Phys. 7 (1995), 743–808.
- [21] B.A. Dubrovin and S.P. Novikov, Hydrodynamics of weakly deformed soliton lattice, Russian Math. Surveys **44:6** (1989), 35–124.
- [22] S.P. Tsarev, Geometry of Hamiltonian systems of hydrodynamic type, Math. USSR Izvestiya 37, No. 2 (1991), 397-419.