1O10　　　トポロジカルインデックス Z の数学的展開

○　細矢治夫

お茶の水女子大学（名誉教授）

１．はじめに

著者は 1971 年にトポロジカルインデックスZを提案し、それによって飽和炭化水素の沸点の構造依存性をかなり定量的に解析することができた[1)]。その後、そのZが，不飽和共役炭化水素のπ電子系の安定性の構造依存性の議論に使えることが示され（グラフ理論的分子軌道法）[2]、それらについての経験則の数理化学的な裏付けも行った[3,4]。

ところが最近、このZが初等数学や整数論の世界においても重要なはたらきをもつことが著者によって示された。ここでは、化学との直接の関係はあまりないが、トポロジカルインデックスZ（以下 Z-index と呼ぶ）のもつ、不思議議な数学的な性質について主に紹介する。

２．Z の定義と特性

グラフ（graph）*G* は点（vertex, *V*）と辺（edge, *E*）の集合である。G の中で *k* 本の互いに隣り合わない edge を選ぶ組合わせの数を非隣接数（non-adjacent　number）と定義し *p*(G,*k*)と表す。その *p*(G,*k*) の総和を Z index と定義する。グラフ理論では、G 中の隣接する vertex を edge で埋めて行くことを matching というので、Z は G の matching 数ということができる。なお，偶数個（2*n*）の点からなる G の全ての点を *n* 本の edge で埋めることができれば、それを完全 matching と呼ぶ。不飽和共役炭化水素の Kekulé 構造の数はグラフ理論では完全 matching 数と呼ばれる。

メタン、エタン、プロパン、*n*-ブタン等の炭素原子骨格Gを表すグラフは経路グラフ（path graph）と呼ばれ、S_n（*n*は自然数）で表す。三角形、四角形、五角形等のグラフの系列を単環グラフ（monocyclic graph）C_n と呼ぶ。S_nとC_nについて既に次のようなことが知られている。

[定理１]　経路グラフS_nの、*p*(G,*k*)はパスカルの三角形を形成し、*Z*はFibonacci数になる。

[定理２]　単環グラフC_nの、*p*(G,*k*)は非対称パスカルの三角形を形成し、*Z*はLucas数になる。

なお、Fibonacci数もLucas数も，同じ漸化式 $f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$に従うが、初期値が違う。即ち

Fibonacci数：　$F_0 = F_1 ＝ 1$

Lucas数：　$L_0 = 2,\quad L_1 ＝ 1.$

３．Pell 方程式と連分数

ギリシャでは 2 千年以上も前から、$x^2 - D\,y^2 = N$ という不定方程式　(*x*, *y*, *N* は全て正の整数。*D* も正の整数だが, 平方数ではない。) が議論されていた。17 世紀にFermatが、18 世紀にEulerとLagrange が詳しくこれを研究したが、Pell方程式という名はEulerの勘違いに由来する。連分数を使った一般的な解法はLagrangeが発見したが、11 世紀のインドのBhaskara２世の方法の方が速い。

著者は最近このPell方程式について多くの新しい発見をした[5-7]。また、最速のアルゴリズムも発見した。当日はその報告を行うが，ここではその説明に必要な予備的な事項を記す。

下の表には、*N*=±4 で *D*=5 と 8 の場合の解(*x*, *y*)を示してある。これらは，何れも既知の数列で。しかも図示してあるような典型的なグラフの系列の Z-index となっている。

	$D = 5$	$f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$				$D = 8$	$f_n = 2f_{n-1} + f_{n-2}$		
Lucas numbers		1^2 Š 5×1^2 = Š 4	ϕ	Fibonacci numbers	Pell-Lucas numbers		2^2 Š 8×1^2 = Š 4	ϕ	Pell numbers
		3^2 Š 5×1^2 = 4					6^2 Š 8×2^2 = 4		
		4^2 Š 5×2^2 = Š 4					14^2 Š 8×5^2 = Š 4		
		7^2 Š 5×3^2 = 4					34^2 Š 8×12^2 = 4		
		11^2 Š 5×5^2 = Š 4					82^2 Š 8×29^2 = Š 4		

さて、任意の有理数 p/q は必ず有限連分数で表されることが分かっている。

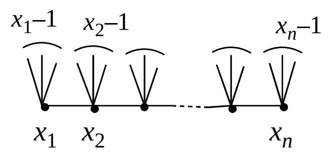
$$R_N = a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{\cdots + \cfrac{1}{a_{N-1} + \cfrac{1}{a_N}}}}} = [a_0; a_1, a_2, \cdots, a_{N-1}, a_N].$$

また、２次の無理数（平方根）は無限循環連分数で表されることも分かっている。$[a_0; \overline{a_1, a_2, \cdots, a_k}]$。上の連分数の項$a_0$, a_1, a_2を使って連分多項式（continuant）が次のように定義されている。

$\mathrm{K}_0() = 1$,　$\mathrm{K}_1(x_1) = x_1$,　$\mathrm{K}_2(x_1, x_2) = x_1 x_2 + 1$,　$\mathrm{K}_n(x_1, \cdots x_n) = x_n \mathrm{K}_{n-1}(x_1, \cdots x_{n-1}) + \mathrm{K}_{n-2}(x_1, \cdots x_{n-2})$,

更に次のような行列式表現も知られている。

$$\mathrm{K}_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \begin{vmatrix} x_1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & x_2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & x_3 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & x_{n-1} & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & x_n \end{vmatrix}$$



$C_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \mathrm{K}_n(x_1, x_2, \cdots, x_n)$

従来、このcontinuantの簡略化がうまく行かなかったのだが、右上にあるような「いもむしグラフ」（caterpillar）を定義して、そのZ-indexを $C_n(x_1, x_2, \cdots, x_n)$で表すと、次の重要な定理が証明される。

[定理 3]　連分多項式は「Z いもむし」で表される。

$$C_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \mathrm{K}_n(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

このC_nは左上の行列式に等しく、かつこれは３重対角であるから、左上と右下からtruncationを繰り返すことによって、容易に２行２列乃至は３行３列の行列式に簡略化できる。その際にグラフ理論的手法を入れてやれば、この計算は極めて容易になる。LagrangeのPell方程式の解法の鍵は連分多項式の計算にあるので、2000 年来世界中の数学者が悩んでいた解法はドラマチックに簡略化された。

参考文献

1) H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **44** (1971) 2332.　2) H. Hosoya, K. Hosoi, *J. Chem. Phys.*,**64** (1976) 1065.
3) H. Hosoya, *THEOCHEM*, **461-472** (1999) 473.　4) H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **76** (2003) 2233.
5) H. Hosoya, N. Asamoto, *Natural Sci. Rept. Ochanomizu Univ*, **57** (2006) 1-57.　6) H. Hosoya, *Ibid.*, **57** (2006) 2-19.　7) H. Hosoya, *Ibid.*, **57** (2006) 2-35.