

異性体の数え上げにおける Maple プログラミング

○ 藤田 眞作

湘南情報数理化学研究所 (〒258-0019 神奈川県足柄上郡大井町金子 479-7)

[はじめに] 演者は、三次元構造を数え上げるためのプロリガンド法 [1] を開発し、キラル・アキラルの区別、メソ体・擬不斉などの例外的な取り扱いを可能にした。さらに、プロリガンド法をモノ置換アルカン [2] およびアルカン [3] の数え上げの問題に適用して、いろいろに類別したうえで、それぞれに該当する個数を求めることに成功している。これらの問題解決には、(1) 理論構築と (2) 計算という二つの局面があり、これまでの発表では、(1) に重点をおいていた。今回の発表では、(2) に重点をおき、Maple 言語によるプログラミングと計算の実際を報告する。

[方法] ここでは置換アルカンの数え上げを例にとりて、説明する。一般的な導出は省略するが、重要なものは、次に示す 3 種の関数方程式が再帰的な性質をもっていることである

$$\text{アキラル } a(x) = 1 + xa(x)c(x^2) \quad (1)$$

$$\text{二倍体 } c(x) = 1 + \frac{x^2}{3} \{c(x^2)^3 + 2c(x^6)\} \quad (2)$$

$$\text{ステリック } b(x) = 1 + \frac{x}{3} \{b(x)^3 + 2b(x^3)\} \quad (3)$$

すなわち、炭素数 $k-1$ までの結果を右辺に代入すると、左辺で炭素数 k の結果がえられる。

[結果] 上記の再帰的な手順を Maple 言語でプログラムすると次のようになる。

```
#関数方程式の定義
ax := 1 + x*a1*c2;
cx := 1 + (1/3)*x^2*c2^3 + (2/3)*x^2*c6;
bx := 1 + (1/3)*x*b1^3 + (2/3)*x*b3;

"Initial Values"; #初期値
a1 := 1; c2 := 1; b1 := 1;
b3 := 1; c6 := 1;

kmax :=5; #繰り返し計算の最大回数
for k from 1 to kmax by 1 do
#係数の計算
Cbx:= expand(coeff(bx,x^k)):
Cax:= expand(coeff(ax,x^k)):
Ccx:= expand(coeff(cx,x^(k*2))):
#母関数の保存
a1 := a1 + Cax*x^k:
c2 := c2 + Ccx*x^(k*2):
b1 := b1 + Cbx*x^k:
c6 := c6 + Ccx*x^(k*6):
b3 := b3 + Cbx*x^(k*3):
end do;
```

Maple 言語には、多項式を展開した際の係数を求める命令 `coeff` が用意されている。再帰計算は、`do` ループを用いている。母関数の保存は、変数 a_1, c_2, b_1 によりおこなう。ここでは、計算に必要な c_6 と b_3 とを、あらわに計算して保存しているが、Maple 言語の `subs` 命令を使えば、保存した c_2 と b_1 とから二次的に導くことも可能である。次にその部分のコードを示す。

```
#母関数の保存
(中略)
c6 := subs({x=x^3},c2);
b3 := subs({x=x^3},b1);
```

このようにして求めた $a(x)$ (a_1 に保存)、 $c(x^2)$ (c_2 に保存)、および $b(x)$ (b_1 に保存) を、さらにモノ置換アルカンの数え上げなどに使う (この部分は再帰的ではない)。同様の結果は、Mathematica 言語によっても得られる [4]。

[文献] [1] Fujita, S. (2005) *Theor. Chem. Acc.* **113**, 73–79, 80–86; Fujita, S. (2006) *Theor. Chem. Acc.* **115**, 37–53. [2] Fujita, S. (2007) *Theor. Chem. Acc.*, **117**, 353–370; Fujita, S. (2007) *J. Comput. Chem. Jpn.*, **6**, 59–72, 73–90; Fujita, S. (2008) *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **81**, 193–219. [3] Fujita, S. (2007) *Theor. Chem. Acc.*, **117**, 339–351; Fujita, S. (2007) *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **57**, 265–298, 299–340; Fujita, S. (2007) *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **58**, 5–45; Fujita, S. (2008) *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **59**, 509–554; [4] 藤田眞作, Japan Mathematica Conference 2006, 東京 (2006/12/12)。