

## 限定減縮巡回指標 (RSCI) 法による数え上げとフィボナッチ数

○ 藤田 眞作

湘南情報数理化学研究所

[はじめに] 置換様式に制限を設けない数え上げについては, 一般的な方法を開発して, USCI (Unit-Subduced-Cycle-Index) 法と名づけており, 概要をモノグラフとして報告している [1, 2]. 立体障害やそのほかの制限を考慮にいたした数え上げについても, 限定減縮巡回指標 (RSCI: Restricted-Subduced-Cycle-Index) 法を開発している [3–8]. 今回は, 「嵩高いリガンドが, 立体障害のために, 隣の位置には置換し得ない」という制限のもとにおこなった数え上げ [9–11] が, フィボナッチ数と本質的な関係があることをあきらかにする. [領域指示変数と領域判別式の導入による限定 SCI-CF] 立体障害によって, 隣の位置にリガンドが置換し得ないという条件を考慮するために, 隣の位置を検出するための領域指示変数 (territory indicator) を導入する [9–11]. 骨格に含まれる頂点 (置換位置) に  $1, 2, \dots, v$  と番号をふり, 領域指示変数をダミー変数  $x_1, x_2, \dots, x_v$  として割り当てる. 減縮によって生じた軌道  $\Delta_{jk\beta}^{(i\alpha)}$  に含まれる領域指示変数の積:

$$t_{jk}^{(i\alpha)}(x_1, \dots, x_v) \quad (1)$$

を考慮して,  $\$_{d_{jk}}^{(i\alpha)} t_{jk}^{(i\alpha)}(x_1, \dots, x_v)$  を各軌道に割り当てる. これにより, 軌道  $\Delta_{jk\beta}^{(i\alpha)}$  に含まれる位置が示される. 通常  $\$_{d_{jk}}^{(i\alpha)}$  のかわりに  $1 + \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)} t_{jk}^{(i\alpha)}(x_1, \dots, x_v)$  を代入して, 次に示す領域判別式 (territory discriminant) を定義する [9–11].

$$\text{DSCI-CF}(\mathbf{G}_j; \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)}, x_1, x_2, \dots, x_v) = \prod_{i=1}^s \prod_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha_i \neq 0}}^{\alpha_i} \text{ZC}(\mathbf{G}(/G_i) \downarrow \mathbf{G}_j; \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)}) \Big|_{\substack{\$_{d_{jk}}^{(i\alpha)} = 1 + \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)} t_{jk}^{(i\alpha)}(x_1, \dots, x_v)}} \quad (2)$$

この式を展開して生ずる多項式の中から, 制限条件に合致する単項式を選ぶ. このため, 隣合う頂点の集合 (adjacency set, AS) を次のように定義する.

$$\text{AS} = \{\{k, l\} \mid \text{for all adjacent vertices } k \text{ and } l\} \quad (3)$$

これは, 辺の集合に等しい. 式 2 に含まれる単項式の中から, AS に由来する  $x_k x_l$  を含むものを除去すれば, 所望の単項式が残る. さらに, 領域指示変数の部分を除去する操作により, 次に示す限定 SCI-CF (RSCI-CF: restricted subduced cycle index chirality fittingness) が得られる.

$$\overline{\text{SCI-CF}}(\mathbf{G}_j; \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)}) = \text{DSCI-CF}(\mathbf{G}_j; \$_{d_{jk}}^{(i\alpha)}, x_1, x_2, \dots, x_v) \Big|_{\substack{x_k x_l = 0 \mid \forall \{k, l\} \in \text{AS} \\ \text{then } x_i = 1 (i=1, \dots, v)}} \quad (4)$$

これは, 通常  $\text{SCI-CF}$  から, 制限条件に適する軌道のみを選択したことに相当している [9–11].

[組合せ論とフィボナッチ数] パスカルの三角形について, 浅い対角方向の和をとると, フィボナッチ数がえられることは Lucas によって報告されている [12]. パスカルの三角形を左寄せにして, その様子を示したのが図 1 である.

パスカルの三角形とフィボナッチ数の関係は, 次の公式であらわされる.

$$F^{(n)} = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} \binom{n-k-1}{k} \quad (5)$$

たとえば,  $n=7$  のところは次のようになる.

$$\begin{array}{cccccc} 13 & - & 1 & 5 & 6 & 1 \\ \Sigma \binom{n-k-1}{k} & - & \binom{6}{0} & \binom{5}{1} & \binom{4}{2} & \binom{3}{3} \end{array}$$

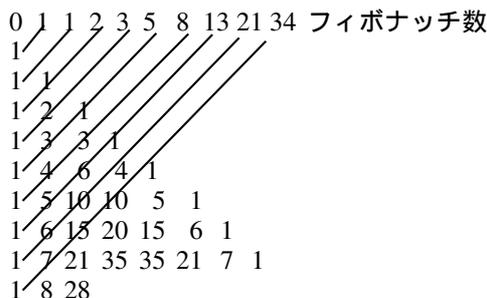


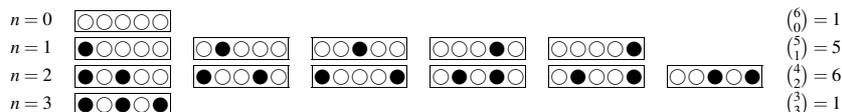
図 1: Sum of “shallow” diagonals of Pascal’s triangle

ここにあらわれる組合せの個数は、 $k$  個の黒丸をおくとすると、 $n-k-3$  個の間隔 (白丸  $n-k-2$  個) の前後を考えて、 $n-k-1 (=n-k-3+2)$  の場所に黒丸を割り込ませる組合せの数  $\binom{n-k-1}{k}$  となる。たとえば、 $n=7, k=2$  の場合は、白丸  $7-2-2=3$  となり、 $7-2-1=4$  の場所に黒丸 2 個を割り込ませることになるから、 $\binom{4}{2}=6$  がえられる。

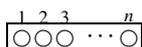
[RSCI 法の問題に帰着] 限定 SCI 法 (RSCI 法: restricted-subduced-cycle-index method) の問題に帰着するために、図形的にあらわすと、



のような骨格を考えて、5 個 ( $=7-2$ ) の収納場所に、白丸 ○ と黒丸 ● を置くことを考える。上記の組合せの問題は、「黒丸が隣接する位置に置換しない」という制限条件を課した RSCI 法の問題 [9-11] と等価になる (ただし、対称性は考えない)。このような制限条件のもとで許容される配置は次のようになる。総計は 13 となり、フィボナッチ数  $F(7) = f(5)$  に一致する (図 1 の該当する斜線を参照)。



対称性を考えると、たとえば  $n=1$  の最初と最後の配置は、同じとみなさなければならないが、フィボナッチ数を求める場合は、別物とみなす。このことは、対称性を  $C_1$  (無対称) と考えていることになる。[フィボナッチ数を RSCI 法で求める]  $n$  個の格納場所が直線状に並んだ次のような骨格を考えよう。



この骨格に白丸 ○ と黒丸 ● を置くとし、黒丸が隣り合わないような配置の個数を求める。

通常の SCI (キラリティーは考慮外) は、 $C_1$  の場合には次のように求められる:

$$SCI(C_1; s_1) = s_1^n \tag{6}$$

ただし、キラリティー適合性を考慮に入れないので、 $s_{d_{jk}}$  は減縮して、単一の  $s_1$  と考えてよい。

式 2 に従って、式 6 に対応する領域判別式 (territory discriminant) を求めると次のようになる。

$$DSCI(C_1; s_1, x_1, x_2, \dots, x_n) = \prod_{v=1}^n (1 + s_1 x_v) \tag{7}$$

この式から、式 4 に従って、RSCI を求めると次のようになる。

$$\overline{SCI}(C_1; s_1) = DSCI(C_1; s_1, x_1, x_2, \dots, x_n) \Big|_{\substack{x_k x_l = 0 \mid \forall \{k, l\} \in AS \\ \text{then } x_i = 1 (i=1, \dots, n)}} \tag{8}$$

式 8 は、 $s_1$  をダミー変数とする母関数である。この母関数 (式 8) における  $s_1^v$  の係数は、 $n$  個の収納場所をもつ骨格に  $v$  個の黒丸を隣り合わないように置く配置の個数である。

$s_1 = 1$  とおくと、フィボナッチ数  $F^{(n+2)}$  がえられる。

$$F^{(n+2)} = f^{(n)} = \overline{SCI}(C_1; 1) \tag{9}$$

たとえば,  $n = 5$  の場合は, 式 7 および式 8 を用いて RSCI を実際に計算すると, 次の母関数がえられる.

$$\overline{\text{SCI}}(\mathbf{C}_1; s_1) = 1 + 5s_1 + 6s_1^2 + s_1^3 \quad (10)$$

$s_1 = 1$  とおくと, フィボナッチ数  $F^{(7)}$  がえられる.

$$F^{(7)} = f^{(5)} = \overline{\text{SCI}}(\mathbf{C}_1; 1) = 13 \quad (11)$$

[漸化式] 上記のように  $n$  を固定した場合の領域判別式 7 を個別に計算することによって,  $n$  ごとの母関数とフィボナッチ数を求めることができる. ここでは, さらに漸化式をもとめて, RSCI 法による計算とフィボナッチ数の計算とが本質的に関係していることを説明する.

領域判別式 7 において,  $x_v$  のみを残すように RSCI (cf. 式 8) が計算できたとする:

$$f^{(n)}(s_1, x_n) = \sum_{v=1}^n (\alpha_v + \beta_v x_n) s_1^v \quad (12)$$

ただし,  $x_n$  は領域指示変数,  $s_1$  はダミー変数. 上限のところでは,  $\alpha_n = 0$  である. 式 8 と異なるのは,  $x_n$  が残っている点である. 次の  $n+1$  の項は, 次のようになる.

$$\begin{aligned} f^{(n+1)}(s_1, x_{n+1}) &= f^{(n)}(s_1, x_n)(1 + s_1 x_{n+1}) \Big|_{x_n x_{n+1}=0, x_n=1} = \sum_{v=1}^n (\alpha_v + \beta_v x_n) s_1^v (1 + s_1 x_{n+1}) \Big|_{x_n x_{n+1}=0, x_n=1} \\ &= \sum_{v=1}^n \{ (\alpha_v + \beta_v) s_1^v + \alpha_v s_1^{v+1} x_{n+1} \} \end{aligned} \quad (13)$$

条件  $x_n x_{n+1} = 0$  は, 黒丸が隣合わないようにするためである. さらに,  $x_n = 1$  とおき, 領域指示変数  $x_{n+1}$  を残すようにする.  $\alpha_n = \beta_{n+1}$ ,  $\alpha_{n+1} = 0$  などと置き換えたうえで, 上限を  $v = n+1$  となるように,  $s_1^v$  の級数として並べ替える.

$$f^{(n+1)}(s_1, x_{n+1}) = \sum_{v=1}^{n+1} (\alpha_v + \beta_v x_{n+1}) s_1^v \quad (14)$$

式 12 と式 14 を比較すると同じ形をしており, 漸化式がえられたことになる. この漸化式は,  $x_n = 1$  と置いて  $s_1$  のみを残すと, フィボナッチ数列をあたえる母関数  $f^{(n)}(s_1, 1)$  (cf. 式 12) となる

[漸化式がフィボナッチ数列を与えることの証明] 同様にして, 次の  $n+2$  項を計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned} f^{(n+2)}(s_1, x_{n+2}) &= f^{(n)}(s_1, x_n) \times (1 + s_1 x_{n+1})(1 + s_1 x_{n+2}) \Big|_{\substack{x_n x_{n+1}=0, x_{n+1} x_{n+2}=0, \\ (x_n=1, x_{n+1}=1)}} \\ &= \left\{ f^{(n)}(s_1, x_n)(1 + s_1 x_{n+1}) + f^{(n)}(s_1, x_n) s_1 x_{n+2} \right\} \Big|_{\substack{x_n x_{n+1}=0, x_{n+1} x_{n+2}=0, \\ (x_n=1, x_{n+1}=1)}} \\ &= \left\{ f^{(n+1)}(s_1, x_{n+1}) + f^{(n)}(s_1, x_n) s_1 x_{n+2} \right\} \Big|_{\substack{x_n x_{n+1}=0, x_{n+1} x_{n+2}=0, \\ (x_n=1, x_{n+1}=1)}} \end{aligned} \quad (15)$$

ただし,  $x_n x_{n+1} = 0$  および  $x_{n+1} x_{n+2} = 0$  の条件は, 黒丸が隣り合ったときに消去することをあらわす. この消去操作ののち,  $x_n = 1, x_{n+1} = 1, x_{n+2} = 1$  とおくと, RSCI の母関数としての漸化式がえられる:

$$f^{(n+2)}(s_1, 1) = f^{(n+1)}(s_1, 1) + f^{(n)}(s_1, 1) s_1 \quad (16)$$

さらに,  $s_1 = 1$  とおくと, 次の漸化式がえられる:

$$f^{(n+2)}(1, 1) = f^{(n+1)}(1, 1) + f^{(n)}(1, 1) \quad (17)$$

この漸化式は, フィボナッチ数列の漸化式と一致している.

[計算結果] 漸化式 12 をもとに, Maple 言語でプログラミングして, 実際に計算した結果を表 1 に示す.

表 1 に示した母関数 (式 8 に相当) における  $s_1^v$  の係数は,  $n$  個の収納場所をもつ骨格に  $v$  個の黒丸を隣り合わないように置く配置の個数である. 図 1 も参照のこと. また, 表 1 の右端の列に示すように,  $s_1 = 1$  とおくとフィボナッチ数を与える. ただし,  $f^{(n)} = F^{(n+2)}$ .

表 1: フィボナッチ数列をあたえる母関数の逐次計算

$n+2$	$n$	母関数 $f^{(n)}(s_1, 1)$	フィボナッチ数
3	1	$1 + s_1$	2
4	2	$1 + 2s_1$	3
5	3	$1 + 3s_1 + s_1^2$	5
6	4	$1 + 4s_1 + 3s_1^2$	8
7	5	$1 + 5s_1 + 6s_1^2 + s_1^3$	13
8	6	$1 + 6s_1 + 10s_1^2 + 4s_1^3$	21
9	7	$1 + 7s_1 + 15s_1^2 + 10s_1^3 + s_1^4$	34
10	8	$1 + 8s_1 + 21s_1^2 + 20s_1^3 + 5s_1^4$	55
11	9	$1 + 9s_1 + 28s_1^2 + 35s_1^3 + 15s_1^4 + s_1^5$	89
12	10	$1 + 10s_1 + 36s_1^2 + 56s_1^3 + 35s_1^4 + 6s_1^5$	144
13	11	$1 + 11s_1 + 45s_1^2 + 84s_1^3 + 70s_1^4 + 21s_1^5 + s_1^6$	233
14	12	$1 + 12s_1 + 55s_1^2 + 120s_1^3 + 126s_1^4 + 56s_1^5 + 7s_1^6$	377
15	13	$1 + 13s_1 + 66s_1^2 + 165s_1^3 + 210s_1^4 + 126s_1^5 + 28s_1^6 + s_1^7$	610
16	14	$1 + 14s_1 + 78s_1^2 + 220s_1^3 + 330s_1^4 + 252s_1^5 + 84s_1^6 + 8s_1^7$	987
17	15	$1 + 15s_1 + 91s_1^2 + 286s_1^3 + 495s_1^4 + 462s_1^5 + 210s_1^6 + 36s_1^7 + s_1^8$	1597
18	16	$1 + 16s_1 + 105s_1^2 + 364s_1^3 + 715s_1^4 + 792s_1^5 + 462s_1^6 + 120s_1^7 + 9s_1^8$	2584
19	17	$1 + 17s_1 + 120s_1^2 + 455s_1^3 + 1001s_1^4 + 1287s_1^5 + 924s_1^6 + 330s_1^7 + 45s_1^8 + s_1^9$	4181
20	18	$1 + 18s_1 + 136s_1^2 + 560s_1^3 + 1365s_1^4 + 2002s_1^5 + 1716s_1^6 + 792s_1^7 + 165s_1^8 + 10s_1^9$	6765
21	19	$1 + 19s_1 + 153s_1^2 + 680s_1^3 + 1820s_1^4 + 3003s_1^5 + 3003s_1^6 + 1716s_1^7 + 495s_1^8 + 55s_1^9 + s_1^{10}$	10946
22	20	$1 + 20s_1 + 171s_1^2 + 816s_1^3 + 2380s_1^4 + 4368s_1^5 + 5005s_1^6 + 3432s_1^7 + 1287s_1^8 + 220s_1^9 + 11s_1^{10}$	17711
(中略)			
25	23	$1 + 23s_1 + 231s_1^2 + 1330s_1^3 + 4845s_1^4 + 11628s_1^5 + 18564s_1^6 + 19448s_1^7 + 12870s_1^8 + 5005s_1^9 + 1001s_1^{10} + 78s_1^{11} + s_1^{12}$	75025

形式的に,  $F^{(1)} = f^{(-1)} = 1$ ,  $F^{(2)} = f^{(0)} = 1$  において, RSCI の母関数としての漸化式 16 を適用すれば,  $F^{(3)} = f(1) = 1 + s_1$  および  $F(4) = f(2) = 1 + 2s_1$  がえられる (表 1 参照). 順次計算して,  $F^{(7)} = f^{(5)}$  についても, 次のように計算できる.

$$\begin{aligned}
 f^{(4)}(s_1, 1) + f^{(3)}(s_1, 1)s_1 &= (1 + 4s_1 + 3s_1^2) + (1 + 3s_1 + s_1^2)s_1 \\
 &= 1 + 5s_1 + 6s_1^2 + s_1^3 = f^{(5)}(s_1, 1)
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

このことは, 漸化式 12 のかわりに, 漸化式 16 を用いて順次計算しても, 表 1 の結果がえられることを示している.

#### [参考文献]

- [1] S. Fujita, "Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry," Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1991).
- [2] S. Fujita, "Diagrammatical Approach to Molecular Symmetry and Enumeration of Stereoisomers," University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac (2007).
- [3] S. Fujita, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **85**, 282–304 (2012).
- [4] S. Fujita, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **85**, 439–449 (2012).
- [5] S. Fujita, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **69**, 263–290 (2013).
- [6] S. Fujita, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **69**, 291–310 (2013).
- [7] S. Fujita, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **69**, 311–332 (2013).
- [8] S. Fujita, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **69**, 333–354 (2013).
- [9] S. Fujita, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **11**, 131–139 (2012).
- [10] S. Fujita, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **11**, 140–148 (2012).
- [11] 藤田眞作, 日本コンピュータ化学会 2011 秋季年会, 1005 (2011), 置換様式の制限を考慮した化合物の数え上げ.
- [12] E. Lucas, "Théorie des Nombres," Gauthier-Villars et Fils, Paris (1891).