2部グラフの完全マッチングの分配関数とカステレイン行列式

青山学院大学　理工学部　物理・数理学科
15110028　栢木駿輔　西山研究室

2014年2月20日

目次

1　序論

私が映画「ダ・ヴィンチコード」を見てフィボナッチ数列に興味を持ち，詳しく知りたいと思ったことが，私が本研究でフィボナッチ数列が絡む今回の題材を選んだ背景にある． フィボナッチ数列とは連続する 2 つの項を加えると次の項になるという数列の中で，初項も第 2 項も 1 である $1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \cdots$ となる． フィボナッチは「兎の増殖問題」でこの数列を紹介したが，そのほかにもこの数列が登場する問題がいくつかあり，その中の 1 つに「マッチング問題」がある.「マッチング問題」はグラフ理論の問題である. グラフとは頂点と辺からなっているが，そのグラフ中から互いに隣り合わない辺を選ぶ組み合わせの数を数える問題である． 本研究では，このマッチング問題を分配関数，カステレイン行列の一般論を元に具体的な場合に考える.

2 種類の頂点からなるグラフであって，辺は 2 種類の頂点の間にしかないものを 2 部グラフと呼ぶ．このようなグラフの中で，隣同士の辺を選ばないようにとびとびに辺を選んだとき，選んだ辺の端点がすべての頂点を含むような場合の選び方を完全マッチングという．分配関数はグラフの完全マッチングを重み付きで数え上げる量であり，Kasteleyn はカステレイン行列を導入し，分配関数がカステレイン行列の行列式で表せることを示した.

本研究では，フィボナッチ数列が現れるグラフの分配関数とカステレイン行列式の関係から，フィボナッチ数列のおもしろい等式を求めることから発展させ，他のグラフの分配関数とカステレイン行列式の関係式を導く.

2　2 部グラフ

2.1　2 部グラフと完全マッチング

グラフとは，いくつかの頂点を辺で結んだものであるが，数学的に少し厳密な定義を与えよう．

定義 2.1 (グラフ) グラフ G とは有限個の頂点の集合 V と辺の集合 $E \subset V \times V$ の組である．頂点を $V = \{v_1, \cdots, v_n\}$ とおくとき，$(v_i, v_j) \in E$ と (v_j, v_i) は同一視して考えることとする．また，$(v_i, v_i) \notin E$ を仮定する．

※注意

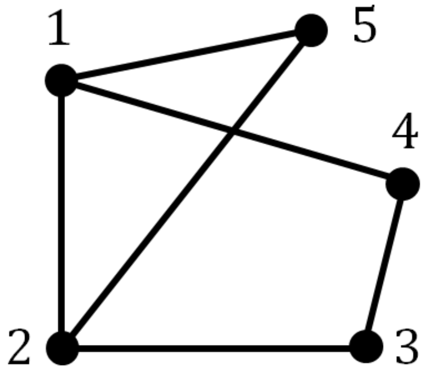
1. この論文で考える辺には方向が付いていないが，方向をつけて (v_i, v_j) と (v_j, v_i) は異なる辺であると考えることもある．このようなとき**有向グラフ**と呼び，われわれの考えているグラフを**無向グラフ**と呼ぶことがある．
2. $(v_i, v_i) \notin E$ という条件は，グラフにループが含まれていないことを意味している．

例 2.1 $G = (V, E)$: 5 頂点のグラフの例

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$$

$$E = \{(1, 2), (1, 4), (1, 5), (2, 3), (2, 5), (3, 4)\}$$

これを図示すると下図のようになる．



以下，「ループ」「多重辺」がないグラフ $G = (V, E)$ を考える．

本論文で主に扱うのは，グラフの中でも 2 部グラフと呼ばれる特殊な性質を持つグラフである．

定義 2.2 (2 部グラフ) $G = (V, E)$ がグラフであって次の性質を満たすときに 2 **部グラフ**と言う．

1. 頂点集合 V は $V = V_1 \cup V_2, (V_1 \cap V_2 = \emptyset)$ と分割されている．
2. 辺集合 E は $E \subseteq \{(v, v')|v \in V_1, v' \in V_2\}$ を満たす．

この定義 2.2 は,

1. 頂点が 2 色 (この論文では V_1 に白，V_2 に黒を対応させている) で塗り分けられている．
2. 辺の両端の頂点は異なる色である．

と解釈できる．以下この論文では，このような直感的な解釈を多用する．以下， 2 部グラフ G を $(V_1, V_2; E)$ と書き，$e \in E$ に対して端点となっている白の頂点を $w(e)$，黒の頂点を $b(e)$ で表す．

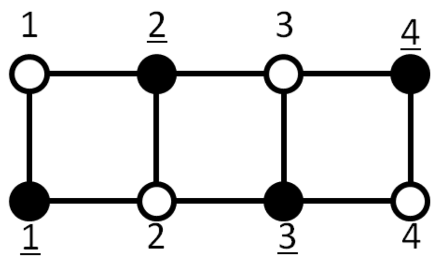


図 1　2 部グラフの例 1

定義 2.3 2 部グラフ $G = (V_1, V_2; E)$ に対して，端点を共有しない辺の集合 $M = \{e_1, \cdots, e_m\} \subseteq E$ を**マッチング**という．この条件を記号を用いて書くと次のようになる．M に属する 2 辺を $e_i = (w_i, b_i)$ $(w_i \in V_1, b_i \in V_2; i = 1, 2)$ と書くと,

$$M \text{ がマッチング} \iff w_1 \neq w_2 \;, \quad b_1 \neq b_2.$$

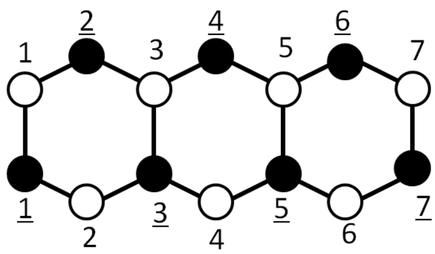


図 2　2 部グラフの例 2

マッチングとは，異なる頂点同士のペアを作ることであるが，すべての頂点をペアにできるような状況を考えると，そのときは必然的に $\#V_1 = \#V_2$ でなければならない．例えば男女間の結婚問題を考えると，この条件は全ての男女が結婚できる状況を考えることに相当する．我々はこのような状況に興味があるので以下次を仮定する．

$$N := \#V_1 = \#V_2$$

このとき，G の頂点の個数は $\#V = 2N$ である．

定義 2.4　2 部グラフ G において $N = \#V_1 = \#V_2$ のとき，以下の条件を満たすマッチングを**完全マッチング**と呼ぶ.

- $M = \{e_i = (w_i,\ b_i) | 1 \leq i \leq N\}$ はマッチング
- $\{w_i | i = 1, \cdots, N\} = V_1$, $\{b_i | i = 1, \cdots, N\} = V_2$

また，グラフ G に対して完全マッチング全体のなす集合を $\mathcal{M}$ で表す.

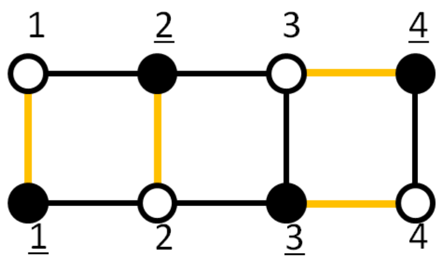


図 3　完全マッチングの例 (オレンジの辺がマッチング)

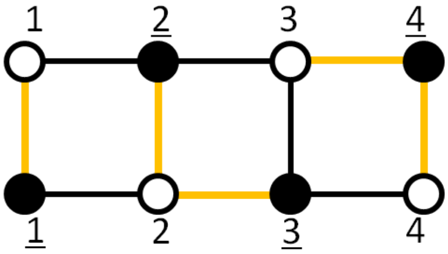


図 4　マッチングではない例

2.2　重みと分配関数

2 部グラフ $G = (V_1, V_2; E)$ が与えられたとき，各辺に**「重み」**と呼ばれる量を対応させる．この論文では与えられた重みは正の実数であるとする．重みは「ウェイト」と呼ばれることもある．各辺 $e \in E$ に対応した重みを $W(e) > 0$ で表す．$W(e)$ を**重み関数**と呼ぶ．

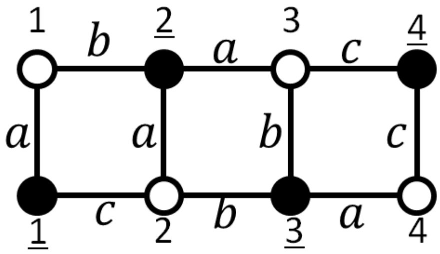


図 5　重み付きグラフの例

定義 2.5　　この辺の重みを用いて完全マッチング $M \in \mathcal{M}$ の**ボルツマンの重み** $W(M)$ を

$$W(M) := \prod_{e \in M} W(e) \tag{2.1}$$

で定める．ボルツマンの重みを用いてグラフの**分配関数** Z を

$$Z := \sum_{M \in \mathcal{M}} W(M) \tag{2.2}$$

で定める．

3　カステレイン行列

本章では，この論文で用いるグラフ理論の基本的な概念と定義を復習する．グラフ理論については [1] を参照して欲しい．

以下， 頂点を $V = V_1 \cup V_2, V_1 = \{w_1, \cdots, w_N\}, V_2 = \{b_1, \cdots, b_N\}$ と表し，順序を固定して考える．このとき， G に付随してウェイト付きの 2 部グラフ $G = (V_1, V_2; E)$ の各辺に対して，符号 ± 1 を対応させる．この符号は G の辺 $e = (w_i, b_j) \in E$ ごとに指定されるので $\epsilon(e) = \epsilon_{ij}$ と表す．このとき，ウェイトおよび符号付き行列 $K = (K_{ij})_{i,j=1}^N$ の成分を

$$K_{ij} = \begin{cases} \epsilon_{ij} W(w_i, b_j) & ((w_i, b_j) \in E) \\ 0 & ((w_i, b_j) \notin E) \end{cases}$$

で定める．

グラフに対応して決まった行列 K の行列式を以下考えてみよう．1 つのマッチング M に対して $1, \cdots, N$ の置換が自然と対応する．それをまず説明する．この M に対応する項の置換について考える．

K の行列式は定義より，

$$\det K = \sum_{\sigma \in S_N} \mathrm{sgn}(\sigma) K_{1\sigma(1)} \cdots K_{N\sigma(N)}$$

と表せる．ここで，K_{ij} の定義より，G の辺でない (w_i, b_{σ_i}) $(i = 1, \cdots, N)$ が含まれる項は 0 になり消えてしまい，行列式は各行 (V_1 に対応)，各行 (V_2 に対応) から 1 つづつ行列の要素をとって積をとるので，行列式の各項には端点を共有しない辺のみの積が現れる．つまり各項はゼロでなければ完全マッチングをと対応しているため，

$$M = \{(w_1, b_{\sigma(1)}), \cdots, (w_N, b_{\sigma(N)})\} \tag{3.1}$$

が G の完全マッチングとなる項のみの場合は，すべての項が 0 でなく符号と重みを持っているため掛け合わせても 0 にならずに生き残る．マッチング $M = \{e_1, \cdots, e_N\}$ 中の $w(e_i)$ に $b(e_i)$ を対応させる写像は V_1 から V_2 への全単射を引き起こす．これを $1, \cdots, N$ の置換と見ることができて，それは

$$(w_i, b_j) \in M \Longleftrightarrow \sigma_M(i) = j \tag{3.2}$$

と書ける．これを

$$\sigma_M = \begin{pmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_N \\ b_{\sigma_1} & b_{\sigma_2} & \cdots & b_{\sigma_N} \end{pmatrix}$$

のようにも表す．完全マッチング M に対して，符号を

$$\epsilon(M) = \prod_{i=1}^{N} \epsilon_{i\sigma(i)} = \prod_{e \in M} \epsilon(e)$$

と決めると，結局， K の行列式は

$$\det K = \sum_{M \in \mathcal{M}} \operatorname{sgn}(\sigma_M)\epsilon(M)W(M) \tag{3.3}$$

と表せる．さらに，この行列式において

$$\operatorname{sgn}(\sigma_M)\epsilon(M) \textbf{ は } M \textbf{ によらず一定値をとる} \tag{3.4}$$

という条件 (**定符号条件**と呼ぶ) が満たされれば， この値を総和の外に出すことができて，

$$\det K = \pm \sum_{M \in \mathcal{M}} W(M) = \pm Z \tag{3.5}$$

となる．

定義 3.1 　定符号条件を満たすような符号付行列 K のことを**カステレイン行列**と呼ぶ．

上で説明したことにより，次の定理が成り立つことが分かる．

定理 3.2 　定符号条件 (3.4) が成立するとき，分配関数 Z はカステレイン行列 K を用いて

$$Z = |\det K| \tag{3.6}$$

と表せる．

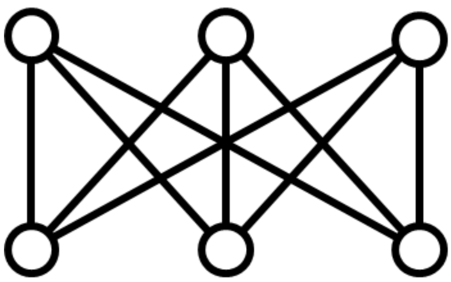


図 6　3 次の完全 2 部グラフ $K_{3,3}$

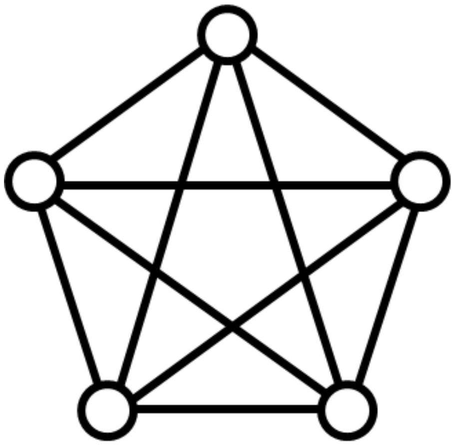


図 7　5 次の完全グラフ K_5

一般のグラフでは，完全 2 部グラフ $K_{3,3}$ を部分グラフに含まないような 2 部グラフなら，うまく符号を取って定符号条件を満たすようにできることがグラフ理論で知られている．

平面グラフに対しては定符号条件が成り立つように符号を選ぶことができることを P. Kasteleyn が証明している ([4])．また， $K_{3,3}$ と K_5 を含まないようなグラフは平面グラフとして実現できることが知られている (Kuratowski-Wagner の定理 [5], [6])．したがって， $K_{3,3}$ と K_5 を含まないグラフでは定符号条件を満足するように符号をつけることができるが，もっと一般的に $K_{3,3}$ を部分グラフに含まないグラフに対して，定符号条件が満たされることが V. V. Vazirani により証明されている ([7])．

4　マッチングの回転

定符号条件 (3.4) を満たすような符号の構成をする．G が 2 部グラフであるとする．

定義 4.1　G の閉路 C とは頂点の列であって，隣り合う頂点は辺を定め，そのようにして定めた辺には重複がないとも言う．始点と終点を除いて頂点にも重複がない．また，C は辺の列とも考えられる．$C = \{(v_i, v_{i+1}) | 0 \leq i \leq 2n-1\} \subset E$ とおく．G の閉路を $C = (v_0, v_1, \ldots, v_{2n-1}, v_0)$ と表す．あるマッチング M が存在して $(v_{2n}, v_{2n+1}) \in M, (v_{2n+1}, v_{2n+2}) \notin M$ を満たすとき，C を**交互閉路**という．

定義 4.2　M から C に含まれる辺を取り除き，そこに C の他の辺を付け加えると新た

なマッチング M' が得られる．$C = (M \cup C) \cup (M \setminus C) = C_M \cup C'_M$ と書くと，

$$M' = (M \setminus C_M) \cup C'_M$$

であって，この操作 $M \mapsto M'$ を C による**マッチングの回転**という．

M と M' の辺の個数は等しい． 特に M が完全マッチングならば M' も完全マッチングになる．

定理 4.3 M, M' を任意の完全マッチングとすると， $C_1, \cdots, C_m$: 交互閉路の組

$$\begin{cases} (1) & C_1, \cdots, C_m \text{は頂点を共有しない.} \\ (2) & (M \cup M') \setminus (M \cap M') = \bigcup_{i=1}^{m} C_i \end{cases}$$

(ただし，辺の集合としてみたとき) となるようなものが存在する．各 $C_1, \cdots, C_m$ で M を回転してゆくことによって M から M' を得ることができる．

上の定理は 1 つの完全マッチングがあれば，それを交互閉路を用いて次々と回転してゆくことによって，全ての完全マッチングが作られることを意味している．

5 定符号条件が成立する為の条件

マッチング M の交互閉路 C に関する回転によって $\mathrm{sgn}(\sigma_M)\epsilon(M)$ が変化しなければ定符号条件が成立する． つまり

$$\mathrm{sgn}(\sigma_M)\epsilon(M) = \mathrm{sgn}(\sigma_{M'})\epsilon(M') \tag{5.1}$$

を満たせばよい．交互閉路を

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

と表し，$(w_{i_1}, b_{j_1}), (w_{i_2}, b_{j_2}) \cdots, (w_{i_n}, b_{j_n})$ が M に属すると， M' に属するのは $(w_{i_2}, b_{j_1}), (w_{i_3}, b_{j_2}), \cdots, (w_{i_1}, b_{j_n})$ である．置換と完全マッチングの対応 (3.2) より

$$\sigma := \sigma_M = \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \ldots & i_n & \ldots \\ j_1 & j_2 & \ldots & j_n & \ldots \end{pmatrix}$$

$$\sigma' := \sigma_{M'} = \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \ldots & i_n & \ldots \\ j_n & j_1 & \ldots & j_{n-1} & \ldots \end{pmatrix}$$

と表せる．これより， σ と σ' は

$$\sigma = (j_1 j_2 \ldots j_n)\sigma'$$

という関係で結ばれている．σ と σ' の符号は

$$\mathrm{sgn}(\sigma) = (-1)^{n-1}\mathrm{sgn}(\sigma')$$

という関係にある． この関係を用いて， (5.1) は

$$\epsilon(M) = (-1)^{n-1}\epsilon(M') \tag{5.2}$$

と言い換えられる．$M'' = M \cap M'$ と書くと，

$$M = C_M \cup M'', \quad M' = C_{M'} \cup M''$$

と表せ，それらの符号は

$$\epsilon(M) = \epsilon(C_M)\epsilon(M'')$$

$$\epsilon(M') = \epsilon(C_{M'})\epsilon(M'')$$

より，

$$\epsilon(C_M) = (-1)^{n-1}\epsilon(C_{M'})$$

$$\epsilon(C) = \epsilon(C_M)\epsilon(C_{M'}) = (-1)^{n-1} = (-1)^{\frac{|C|}{2}-1}$$

となるため，マッチングが姿を消して，交互閉路 C に関する量だけで書かれた式

$$\epsilon(C) = (-1)^{\frac{|C|}{2}-1} \tag{5.3}$$

が得られる．ここで $|C|$ は C の道のり， $\epsilon(C)$ は C の各辺の符号因子の積， すなわち

$$\epsilon(C) = \prod_{e\in C}\epsilon(e)$$

である．以上をまとめて次の定理が証明された．

定理 5.1　G の任意の閉路 C が (5.3) を満たせば， 定符号条件 (3.4) が成立する．

6　正方格子を横一列に並べたグラフ

具体的な例で**定理** 3.2 を用いて分配関数とカステレイン行列の例を計算しよう．この章では，正方格子を n 個並べたグラフ $G_{2,n}$ において，縦辺と横辺の重みをそれぞれ a, b（ともに正数）としたものを考える．分配関数を $Z_{2,n}$ と書く．

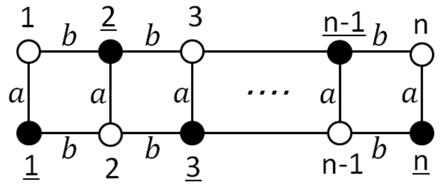


図 8　正方格子 $G_{2,n}$

6.1　分配関数 $Z_{2,n}$ の漸化式

分配関数 $Z_{2,n}$ の漸化式を格子の右端のマッチングの選び方 (2) 通りに注目して，帰納的に求める．

(ア)　右端の縦辺にマッチングを選ぶとき， 右端の正方格子を除いた残りの $2 \times (n-1)$ の格子に任意のマッチングが選べるのでマッチングの重みの総和は $Z_{2,n-1} \times a$

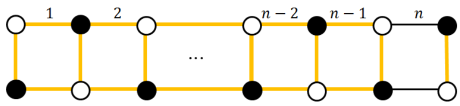


図 9　(ア) の場合

(イ)　右端の正方格子の横辺二つをマッチングとして選ぶとき， 右端の二つの正方格子を除いた $2 \times (n-2)$ の格子に任意のマッチングが選べるのでマッチングの重みの総和は $Z_{2,n-2} \times b^2$

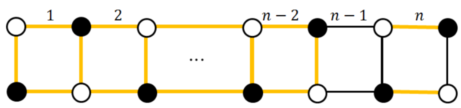


図 10　(イ) の場合

$Z_{2,n}$ はこれらの総和に等しいので

$$Z_{2,n} = aZ_{2,n-1} + b^2 Z_{2,n-2} \tag{6.1}$$

という漸化式を満たす．したがって，形式的に $Z_{2,0}=1$ と定め，$n=1,2$ の場合の値

$$Z_{2,1}=a, \quad Z_{2,2}=a^2+b^2$$

から出発して， 順次 $Z_{2,n}$ を求めることができる．$Z_{2,n}$ は

$$Z_{2,n}=\frac{2^{-n-1}((a+\sqrt{a^2+4b^2})^{n+1}-(a-\sqrt{a^2+4b^2})^{n+1})}{\sqrt{a^2+4b^2}} \tag{6.2}$$

であり，特に $a=b=1$ の場合には， $Z_{2,n}$ は**フィボナッチ数列**に一致する．フィボナッチ数列 F_n とおくと，一般項は

$$F_n=\frac{(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^{n+1}-(\frac{1-\sqrt{5}}{2})^{n+1}}{\sqrt{5}} \tag{6.3}$$

である．

6.2 $G_{2,n}$ のカステレイン行列式

$G_{2,n}$ に対する行列 K を定めるため， 白頂点と黒頂点に左から順に $1,2,\cdots,n$ と番号を割り振る． さらに， 符号因子 $\epsilon(e)$ として白頂点 m と黒頂点 $m+1$ を結ぶ辺に -1 を， それ以外の辺には $+1$ を割り振る．K は

$$K=\begin{pmatrix} a & -b & 0 & \cdots & 0 \\ b & a & -b & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & b & a & -b \\ 0 & \cdots & 0 & b & a \end{pmatrix} \tag{6.4}$$

という形の $n\times n$ 行列になる．この K は定符号条件を満たすことが定理 5.1 より分かる．つまり K はカステレイン行列である．

n 行列 K の固有ベクトルを求めて対角化することができれば， 固有値の積として行列式の値が求められる．K の固有ベクトルを求めるには， 問題を差分方程式に翻訳すると都合が良い． K のベクトル $\boldsymbol{\varphi}=(\varphi_m)_{m=1}^n\in\mathbb{C}^n$ への作用を成分で表すと (φ_m は第 m 成分)

$$(K\boldsymbol{\varphi})_m=b\varphi_{m-1}+a\varphi_m-b\varphi_{m+1}$$

となる． こうして K の固有値問題は λ を固有値とすると，

$$b\varphi_{m-1}+a\varphi_m-b\varphi_{m+1}=\lambda\varphi_m \tag{6.5}$$

という差分方程式に帰着するが，次の境界条件

$$\varphi_0 = \varphi_{n+1} = 0 \tag{6.6}$$

が課されていることに注意する．これを解くことにより固有関数 φ_m と固有値 λ が得られる．解法は参考文献 [1] にあるので，ここでは結果だけを紹介すると行列式 K は $k = 1, 2, \cdots, n$ に対して n 個の固有関数

$$\varphi_m^{(k)} = i^m \sin \frac{\pi k m}{n+1}$$

と固有値

$$\lambda_k = a - 2ib \cos \frac{\pi k}{n+1} \quad (1 \leq k \leq n)$$

を持つ．ただし，$i = \sqrt{-1}$ は虚数単位である． K の行列式はこれらの固有値の積として

$$\det K = \prod_{k=1}^{n} (a - 2ib \cos \frac{\pi k}{n+1}) \tag{6.7}$$

と表せる．

6.3 フィボナッチ数列の漸化式の一般項とカステレイン行列式の関係

式 (6.3), (6.7) と**定理** 3.2 を用いることにより，

$$\begin{aligned} Z_{2,n} &= \frac{2^{-n-1}((a + \sqrt{a^2 + 4b^2})^{n+1} - (a - \sqrt{a^2 + 4b^2})^{n+1})}{\sqrt{a^2 + 4b^2}} \\ &= \prod_{k=1}^{n} (a - 2ib \cos \frac{\pi k}{n+1}) = \det K \end{aligned} \tag{6.8}$$

特に，$a = b = 1$ のときには，

$$F_{2,n} = \frac{(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^n - (\frac{1-\sqrt{5}}{2})^n}{\sqrt{5}} = \prod_{k=1}^{n} (a - 2ib \cos \frac{\pi k}{n+1}) = \det K \tag{6.9}$$

が成り立つ．

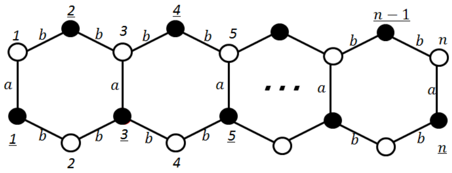


図 11　六角格子

7　六角格子

この例は，自分で考えてみた．六角形を横一列に並べたグラフについて前章と同様に分配関数とカステレイン行列式の関係を求めてみる．

　六角格子を m 個並べたグラフを G_m と書く．2 つの隣り合う六角形が共通している辺とそれに平行な辺の重みを a，それ以外の辺の重みを $b(a,\ b$ はともに正数)，各頂点の数を n とすると，$n = 2m + 1$ が成り立つ．G_m の分配関数を Z_m と書く．

7.1　分配関数 Z_m の漸化式

分配関数 Z_m の漸化式を前章と同様に右端の六角格子に注目して帰納的に求める．各マッチングに対応した右端の六角格子の辺の選び方は 2 通りあり，それぞれの場合に分けて考える．

1 通り目は，一番右端の六角格子の一番右の縦辺を含むマッチングを選ぶ場合である．このとき，一番右端の六角格子を除いた残りの $m - 1$ の格子に任意のマッチングが選べるため，マッチングの重みの総和は $b^2 Z_{m-1}$ となる．

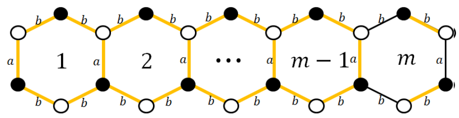


図 12　1 の場合

2 通り目は，一番右端の六角格子に 1 通り目ではないもう一方のマッチングを選ぶ場合である．このとき，m 個目の六角格子を除いた全ての六角格子のマッチングの選び方は一通りに決まる．そのため，マッチングとして選んだ全ての辺の重みを掛け合わせて，

マッチングの重みの総和は ab^{2m} となる．

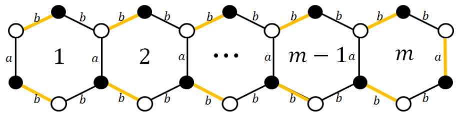


図 13　2 の場合

これより， 2 通りのマッチングの重みの総和をそれぞれ足し合わせて， Z_m の漸化式

$$Z_m = b^2 Z_{m-1} + ab^{2m} \tag{7.1}$$

を得る．この漸化式の一般項を求めよう．(7.1) の両辺を b^{2m} で割り

$$W_m = \frac{Z_m}{b^{2m}}$$

とおくと

$$W_m = W_{m-1} + a$$

となり，W_m は等差 a の等差数列になっていることがわかる． 初項は $Z_1 = 2ab^2$ より $W_1 = 2a$ を用いて

$$W_m = am + a$$

である． この両辺に b^{2m} をかけることにより Z_m の一般項

$$Z_m = ab^{2m}(m+1) \tag{7.2}$$

が得られる．

定理 7.1 六角格子 G_m の分配関数 Z_m は

$$Z_m = ab^{2m}(m+1)$$

で与えられる．

7.2　G_m のカステレイン行列式

G_m に対する行列 K を定めるため， 白頂点と黒頂点に左から順に $1, 2, \cdots, n$ と番号を割り振る． さらに， 符号因子 $\epsilon(e)$ として白頂点 m と黒頂点 $m+1$ を結ぶ辺に -1

を，それ以外の辺には $+1$ を割り振る．このようにおくと K は

$$K = \begin{pmatrix} a & -b & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ b & 0 & -b & \ddots & & & \vdots \\ 0 & b & a & -b & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & b & 0 & -b & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & b & 0 & -b \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & b & a \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

$$K = a\sum_{i=0}^{m} E_{2i+1,\ 2i+1} + b\sum_{i=1}^{2m}(E_{i+1.\ i} - E_{i,\ i+1}) \tag{7.4}$$

という形の $n \times n$ 行列になり，定符号条件を満たす．つまり K はカステレイン行列である．

K の固有値を求めるために，K のベクトル $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_j)_{j=1}^{n}$ への作用は偶数成分と奇数成分で結果が分かれ，奇数成分では前章と同じく

$$(K\boldsymbol{\varphi})_j = b\varphi_{j-1} + a\varphi_j - b\varphi_{j+1}$$

となり，偶数成分では

$$(K\boldsymbol{\varphi})_j = b\varphi_{j-1} - b\varphi_{j+1}$$

となる．奇数成分に注目して，$\theta = \frac{\pi k}{n+1}$ に対して，前章と同様の φ

$$\varphi_j^{(k)} = i^j \sin j\theta$$

と λ

$$\lambda_k = a - 2ib\cos\theta$$

を用いて計算をしてみることにする．G_m のカステレイン行列 K は正方格子の場合と異なり，奇数列と偶数列で成分の並び方が違うので，2 つのベクトル

$$\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \\ \varphi_3 \\ 0 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_2 \\ 0 \\ \varphi_4 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7.5}$$

に分けて， K の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u}$ への作用を計算してみる． K の $\boldsymbol{v}$ への作用は

$$K\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} a\varphi_1 \\ b\varphi_1 - b\varphi_3 \\ a\varphi_3 \\ b\varphi_3 - b\varphi_5 \\ \vdots \\ a\varphi_n \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \\ \varphi_3 \\ 0 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ b\varphi_1 - b\varphi_3 \\ 0 \\ b\varphi_3 - b\varphi_5 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{7.6}$$

ここで， (6.5) の関係式

$$b\varphi_{j-1} - b\varphi_{j+1} = \lambda\varphi_j - a\varphi_j \tag{7.7}$$

を (7.6) に代入することにより

$$K\boldsymbol{v} = a \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \\ \varphi_3 \\ 0 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} + (\lambda_k - a) \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_2 \\ 0 \\ \varphi_4 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = a\boldsymbol{v} + (\lambda_k - a)\boldsymbol{u} \tag{7.8}$$

となる． K の $\boldsymbol{u}$ への作用は

$$K\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} -b\varphi_2 \\ 0 \\ b\varphi_2 - b\varphi_4 \\ 0 \\ \vdots \\ b\varphi_{n-1} \end{pmatrix} \tag{7.9}$$

となるが，(7.9) の右辺が

$$(\lambda_k - a) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \\ \varphi_3 \\ 0 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} \tag{7.10}$$

と一致しているかを確認する． それには 第 1 成分と 第 n 成分を確認しなければならない (それ以外の行は (7.7) で確認できる)．式 (7.9) の第 1 成分は,

$$-b\varphi_2 = -bi^2 \sin 2\theta = b \sin 2\theta$$

であって，式 (7.10 の第 1 成分は,

$$(\lambda_k - a)\varphi_1 = -2ib\cos\theta i\sin\theta = -i^2 b2\sin\theta\cos\theta = b\sin 2\theta$$

であるから，両者が等しいことが確認された．第 n 成分を比較すると，それぞれ,

$$b\varphi_{n-1} = bi^{n-1}\sin(n-1)\theta$$

$$(\lambda_k - a)\varphi_n = -2i^{n+1}b\sin n\theta\cos\theta$$

$$= -i^{n+1}b(\sin(n+1)\theta + \sin(n-1)\theta)$$

$$= -b(i^{n+1}\sin(n+1)\theta + i^{n+1}\sin(n-1)\theta)$$

となるが，境界条件 $i^{n+1}\sin(n+1)\theta = \varphi_{n+1} = 0$ より

$$(\lambda_k - a)\varphi_n = bi^{n-1}\sin(n-1)\theta$$

となることが分かる．したがって，第 n 成分も等しいことが確認された．つまり

$$K\boldsymbol{u} = (\lambda_k - a)\boldsymbol{v} \tag{7.11}$$

である．式 (7.8), (7.11) より

$$K(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})\begin{pmatrix} a & \lambda_k - a \\ \lambda_k - a & 0 \end{pmatrix} \tag{7.12}$$

となるので， K の固有値を求めるには

$$A = \begin{pmatrix} a & \lambda_k - a \\ \lambda_k - a & 0 \end{pmatrix}$$

の固有値を求めればよい． 固有値は 2 つ存在し， それぞれ s_1, s_2 とすると

$$s_1 = \frac{a + \sqrt{a^2 + 4(\lambda_k - a)^2}}{2} = \frac{a + \sqrt{a^2 - 16b^2(\cos\theta)^2}}{2}$$

$$s_2 = \frac{a - \sqrt{a^2 + 4(\lambda_k - a)^2}}{2} = \frac{a - \sqrt{a^2 - 16b^2(\cos\theta)^2}}{2}$$

ここで，A の固有値は λ_k で書かれているので，$k = 1, 2, \cdots, n$ に対して全部で $2n$ 個でてくるが，$(\cos\theta)^2 \quad (0 < \theta < \pi)$ を用いて表されているために，同じ値が 2 つずつでて

くることに注意する．従って，固有値は全部で n 個得られることになる．A の 2 つの固有値の積は

$$s_1 s_2 = 4b^2(\cos\theta)^2$$

よって，$\det K$ は n 個の固有値の積で表せるが, $n = 2m+1$(奇数) であること, $k = m+1$ のとき，$\theta = \frac{\pi}{2}$ となり，そのときには,

1. $\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ であり，固有値は a である．
2. $\boldsymbol{u} = \mathbf{0}$ であり，$\boldsymbol{u}$ は固有ベクトルではない．

となり，固有値が a の 1 つのみ現れることをあわせて考えると

$$\det K = a\prod_{k=1}^{m} 4b^2(\cos\frac{\pi k}{n+1})^2 \tag{7.13}$$

であることが分かる．

式 (7.2), (7.13) より，**定理** 3.2 を用いて次の定理を得る．

定理 7.2　六角格子 G_m の分配関数 Z_m は

$$Z_m = ab^{2m}(m+1) = a\prod_{k=1}^{m} 4b^2(\cos\frac{\pi k}{n+1})^2 = \det K \tag{7.14}$$

と書ける．

等式 (7.14) は両辺が a, b の多項式なので，任意の複素数 a, b に対して成り立つことに注意する．

7.3 付録

定理 7.2 で得られた等式 (7.14) を別の方法でも確認をしてみる．n を偶数とし，$n = 2m+2$ とおく．$x^n - 1$ の因数分解は $e^{ik\xi}$ $(\xi = \frac{2\pi}{n})$ とすると

$$x^n - 1 = \prod_{k=0}^{n-1}(x - e^{ik\xi}) \tag{7.15}$$

と表せる．ここで，$e^{ik\xi}$ の複素共役は

$$\overline{e^{ik\xi}} = \overline{\cos(k\xi) + i\sin(k\xi)} = \cos(k\xi) - i\sin(k\xi) = e^{-ik\xi} = e^{(n-k)\xi}$$

となるため，k 番目と $n-k$ 番目の根は複素共役である．

$$(x-e^{ik\xi})(x-e^{(n-k)\xi}) = x^2 - 2\cos(k\xi)x + 1$$

ここで $k=0$ のとき

$$x - e^0 = x - 1$$

$k = \frac{n}{2}$ のとき

$$x - e^{i\frac{n}{2}\xi} = x + 1$$

となることを用いて，(7.15) は

$$x^n - 1 = (x-1)(x+1)\prod_{k=1}^{m}(x^2 - 2\cos(k\xi)x + 1)$$

と表せる．両辺を x^2-1 で割ると

$$x^{2m} + x^{2m-2} + \cdots + x^2 + 1 = \prod_{k=1}^{m}(x^2 - 2\cos(k\xi)x + 1)$$

$x=-1$ を代入すると

$$m+1 = \prod_{k=1}^{m}(2 + 2\cos(k\xi)) \tag{7.16}$$

となる．ここで

$$2 + 2\cos(k\xi) = 2(1+\cos(k\xi)) = 2(2(\cos\frac{k\xi}{2})^2) = 4(\cos\frac{k\xi}{2})^2$$

であるから，式 (7.16) は

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

と書き換えられる．これを少し変形して

$$\prod_{k=1}^{m}(\cos\frac{\pi k}{n})^2 = \frac{m+1}{4^m} \tag{7.17}$$

となる．この式を用いると定理 7.2 の式 (7.14) の右辺は

$$a\prod_{j=1}^{m} 4b^2(\cos\frac{\pi j}{n+1})^2 = 4^m ab^{2m}\prod_{k=1}^{m}(\cos\frac{\pi k}{n})^2$$

$$= 4^m ab^{2m}\frac{m+1}{4^m} = ab^{2m}(m+1)$$

となり，左辺と一致することが分かる．

8　今後の課題

卒業研究において，時間不足により研究できなかったことを以下にまとめる.

1. 正方格子が横一列に並んだグラフから六角格子が横一列に並んだグラフへと発展させた.　さらに八角格子での計算にも手をつけたが六角格子と同様の手法が通用せず，結論を出すことができなかった.

2. 完全マッチングの分布を表す相関関数というものもあり，それをを用いて完全マッチングの分布についても調べてみたかったが，分配関数の計算に時間をとられて手がつけられなかった.

今後の課題としては，　八角格子での計算を最後まで行い結論を出すとともに，　八角格子以上の格子での計算をしていきたいと思う.　相関関数についても具体的に計算し，　なにか面白い関係性など発見できることも期待したい.

9　参考文献

参考文献

[1] 高崎金久,「線形代数と数え上げ」日本評論社, 2012

[2] 細矢治夫,「トポロジカル・インデックス」日本評論社, 2012

[3] 西山享,「多項式のラプソディー」日本評論社, 1999

[4] P. Kasteleyn. The physics of dimers on a lattice, Physica 27 (1961), 1209 – 1225.

[5] Kuratowski, Kazimierz (1930), ”Sur le probleme des courbes gauches en topologie”, Fund. Math. (in French) 15: 271_283.

[6] Wagner, K. (1937), ”Uber eine Eigenschaft der ebenen Komplexe”, Math. Ann. 114: 570_590.

[7] Vazirani, Vijay V. (1988), ”NC algorithms for computing the number of perfect matchings in K3,3-free graphs and related problems”, Proc. 1st Scandinavian Workshop on Algorithm Theory (SWAT ’88), Lecture Notes in Computer Science 318, Springer-Verlag, pp. 233-242.