

2009年度 修士論文

ダイマー模型とグラフ理論

Dimer Model and Graph Theory

中央大学大学院 理工学研究科
博士課程前期課程 物理学専攻
山崎 純一

平成22年3月2日

目次

第1章 Introduction	5
第2章 有限系でのダイマー模型	9
2.1 ダイマー模型の定式化	9
2.2 正方格子グラフの場合	10
2.2.1 m と n の偶奇性	12
2.2.2 $a = b = 1$ の場合	13
第3章 無限系でのダイマー模型	15
3.1 ダイマー模型の定式化	15
3.2 トロピカル幾何学	17
3.2.1 マックス-プラス代数	17
3.2.2 超離散化	17

第1章 Introduction

ここで扱うグラフとは点 (vertex) と辺 (edge) の集合を示す. このグラフの性質について研究する数学的な学問をグラフ理論と呼ぶ. グラフ理論は、私たちの日常様々な場所で用いられている. 例えば、携帯電話の基地局の配置、コンピュータのデータ構造やアルゴリズム、電気回路などが挙げられる.

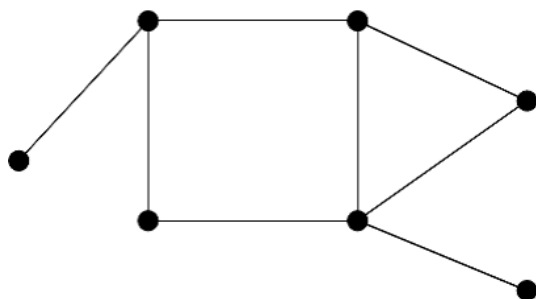


図 1.1: グラフの例

ダイマー模型を定式化する際にもグラフ理論を用いることができる. ダイマーとは、モノマーと呼ばれる分子が2つ重合した形の分子 (\leftrightarrow) を意味する. ダイマー模型は、ダイマーの様々な配置 M に関する状態和

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

を分配関数とする統計力学的模型である. ここで $e^{-E(M)}$ は重み (Boltzmann weight) である.

グラフ理論とダイマー模型を結びつける例として正3角形を並べた図形 (図 1.2) を考える.

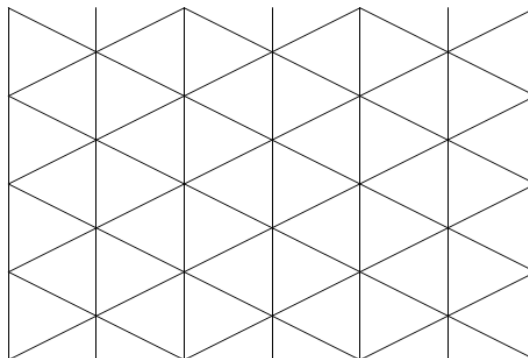


図 1.2: 3角格子

これに対して正3角形を2つ繋いだ菱形を並べるタイル張りを考える. 菱形のタイルは図 1.3 のように3種類考えられる.

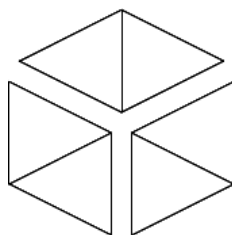
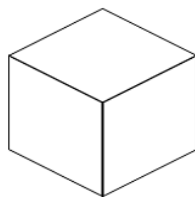


図 1.3: 3つの菱形

このタイル張りは3次元空間内で立方体を積み上げたものとして解釈する事ができる. このような立方体を3次元空間の $(1, 1, 1)$ 方向から見れば図 1.4 のように見える.

図 1.4: $(1,1,1)$ 方向から見た立方体

見えている立方体の3つの面が3つの菱形となって現れていることになる. この射影により3次元空間内に立方体を積み上げたものは平面上の菱形に対応する事がわかる. さらに3角形の重心を隣接する3角形同士で結ぶと図 1.2 は6角格子グラフとなる. そして菱形1つを1つのダイマーと見なせば菱形によるタイル張りは

ダイマーの配置と対応する. 立方体の面に色をつけ、わかりやすくしたのが図 1.5 である.

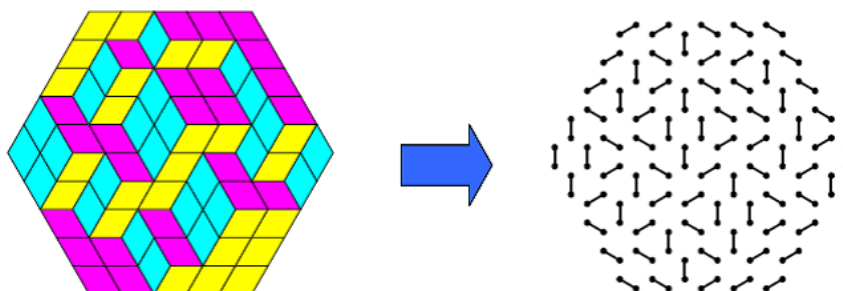


図 1.5: 3次元空間内での立方体の積み上げの配置と平面上のダイマーの配置の対応

本修士論文は以下の様な構成となる. まず2章で2部グラフを考えダイマー模型を定式化して、正方格子グラフ上での全ての場合における分配関数を Kasteleyn 行列を用いて表記する. 続く3章で格子サイズを無限にした時の分配関数 $Z(a, b; m, n)$ の振る舞いとロンキン関数との関係について述べる.

第2章 有限系でのダイマー模型

2.1 ダイマー模型の定式化

ダイマー模型は以下のように定式化される.

- 1) 頂点が2つの部分集合 V_1, V_2 に分かれ、辺が V_1 と V_2 の間にのみ存在するグラフを2部グラフという. 辺の集合を E として2部グラフを $G = (V_1, V_2, E)$ と表記する.

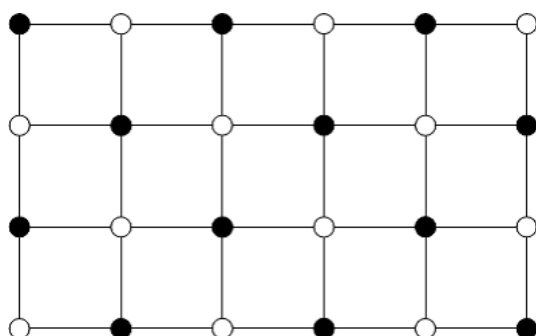


図 2.1: 2部グラフとしての平方格子

- 2) 各辺 $e = (w, b)$ ($w \in V_1, b \in V_2$) に対して1個のダイマー ($\bullet\text{---}\bullet$) を置く. このときの統計力学的重みを $W(e)$ とする.
- 3) 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

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

の様にグラフ上の全ての点を重複する事なく覆っている場合を完全マッチングという. 完全マッチングの一例を図 2.2 に示した.

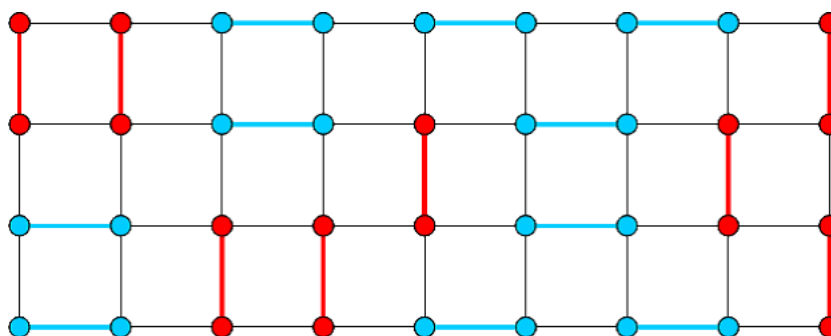


図 2.2: 完全マッチング

G の完全マッチング M 全体に対して重み $W(M)$ を次式で与える.

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

4) 分配関数を

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

と定める. ただし A は G の完全マッチング全体の集合を表す.

これによりダイマーの配置と完全マッチングが対応付けられる.

統計物理学	グラフ理論
$Z = \sum_M e^{-E(M)}$	$Z(G) = \sum_{M \in A} W(M)$
ダイマーの配置 M に関する状態和	完全マッチング M に関する総和

2.2 正方格子グラフの場合

一般的な $m \times n$ のサイズの正方格子のグラフを考える. 頂点全体の集合 $V_1 \cup V_2$ は

$$\Lambda = \{1, 2, 3, \dots, m\} \times \{1, 2, 3, \dots, n\}$$

で与えられる. ダイマーを横に置いたときの重みを $W(\rightarrow) = a$, 縦に置いたときの重みを $W(\downarrow) = b$ とする.

このとき $m \times n$ の正方格子 Λ 上のダイマー模型の分配関数を $Z(a, b; m, n)$ とすると

$$Z(a, b; m, n) = \sqrt{\det[K_{\vec{x}, \vec{y}}(a, b)]_{\vec{x}, \vec{y} \in \Lambda}} \quad (2.1)$$

となる.

ここで $K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b)$ は Kasteleyn 行列と呼ばれ $\vec{x} = (x_1, x_2), \vec{y} = (y_1, y_2)$ としたとき

$$\begin{aligned} K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b) &= a\delta_{x_1, y_1+1}\delta_{x_2, y_2} + a\delta_{x_1, y_1-1}\delta_{x_2, y_2} \\ &+ ib\delta_{x_1, y_1}\delta_{x_2, y_2+1} + ib\delta_{x_1, y_1}\delta_{x_2, y_2-1} \end{aligned} \quad (2.2)$$

というテンソル積の構造で書ける. ただしグラフの縦軸上のダイマーの重み b には $i = \sqrt{-1}$ (虚数単位) をかけ、横軸上のダイマーの重み a には 1 をそれぞれかけてある.(図 2.3 参照)

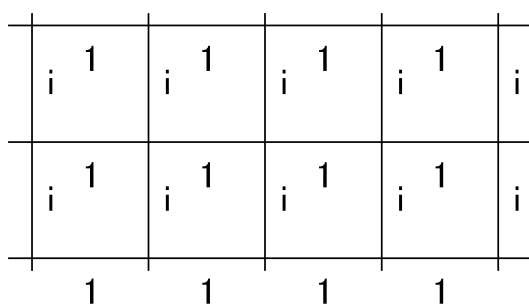


図 2.3: 重みを付けた正方格子グラフ

次に $K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b)$ の対角化を考える. 固有ベクトル $U(\vec{x}, \vec{y})$ は

$$U(\vec{x}, \vec{y}) = \sqrt{\frac{2}{m+1}} \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin\left(\frac{x_1 y_1}{m+1} \pi\right) \sin\left(\frac{x_2 y_2}{n+1} \pi\right) \quad (2.3)$$

となるので $K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b)$ の固有値 $\lambda(\vec{n})$ は

$$\begin{aligned} (UKU)_{(\vec{n}, \vec{n}')} &= \sum_{\vec{x} \in \Lambda} \sum_{\vec{y} \in \Lambda} U(\vec{n}, \vec{x}) K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b) U(\vec{y}, \vec{n}') \\ &= \left\{ 2a \cos\left(\frac{n_1}{m+1} \pi\right) + 2ib \cos\left(\frac{n_2}{n+1} \pi\right) \right\} \delta_{\vec{n}, \vec{n}'} \\ &= \lambda(\vec{n}) \end{aligned}$$

と求まる.

以上より $N(= m \times n)$ 次の正方行列 $K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b)$ の行列式は

$$\det[K_{\vec{x},\vec{y}}(a, b)] = \prod_{n_1=1}^m \prod_{n_2=1}^n \left\{ 2a \cos\left(\frac{n_1}{m+1} \pi\right) + 2ib \cos\left(\frac{n_2}{n+1} \pi\right) \right\} \quad (2.4)$$

となる.

したがって分配関数 $Z(a, b, ; m, n)$ は

$$\begin{aligned} Z(a, b; m, n) &= \sqrt{\det[K_{\vec{x}, \vec{y}}(a, b)]_{\vec{x}, \vec{y} \in \Lambda}} \\ &= \left[\prod_{n_1=1}^m \prod_{n_2=1}^n \left\{ 2a \cos\left(\frac{n_1}{m+1}\pi\right) + 2ib \cos\left(\frac{n_2}{n+1}\pi\right) \right\} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.5) \end{aligned}$$

のように求められる.

2.2.1 m と n の偶奇性

m と n の偶奇性によって分配関数 $Z(a, b, ; m, n)$ は以下の様にまとめることができる.

$k, l \in N$ として

I. $m = 2k - 1, n = 2l - 1$ のとき

$$Z(a, b; 2k - 1, 2l - 1) = 0 \quad (2.6)$$

II. $m = 2k, n = 2l - 1$ のとき

$$\begin{aligned} Z(a, b; 2k, 2l - 1) &= \prod_{n_1=1}^k 2a \cos\left(\frac{n_1}{2k+1}\pi\right) \\ &\times \prod_{n_2=1}^{l-1} \left\{ 4a^2 \cos^2\left(\frac{n_1}{2k+1}\pi\right) + 4b^2 \cos^2\left(\frac{n_2}{2l}\pi\right) \right\} \quad (2.7) \end{aligned}$$

III. $m = 2k - 1, n = 2l$ のとき

$$\begin{aligned} Z(a, b; 2k - 1, 2l) &= \prod_{n_2=1}^l 2b \cos\left(\frac{n_2}{2l+1}\pi\right) \\ &\times \prod_{n_1=1}^{k-1} \left\{ 4a^2 \cos^2\left(\frac{n_1}{2k}\pi\right) + 4b^2 \cos^2\left(\frac{n_2}{2l+1}\pi\right) \right\} \quad (2.8) \end{aligned}$$

IV. $m = 2k, n = 2l$ のとき

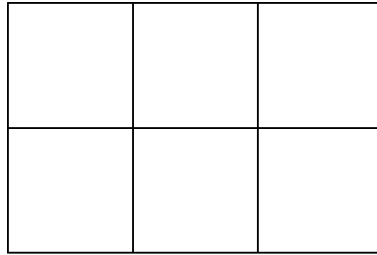
$$Z(a, b; 2k, 2l) = \prod_{n_1=1}^m \prod_{n_2=1}^n \left\{ 4a^2 \cos^2\left(\frac{n_1}{2k+1}\pi\right) + 4b^2 \cos^2\left(\frac{n_2}{2l+1}\pi\right) \right\} \quad (2.9)$$

このように、平方格子上で有限系の全ての場合において分配関数を求めることができた.

2.2.2 $a = b = 1$ の場合

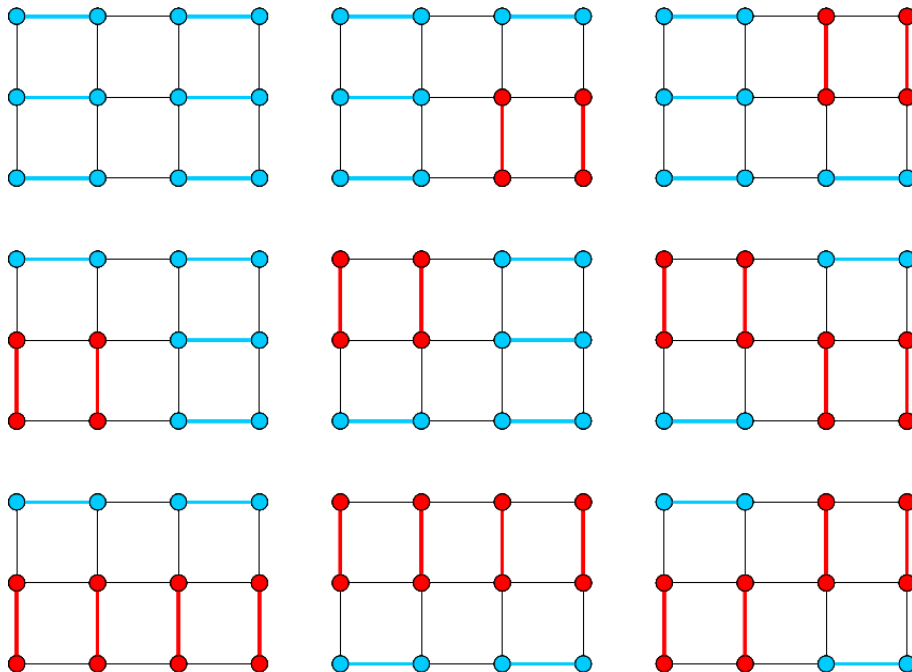
分配関数 $Z(a, b, ; m, n)$ において特別に $a = b = 1$ とすると $Z(1, 1; m, n)$ は完全マッチングの総数を表すことになる。

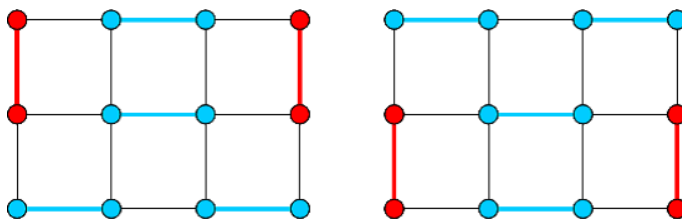
例) $m = 4, n = 3$ のとき



$$\begin{aligned}
 Z(1, 1; 4, 3) &= \prod_{n_1=1}^2 2 \cos\left(\frac{n_1}{5}\pi\right) \left\{ 4 \cos^2\left(\frac{n_1}{5}\pi\right) + 4 \cos^2\left(\frac{1}{4}\pi\right) \right\} \\
 &= 11
 \end{aligned}$$

表式 (2.7) に従って計算すると完全マッチングの総数は 11 となる。それを全て書き下したのが図 2.4 である。



図 2.4: 4×3 のときの完全マッチング

これより確かに $a = b = 1$ のとき、分配関数 $Z(1, 1; m, n)$ は完全マッチングの総数を表していることがわかる.

第3章 無限系でのダイマー模型

2章では有限系でのダイマーを模型を扱った. この章では格子サイズを無限にした時の分配関数の振る舞いを考える.

3.1 ダイマー模型の定式化

2章で得られた分配関数から熱力学極限におけるダイマー1つあたりの自由エネルギー

$$F = - \lim_{m,n \rightarrow \infty} \frac{\log Z(a, b; m, n)}{mn}$$

を求める.

I. $m = 2k - 1, n = 2l - 1$ のとき

分配関数 $Z(a, b; 2k - 1, 2l - 1) = 0$ となるため自由エネルギーはこの場合は考えない.

II. $m = 2k, n = 2l - 1$ のとき

$$\begin{aligned} F &= - \lim_{2k, 2l-1 \rightarrow \infty} \frac{\log Z(a, b; 2k, 2l - 1)}{2k(2l - 1)} \\ &= - \lim_{2k, 2l-1 \rightarrow \infty} \frac{1}{2k(2l - 1)} \log \left[\prod_{n_1=1}^k 2a \cos \left(\frac{n_1}{2k+1} \pi \right) \right. \\ &\quad \left. \times \prod_{n_2=1}^{l-1} \left\{ 4a^2 \cos^2 \left(\frac{n_1}{2k+1} \pi \right) + 4b^2 \cos^2 \left(\frac{n_2}{2l} \pi \right) \right\} \right] \\ &= - \lim_{2k, 2l-1 \rightarrow \infty} \frac{1}{2k(2l - 1)} \left[\sum_{n_1=1}^k \log \left\{ 2a \cos \left(\frac{n_1}{2k+1} \pi \right) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n_1=1}^k \sum_{n_2=1}^{l-1} \log \left\{ 4a^2 \cos^2 \left(\frac{n_1}{2k+1} \pi \right) + 4b^2 \cos^2 \left(\frac{n_2}{2l} \pi \right) \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \lim_{2l-1 \rightarrow \infty} \frac{1}{(2l-1)\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \log(2a \cos \theta) d\theta \\
&\quad - \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \\
&= - \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \\
&= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \tag{3.1}
\end{aligned}$$

III. $m = 2k - 1, n = 2l$ のとき

$$\begin{aligned}
F &= - \lim_{2k-1, 2l \rightarrow \infty} \frac{\log Z(a, b; 2k-1, 2l)}{(2k-1)2l} \\
&= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \tag{3.2}
\end{aligned}$$

IV. $m = 2k, n = 2l$ のとき

$$\begin{aligned}
F &= - \lim_{2k, 2l \rightarrow \infty} \frac{\log Z(a, b; 2k, 2l)}{4kl} \\
&= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \tag{3.3}
\end{aligned}$$

以上より、 $m = 2k - 1, n = 2l - 1$ のとき以外のダイマー1つあたりの自由エネルギーは熱力学的極限ではすべて等しくなることがわかる。

ダイマー1つあたりの自由エネルギー F は

$$\begin{aligned}
F &= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log(4a^2 \cos^2 \theta + 4b^2 \cos^2 \phi) \\
&= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log \left\{ a^2 (e^{i\theta} + e^{-i\theta})^2 + b^2 (e^{i\phi} + e^{-i\phi})^2 \right\} \\
&= - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^\pi d\phi \log \left\{ a^2 (e^{2i\theta} + e^{-2i\theta} + 2) + b^2 (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi} + 2) \right\} \tag{3.4}
\end{aligned}$$

とも変形する事が出来る。 $z = e^{2i\theta}, w = e^{2i\phi}$ とおくと

$$d\theta = \frac{1}{2iz} dz, d\phi = \frac{1}{2iw} dw$$

$$\begin{aligned}
F &= - \frac{1}{4} \oint_{|z|=1} \frac{1}{2\pi iz} dz \oint_{|w|=1} \frac{1}{2\pi iw} dw \log \left\{ a^2 \left(z + \frac{1}{z} + 2 \right) + b^2 \left(w + \frac{1}{w} + 2 \right) \right\} \\
&= - \frac{1}{4} \oint_{|z|=1} \frac{1}{2\pi iz} dz \oint_{|w|=1} \frac{1}{2\pi iw} dw \log |P(z, w)| \tag{3.5}
\end{aligned}$$

これは、ロンキン関数

$$R(x, y) = \oint_{|z|=1} \frac{dz}{2\pi iz} \oint_{|w|=1} \frac{dw}{2\pi iw} \log |P(e^x z, e^y w)| \quad (3.6)$$

の特殊値 $R(0, 0)$ として与えられている.

3.2 トロピカル幾何学

最後に、ロンキン関数が登場する背景にあるトロピカル幾何学について述べる.

トロピカル幾何学とは区分的に線形な幾何学的対象を扱う数学であり、演算も通常の加法、乗法とは異なるマックス-プラス代数というものをを用いる.

3.2.1 マックス-プラス代数

マックス-プラス代数系において、通常の和が \max 、通常の積が和として与えられる.

$(\max, +)$	$(+, \times)$
$\max(a, b), a + b$	$a + b, a \times b$

単位元と逆元について考える.

- i. 乗法 $\rightarrow +$
 単位元: 0
 逆元: $A + B = 0 \iff B = -A$
- ii. 加法 $\rightarrow \max$
 単位元: $-\infty$
 逆元: 定義されない

3.2.2 超離散化

$$a + b = c \quad (3.7)$$

という方程式を考える. これに対して $a = e^{A/\epsilon}, b = e^{B/\epsilon}, c = e^{C/\epsilon}$ という変数変換をする. (ただし $a, b, c \in \mathbb{N}$)
変換を代入すると

$$e^{A/\epsilon} + e^{B/\epsilon} = e^{C/\epsilon} \quad (3.8)$$

となる. 両辺の $\epsilon \log$ をとると

$$\epsilon \log (e^{A/\epsilon} + e^{B/\epsilon}) = C \quad (3.9)$$

さらに $\epsilon \rightarrow +0$ の極限をとると

$$\max(A, B) = C \quad (3.10)$$

が得られる.

まとめると

$$a + b = c \longleftrightarrow \epsilon \log (e^{A/\epsilon} + e^{B/\epsilon}) = C \longrightarrow \max(A, B) = C \quad (3.11)$$

となる.

積についても同様のことを行おうと

$$a \times b = c \longleftrightarrow \epsilon \log (e^{A/\epsilon} \times e^{B/\epsilon}) = C \longrightarrow A + B = C \quad (3.12)$$

が得られる.

以上より、マックス-プラス代数系とは通常代数系の対数写像をとったものとなることがわかる.

またこれらより、四則演算で構成された方程式の変数に $e^{A/\epsilon}$ という変形を行い $\epsilon \rightarrow +0$ の極限をとりマックス-プラスの方程式を得ることができる. この変換手続きを超離散化と呼ぶ.

こういった中に登場するのがロンキン関数

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

である.

謝辞

最後となりますが、大学院での研究及び本修士論文をまとめるにあたり多くの方に大変お世話になりました。ここに感謝の意を述べたいと思います。

指導教官である香取眞理先生には、ランダムウォークやサンドパイル等の統計力学に関する興味深い事柄を数多く教えていただきました。また、大学院生としての姿勢やあり方についても学ぶ事が出来ました。お忙しい中研究相談のための時間を取って頂き本修士論文は完成を迎える事が出来ました。最後までご指導頂き本当に感謝致します。

助教の小林奈央樹さんには、輪講の発表内容でわからない部分やプログラムに関する事等とても丁寧に教えて頂きました。稲見武夫先生、中野徹先生には修士論文発表の副査をして頂きました。稲見先生、中野先生共に、私が大学1年の時から大学院卒業までの6年の間、様々な事を教えて頂き大変お世話になりました。松下貢先生には、講義以外でも物理のセミナーや飲み会の場で大変お世話になり親身に話を色々聞いて下さいました。研究室の佐藤(史)君、アンドラウスさん、深澤君、佐藤(真)さん、副島さんや学部生の皆さんとは、共に輪講で議論しあったり研究室で相談したり勉強以外の話で盛り上がったりと、とても有意義な大学院生活を送ることが出来ました。卒業後は会う機会は少なくなってしまうですが、皆さんのこれからが実りあるものとなる様に願っています。

最後に、大学院まで進学させて頂き、常に私の事を考えどんな時でも力になってくれた両親と祖母に深く感謝致します。

参考文献

- [1] P.W.Kasteleyn, Graph Theory and Crystal Physics, in *Graph Theory and Theoretical Physics*, edited by F.Harary, PP.43-110, Academic Press, 1967.
- [2] R.Kenyon, *An introduction to the dimer model*, arXiv:math/0310326.
- [3] R.Kenyon, *Lectures on dimers*, arXiv:0910.3129.
- [4] 高崎金久. ダイマー模型とその周辺.
<http://www.math.h.kyoto-u.ac.jp/takasaki/res/recent.html>
- [5] 植田一石. ドミノによるタイル張り.
<http://insei.math.kyoto-u.ac.jp/2005/hokokushu/ueda.pdf>
- [6] 広田良吾・高橋大輔著. 差分と超離散. 共立出版, 2003.