

グラフ理論と格子上の統計力学模型

2009年7月29日

山崎 純一

1 Introduction

2 グラフ理論に関する問題

2.1 ハミルトン閉路問題

2.2 オイラー閉路問題

2.3 オイラー閉路の導出

2.4 2部グラフとマッチング

2.4.1 2部グラフとは

2.4.2 マッチングとは

3 ダイマーモデルへの適用

3.1 ダイマーモデルとは

3.2 ダイマーモデルの定式化

3.3 ドミノによるタイル張り

3.4 平方格子グラフの場合

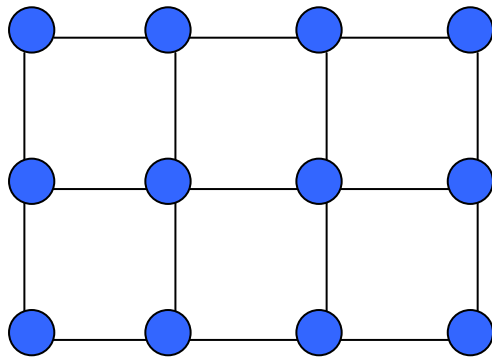
3.4.1 カステライン行列

3.4.2 重みの設定例

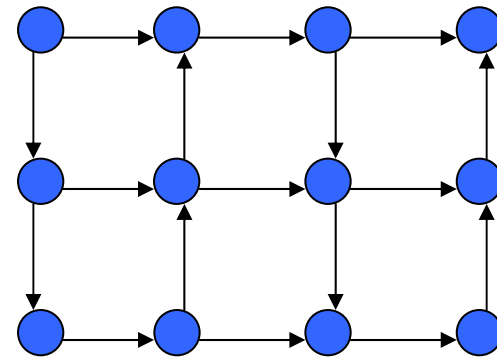
4 今後の課題

1 Introduction

ここで扱う“グラフ”とは点(vertex)と辺(edge)の集合の事を示す。このグラフの性質について研究する学問をグラフ理論と呼ぶ。グラフは、辺に向きが指定されているか否かによって有向グラフと無向グラフの二つに分けることができる。



無向グラフ



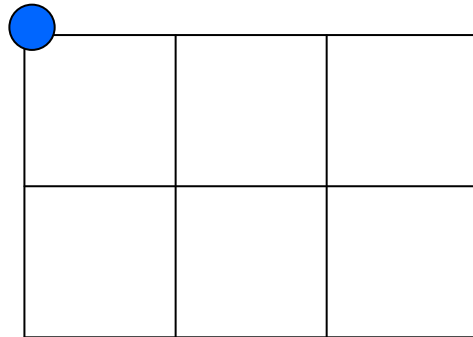
有向グラフ

2 グラフ理論に関する問題

2.1 ハミルトン閉路問題

ハミルトン閉路問題とは与えられたグラフについて全ての点を一度だけ通る閉路の存在について調べる問題である。

閉路とは始点と終点とが一致している路の事を言う。



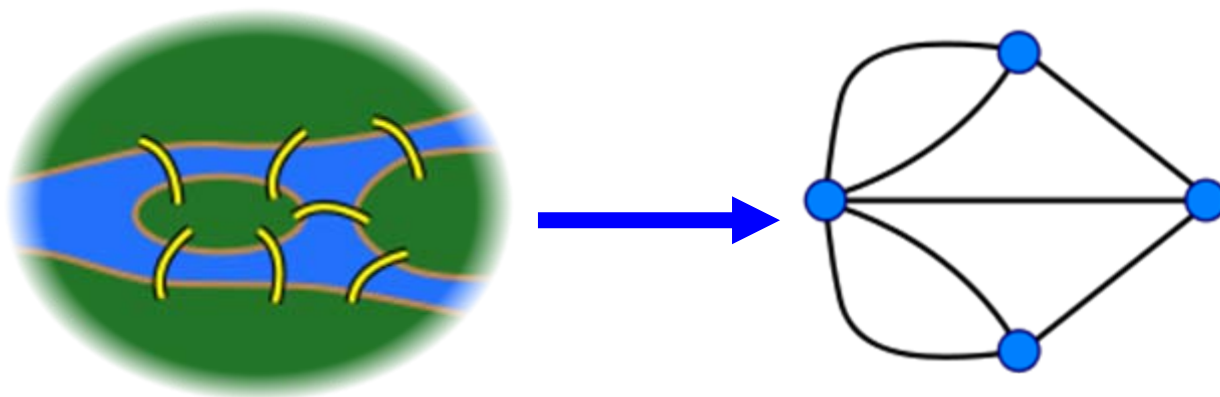
2.2 オイラー閉路問題

ハミルトン閉路に対してオイラー閉路とはグラフ上の全ての辺を一度ずつ通る路の事を言う。

- ・名前の由来

『ケーニヒスベルグの町（現在のカーリーニングラード）を流れる川にかかっている七つの橋を一度しか通らずに全部渡る事が出来るか？』という問題をオイラーが解いた事に基づいている。

ケーニヒスベルグの橋



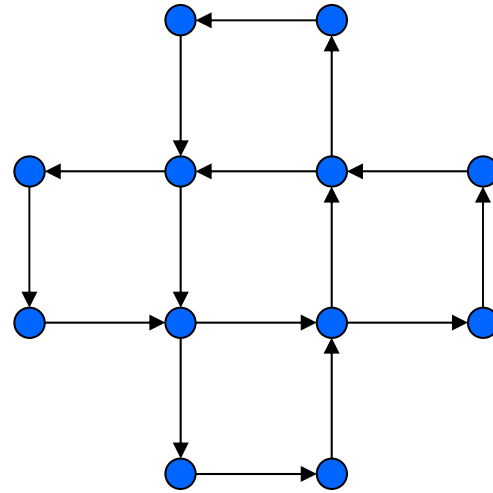
これは一筆書き不可能！

一筆書きの条件

- ・全ての頂点の次数が偶数
- ・次数が奇数の頂点が2個、他の頂点の次数は偶数

2.3 オイラー閉路の導出

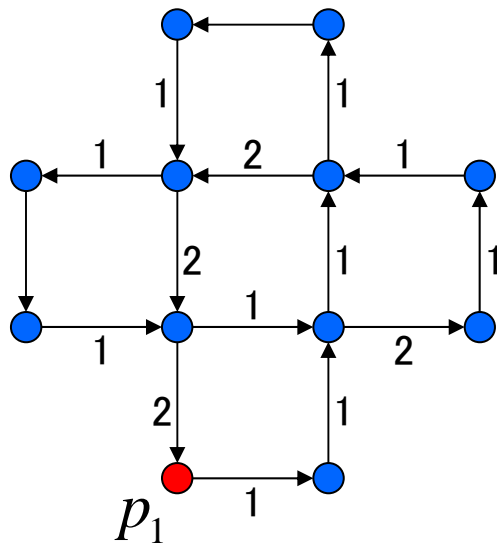
例



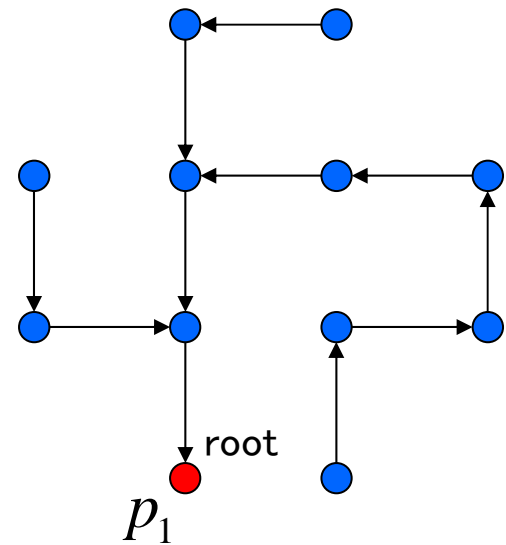
方向グラフ G

このグラフG上でのオイラー閉路の数を考える。

2)根付き木(rooted tree)を作る



G



reverse rooted tree H

始点から出ている辺と各点から出ている辺の最高次以外を消す。

3)定式化

G上の各点から出ている辺の最高次数を τ_i とする。

各点において、 τ_i にあたる辺を決めた時
残りの辺への番号付けは

$$\prod_{i=1}^N (\tau_i - 1)!$$

の異なる場合がある。

Gにおいて、点 p_j を始点とした時の tree の数を $N^T(G; p_j)$ と書く。

よって、点 p_1 を始点とした時のオイラー閉路の総数 $N^E(G)$ は

$$N^E(G) = \left[\prod_{i=1}^N (\tau_i - 1)! \right] N^T(G; p_1)$$

また、上式の左辺は p_1 によらないのでより一般的に以下のように表せる。

$$N^E(G) = \left[\prod_{i=1}^N (\tau_i - 1)! \right] N^{-1} \sum_{j=1}^N N^T(G; p_j)$$

キルヒホッフ行列(Kirchhoff matrix) B

$$b_{ij} = - (p_i \text{ から } p_j \text{ にのびている辺の数})$$

$$b_{ii} = p_i \text{ にのびている辺の数}$$

を用いると

$$N^T(G; p_j) = \det B_{jj}(G)$$

となる。

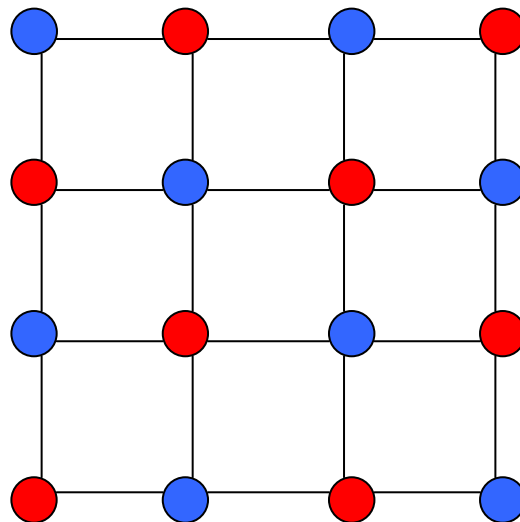
以上より

$$N^E(G) = \left[N^{-1} \prod_{i=1}^N (\tau_i - 1)! \sum_{j=1}^N \det B_{jj} \right]_G$$

2.4 2部グラフとマッチング

2.4.1 2部グラフ

グラフの頂点の集合 V が共通部分をもたない2つの部分集合に分かれて辺が 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。



V_1 : 赤い点

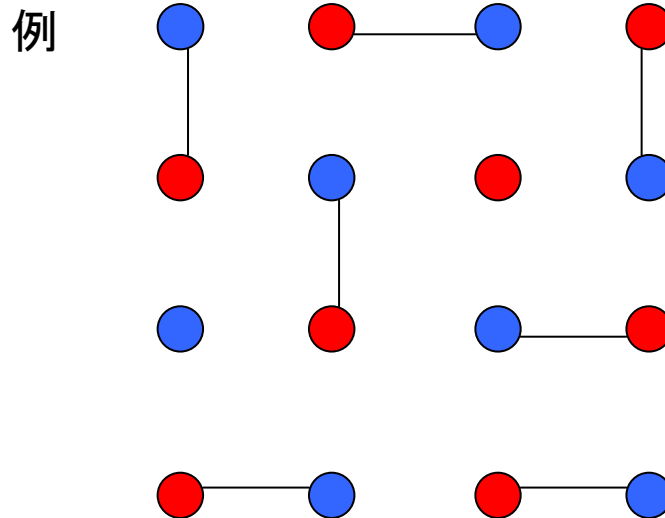
V_2 : 青い点

2.4.2 マッチング

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 (E は辺の集合)

$$M = \{(w_1, b_1), (w_2, b_2) \cdots (w_n, b_n)\}$$
$$w_i \neq w_j, b_i \neq b_j (i \neq j)$$

をマッチングという。

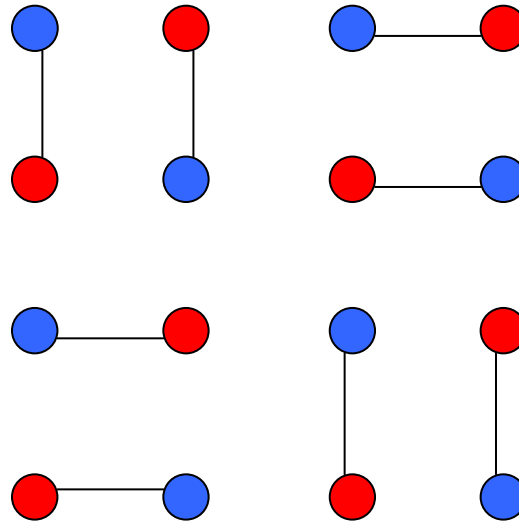


特別な場合として、マッチングが

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

のように全ての頂点を覆う時、完全マッチングと言う。

例



3 ダイマー模型への適用

3.1 ダイマー模型とは

ダイマーはモノマーと呼ばれる分子が2つ重合した形 ●—● の分子を意味する。

ダイマー模型は、ダイマーの様々な配置 M に関する状態和で定義される。

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

$e^{-E(M)}$: 重み (Boltzmann weight)

3.2 ダイマーモデルの定式化

ダイマーモデルは以下のように定式化される。

- 1) 2部グラフ $G = (V_1, V_2, E)$ を決める。
- 2) 各辺 $e = (w, b)$ ($w \in V_1, b \in V_2$) に対して1個のダイマーを e に置く時の統計力学的重みを $W(e)$ とする。
- 3) G の完全マッチング M に対して重み $W(M)$ を定める。

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

4)分配関数を

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

AはGの完全マッチング全体の集合

と定める。

統計物理学

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

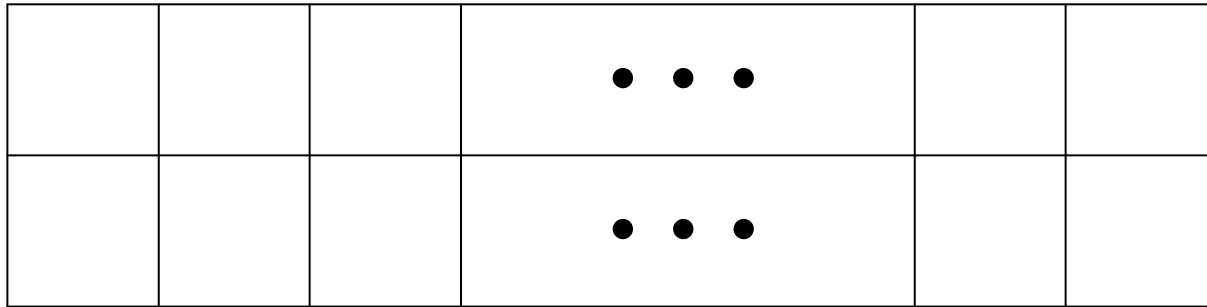
ダイマーの配置 M に関する状態和

グラフ理論

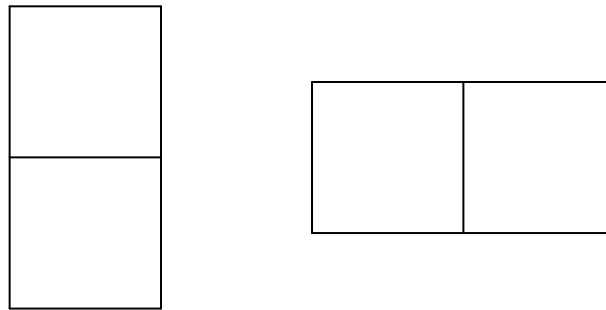
$$Z(G) = \sum_{M \in A} W(M)$$

完全マッチング M に関する総和

3.3 ドミノによるタイル張り



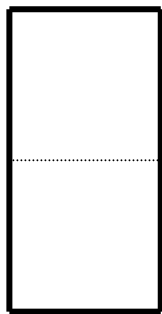
$2 \times n$ の上図に 1×2 のタイル



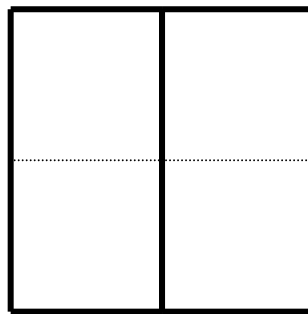
を隙間なく並べることを考える。

横の長さがnの時のタイル張りの総数を f_n とする。

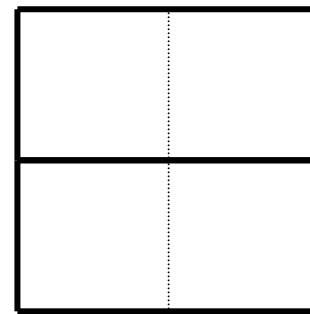
例



$$f_1 = 1$$




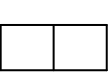
$$f_2 = 2$$




横の長さがnの場合を考える。

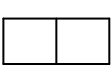
右端の2列に着目するとドミノの配置は

1) 右端の1列に  を1個置く場合

2) 右端の2列に  を2個置く場合

1)右端の1列に  を1個置く場合

このタイル張りの総数は $2 \times (n-1)$ の場合の
タイル張りの総数 f_{n-1} に等しい。

2)右端の2列に を2個置く場合

このタイル張りの総数は $2 \times (n-2)$ の場合の
タイル張りの総数 f_{n-2} に等しい。

したがって f_n は

$$f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$$

というフィボナッチ数列の形で与えられる。

$f_1 = 1$ $f_2 = 2$ $f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$ ($n \geq 3$) を解く。

$$\alpha = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad \beta = \frac{1 - \sqrt{5}}{2} \quad \text{とおくと}$$

$$f_n - \alpha f_{n-1} = \beta (f_{n-1} - \alpha f_{n-2})$$

$$f_n - \beta f_{n-1} = \alpha (f_{n-1} - \beta f_{n-2})$$

と変形出来る。

上式は等比数列なので

$$f_n - \alpha f_{n-1} = \beta (f_{n-1} - \alpha f_{n-2}) = \cdots = \beta^{n-2} (f_2 - \alpha f_1) = \beta^{n-2} (2 - \alpha)$$

$$f_n - \beta f_{n-1} = \alpha (f_{n-1} - \beta f_{n-2}) = \cdots = \alpha^{n-2} (f_2 - \beta f_1) = \alpha^{n-2} (2 - \beta)$$

2式より

$$\begin{aligned} f_n &= \frac{2-\alpha}{\beta-\alpha} \beta^{n-1} - \frac{2-\beta}{\beta-\alpha} \alpha^{n-1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ (1+\alpha)\alpha^{n-1} - (1+\beta)\beta^{n-1} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ (\alpha^n - \beta^n) + (\alpha^{n-1} - \beta^{n-1}) \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\left\{ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^n \right\} + \left\{ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{n-1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^{n-1} \right\} \right] \end{aligned}$$

従って、ドミノ1個あたりのエントロピーの極限は

$$\begin{aligned} S &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log f_n}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\left\{ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^n \right\} + \left\{ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{n-1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^{n-1} \right\} \right]}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n \left[\left\{ 1 - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{1+\sqrt{5}} \right)^n \right\} + \frac{2}{1+\sqrt{5}} \left\{ 1 - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{1+\sqrt{5}} \right)^{n-1} \right\} \right] \\ &= \log \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right) \approx 0.481212 \end{aligned}$$

3.4 平方格子グラフの場合

考えるグラフのサイズが一般的な $m \times n$ の場合、3.3のように分配関数を簡単に表すことは出来ない。

その場合の分配関数は

$$Z = |\det K| \quad K : \text{カステライン行列}$$

と書くことが出来る。

3.4.1 カステライン行列

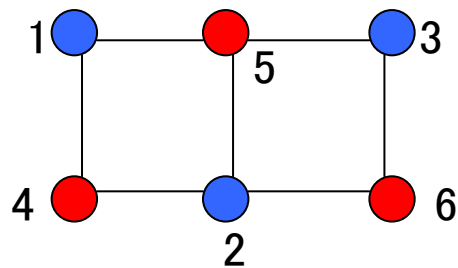
カステライン行列とは、行列要素 K_{wb} が

$$K_{wb} = \begin{cases} \pm W(w, b) & ((w, b) \in E) \\ 0 & ((w, b) \notin E) \end{cases}$$

となる行列のことをいう。

以下では具体例を用いて説明する。

例



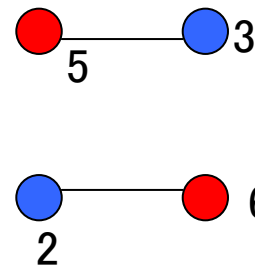
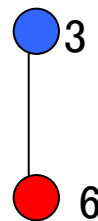
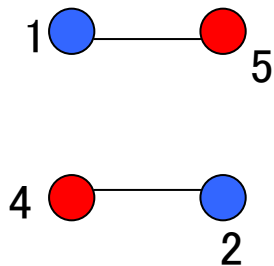
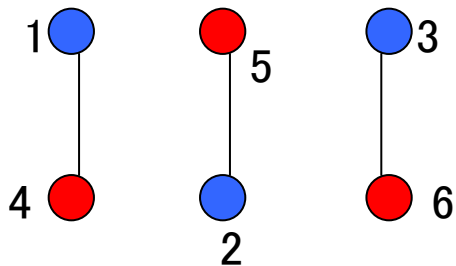
$$\det K = \sum_{\sigma \in S_3} \text{sgn}(\sigma) K_{1\sigma(1)} \cdots K_{3\sigma(3)}$$

この展開で出てくる項は

$$K_{14} K_{25} K_{36}$$

$$K_{15} K_{24} K_{36}$$

$$K_{14} K_{26} K_{35}$$



$$K_{14}K_{25}K_{36} \quad K_{15}K_{24}K_{36} \quad K_{14}K_{26}K_{35}$$

この3項の係数が同符号かつ各項の値が1になるように重みを設定すると

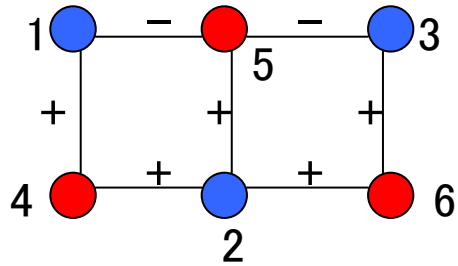
$$\begin{aligned} \det K &= \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_3} \text{sgn}(\sigma) K_{1\sigma(1)} \cdots K_{3\sigma(3)} \\ &= K_{14}K_{25}K_{36} + K_{15}K_{24}K_{36} + K_{14}K_{26}K_{35} \\ &= 3 \end{aligned}$$

となり、確かに

$$Z = |\det K|$$

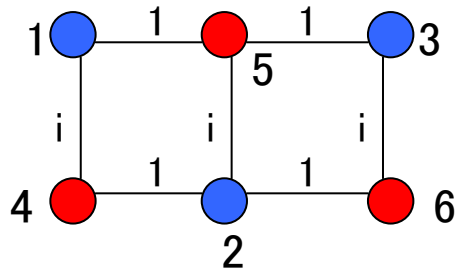
が言える。

3.4.2 重みの設定例



$$K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Kasteleyn



$$K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & i & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & i \\ i & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & i & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Kenyon

K を $N \times N$ の行列とすると

$$\det K = \prod_{i=1}^N \lambda_i \quad \lambda_i \text{ は } K \text{ の固有値}$$

$$= \prod_{j=1}^m \prod_{k=1}^n \left(2 \cos \frac{\pi j}{m+1} + 2i \cos \frac{\pi k}{n+1} \right)$$

と書ける。

4 今後の課題

$$\det K = \prod_{j=1}^m \prod_{k=1}^n \left(2 \cos \frac{\pi j}{m+1} + 2i \cos \frac{\pi k}{n+1} \right)$$

の証明

一般的な平方格子上的のエントロピー

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log Z}{n}$$

の計算