4E02

トポロジカルインデックス．分子構造の特性化から初等数学・整数論への展開

（お茶大・名誉）　細矢治夫

［はじめに］

1971 年に著者は炭化水素の炭素原子骨格のトポロジーの特性化を目的としてトポロジカルインデックス Z を提出し[1]、熱力学的諸量の構造活性相関を調べたが [2,3]、後にこの Z を使い不飽和共役炭化水素の π 電子系の安定性や芳香属性の数学的な裏付け等を行う「グラフ理論的分子軌道法」を発展させた [4-6]。 経路グラフ（直鎖）と単環グラフの Z が、それぞれフィボナッチ数とルカ数に一致すること、及びそれらがパスカルの三角形と密接な関係にあること等は分かっていたが、最近更に多くの初等数学的問題にもこの Z が深く関係することが判明した。本報では、トポロジカルインデックス Z の数学的な展開を紹介する。

［ペル方程式の解と Z の関係］

ペル方程式というのは、初等数学のいろいろな問題に顔を出す２次の不定方程式

$$x^2 - D y^2 = 1 \tag{1}$$

である。ここで、D は平方数以外の正の整数、x と y は正の整数である。右辺が１以外のものも広義のペル方程式と呼ばれる。D と N が与えられたとき、一組でも（x, y）の解があれば、無数の（x, y）解のあることが知られている。元来、これはまったく代数の世界のものであったが、ほとんどのペル方程式の解（x, y）の系列が、あるグラフの系列の Z になっていることが分かった[7]。その典型的な一例を図１に示してある。

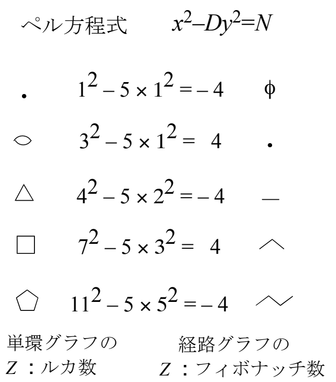

図１　フィボナッチ数とルカ数を解にもつペル方程式

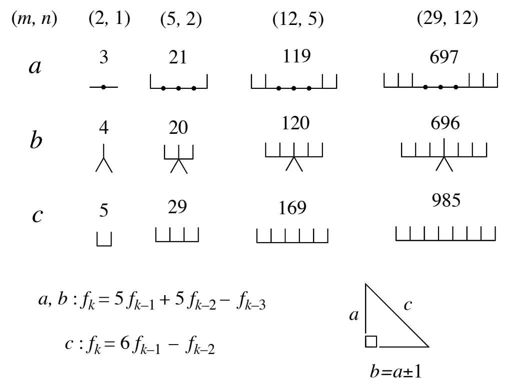

図２　直角二等辺三角形に収束するピタゴラスの三角形の辺長を Z にもつ毛虫グラフの系列

即ち、D=5、N=±4 のペル方程式の解の中の x はルカ数、y はフィボナッチ数で、両者はそれぞれ、単環グラフと経路グラフの Z になっている。経路グラフ S_n は n 個の頂点を n–1 本の辺で１列につなげた最も簡単なグラフの系列であるが、その各頂点にそれぞれ x_n–1 本の S_2（長さ１の辺）を生やしたグラフ $C_n(x_1, x_2, \cdots x_n)$ を、グラフ理論では毛虫（caterpillar）グラフ と呼んでいる。この毛虫グラフが重要な役割をしていることが分かった。

［ピタゴラスの三角形と Z の関係］

(3, 4, 5) のように、三辺の全てが整数の直角三角形はピタゴラスの三角形と呼ばれている。図２にその１例を示す。その左端の (3,4,5) に対応する三つのグラフの両端に（ ┗ , ┛ ）というグラフを一組ずつ接合させて成長する毛虫グラフの Z が、これらのピタゴラスの三角形の辺長を与えていることに注目して欲しい [8]。

三辺と面積が全て整数の三角形をヘロンの三角形と呼んでいる。その中で、三辺が等差数列をなすものも、ある毛虫グラフの系列の Z によって表されることも見いだされた [8]。

［オイラーの連分多項式（continuant）と Z の関係］

任意の有理数 $Q_N=p_N/q_N$ は有限の連分数で表せる。ここで a_n は全て正の整数である。

$$Q_N = \frac{p_N}{q_N} = a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{\cdots + \cfrac{1}{a_{N-1} + \cfrac{1}{a_N}}}}} = [a_0; a_1, a_2, \cdots, a_{N-1}, a_N]. \qquad (2)$$

オイラーは連分多項式（continuant）$\mathrm{K}_n(x_1,x_2,\cdots x_n)$ を導入して連分数の計算の見通しを良くした [9]。

$$\mathrm{K}_0()=1,\ \mathrm{K}_1(x_1)=x_1,\ \mathrm{K}_2(x_1,x_2)=x_1x_2+1,\ \mathrm{K}_n(x_1,x_2,\cdots x_n)=x_n\mathrm{K}_{n-1}(x_1,x_2,\cdots x_{n-1})+\mathrm{K}_{n-2}(x_1,x_2,\cdots x_{n-2}) \qquad (3)$$

即ち、$Q_N<1$ の場合、Q_N は二つの連分多項式の比で表される。

$$Q_N = \frac{\mathrm{K}_{N-1}(a_2, a_3, \cdots, a_N)}{\mathrm{K}_N(a_1, a_2, \cdots, a_N)}. \qquad (4)$$

しかし、これ以上連分数の計算を簡略化するような試みはほとんどなされていなかった。

ところが、連分多項式の定義式 (3) は, トポロジカルインデックス Z の定義と同じ形式であることが分かり、

＜毛虫グラフ $C_n(x_1, x_2, \cdots x_n)$ のトポロジカルインデックス Z は, 連分多項式 $\mathrm{K}_n(x_1, x_2, \cdots x_n)$ に他ならない。＞

が証明された。オイラーの連分多項式は一般のグラフの Z の部分集合に過ぎないのである。

しかも、Z に関しては数多くの漸化式が得られているので、それを使えば、従来末端から順繰りにしか行えなかった連分数の簡略化が、毛虫グラフの Z の計算に帰着されるので、極めて容易に行えることが示された [10]。更に、このことを使って、ペル方程式の最速解法も得ることができた [11]。

[1] H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.,* **44** (1971) 2332.

[2] H. Narumi and H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.,* **58** (1985) 1778.

[3] Y.-D. Gao and H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.,* **61** (1988) 3093.

[4] H. Hosoya, K. Hosoi, and I. Gutman, *Theor. Chim. Acta,* **38** (1975) 37.

[5] H. Hosoya, and K. Hosoi, *J. Chem. Phys.,* **64** (1976) 1065.

[6] H. Hosoya, *Bull. Chem. Soc. Jpn.,* **76** (2003) 2233.

[7] H. Hosoya, , *Natl. Sci. Rept. Ochanomizu Univ.,* **57** (2006) 35.

[8] H. Hosoya, , *Croat. Chem. Acta,* **80** (2007) 239.

[9] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming, Vol. 1, Addison-Wesley, Reading, . MS (1968), pp. 339.

[10] H. Hosoya, , *Natl. Sci. Rept. Ochanomizu Univ.,* **58** (2007) 15.

[11] H. Hosoya, , *Natl. Sci. Rept. Ochanomizu Univ.,* **58** (2007) 29.