

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 6 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2015

課題番号：24740058

研究課題名(和文) 対称分子構造に対する組合せ剛性理論の構築

研究課題名(英文) Combinatorial Rigidity Theory for Symmetric Molecular Structures

研究代表者

谷川 眞一 (TANIGAWA, Shinichi)

京都大学・数理解析研究所・助教

研究者番号：30623540

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：3次元一般剛性の組合せ的特徴付け問題は離散幾何学において広く知られる重要な未解決問題であり、様々な応用において基礎的知見を与えるという点で非常に重要である。本研究課題ではグラフの剛性に関する近年の重要な進展である(1) 分子グラフの3次元一般剛性、(2) 2次元対称グラフの剛性理論、(3) 2次元大域剛性定理、の三理論の統合に向け、対称グラフの無限小剛性解析手法の整備と高次元大域剛性解析への拡張を行った。

研究成果の概要(英文)：Toward a combinatorial characterization of the global rigidity of symmetric molecular graphs, in this project we have developed new techniques for analyzing the infinitesimal rigidity of symmetric graphs and the global rigidity in high dimensional space.

研究分野：離散数学

キーワード：組合せ剛性理論 分子構造 グラフの剛性 剛性マトロイド 群ラベル付きグラフ

## 1. 研究開始当初の背景

グラフの剛性とは、グラフがユークリッド空間に一般的に埋め込まれた際に得られるフレームワークの剛性性質によって定義される。グラフの2次元剛性の組合せ的性質はLamanによって1970年に解明されている(引用文献)。しかしながらMaxwell/Lamanの条件を一般次元に拡張したものは、必要だが十分条件とはならず、高次元剛性に対してLamanの結果に対応する定理は未だ知られていない。最も代表的でありかつ応用上重要な3次元剛性定理の導出は、1970年のLamanの結果以降、多くの離散数学者によって試みられてきたが、幾つかの特殊ケースを除き未だ解決されていない。

近年このグラフ剛性の特徴づけ問題に関連して3つの重要な進展があった。

(1) まず一つ目は分子グラフの3次元剛性予想の解決である。分子グラフとは、グラフ理論における2乗グラフを指しており、分子構造をモデル化した際得られるトポロジーとして応用上非常に重要なクラスであると認識されてきた。分子グラフの3次元剛性に関するTayとWhiteley(引用文献)の予想は分子剛性予想と呼ばれ、剛性理論における重要な未解決問題として継続的に取り上げられてきた。研究代表者は加藤直樹氏(京都大学)と共にこの予想の肯定的証明に成功した(引用文献)。

(2) 二つ目の重要な進展はJackson-Jordanによる2次元大域剛性グラフの組合せ的特徴付けである(引用文献)。通常のグラフの剛性概念とは異なり、大域剛性においては不連続な頂点移動も考慮に入れグラフの変形可能性を問う。Connelly(引用文献)によって予想された大域剛なグラフの構築予想が、2004年にJackson-Jordanによって肯定的に解決され、大域的に剛なグラフが簡潔な組合せ的条件によって特徴付けされた。

(3) 三つ目の重要な進展としてLamanの定理の対称グラフ剛性への拡張が挙げられる。自己同型群の部分群として離散点群や自由可換群を含むグラフ(つまり点対称なグラフや周期グラフ)の対称性を考慮した一般剛性は、対称性条件下で一般的に埋め込んだ際得られるグラフの剛性として定義される。周期グラフに対する群ラベル付き商グラフを考える事でLamanの定理の2次元周期グラフへ拡張がMalestein-Theran(引用文献)とRoss(引用文献)によって証明された。

## 2. 研究の目的

3次元一般剛性の組合せ的特徴付け問題は離散幾何学において広く知られる重要な未解決問題であり、様々な応用において基礎的知見を与えるという点で非常に重要である。

特に分子グラフの剛性理論は、蛋白質の挙動解析やガラスの相転移メカニズムの考察など、物理的・生物学的現象の理解に直接利用されている。上記分子グラフの剛性定理を大域剛性や対象剛性に拡張することによって、これまで扱えなかった高い対称性を有する分子や結晶構造に対しても理論の適用範囲を拡張し、より高次の安定性に関する議論が可能となる。特に剛性と対称性に関する組合せ的知見は、新規ゼオライトの推定や結晶構造の振動解析等、先端分野に現れる多様な離散的物理現象の解析や計算問題における既存の限界の打破に繋がる。

## 3. 研究の方法

理論的には剛性理論の主要研究対象である。

(1) 3次元一般剛性理論

(2) 対称グラフの剛性理論

(3) 一般大域剛性理論

の3つを統合する理論の構築が究極の目標であるが、本プロジェクトでは達成可能であり応用上重要な分子グラフに焦点を当て、上記に示した最近の重要な進展である、

(1) 分子グラフの3次元一般剛性

(2) 2次元対称グラフの剛性理論

(3) 2次元大域剛性定理、

の三理論の統合を行い、対称性を有する分子グラフに対する剛性・大域剛性定理の導出を目標に設定した。

これまでに研究代表者が取組んできた3次元剛性に関する理論(特に分子剛性定理)を基礎とし、対称性や大域剛性の条件を段階的に付加することで、理論の拡張を試みた。最終目標は対称分子グラフの大域剛性定理の導出であるが、その過程を大まかに三分類し、各ステップが完結した理論として発表できるよう適切な課題設定を行った。

## 4. 研究成果

(1) 2次元一般剛性やTayの剛体構造剛性定理(引用文献)から、一般剛性とグラフの木分割には密接な関係があることが知られていた。発表論文では、剛性解析の際に現れる制約を抽象化することで、頂点上にマトロイド制約を付加した一般化木分割問題を考察し、組み合わせ最適化分野における基本的定理であるTutte-Nash-Williamsの木分割定理の拡張に成功した。さらに剛性理論への応用として、一般化木分割定理を利用することによって、幾つかの高次元剛体構造モデルに対し非一般的な配置における無限小剛性の組合せ的特徴付けを導出した。

(2) 発表論文では、対称フレームワークの無限小剛性を解析するための道具として発表論文において開発した軌道剛性行列を利用して、高次元の対称剛体ヒンジ構造の無限小剛性の組み合わせ的特徴づけを行った。

対称性が  $Z/2Z$  の直積の場合，誘導される符号付き商グラフを定義し，そのグラフ上の符号付グラフのマトロイドと軌道剛性行列の階数の関係を明らかにした．

(3) 研究成果 では，有限剛体構造モデルを無限周期構造モデルへと拡張を行い，対称性制約下での一般剛性が商グラフの組合せ構造で簡潔に特徴付けられることを証明した．

(4) 研究成果 では，Zaslavsky(引用文献)によって整備された群ラベル付きグラフ上でのマトロイド理論に基づき，群の要素上の劣モジュラ関数を用いたポリマトロイド構築法を提案し，一部の部分クラスに対する線形表現を導いた．応用として，平面上の対称なグラフの剛性定理やTayの高次元剛体構造定理の一般化を導出し，理論の有用性を明らかにした．この成果によって，具体的例題において観察されていた分子構造の自由度に対する対称性の影響が，一般的かつ組合せ的に説明可能であることが明らかにされ，自由度解析において利用されているMaxwellの条件に代わる新たな組合せ的条件を提案することができた．

(5) 研究成果 では，グラフの大域剛性解析のための新たな手法を提案した．これまでグラフの大域剛性を証明するための主要ツールであった1-extensionとgluingという操作の一般化となる手法を提案し，Jackson-Jordanの2次元大域剛性定理やConnelly-Jordan-Whiteley(引用文献)の剛体構造大域剛性定理が容易に導かれることを証明した．またこの手法を利用してFrank-Jiang(引用文献)のk-chainの大域剛性予想を解決した．さらに分子グラフの大域剛性の特徴づけに向け，分子グラフの簡易モデルである剛体ヒンジ構造に対し，大域剛性のための十分条件を証明した．

(6) 発表論文 では対称グラフの無限小剛性の解析に取り組んだ．剛性行列をブロック対角化した際，巧い基底の取り方によって各ブロックの値が簡潔に記述されることを示し，さらに発表論文 で開発した群ラベル付商グラフ上のマトロイドの構築法と剛性解析手法を利用することで，様々な古典的定理が対称グラフの無限小剛性解析へ拡張可能であることを証明した．

発表論文 において開発した高次元大域剛性解析手法を利用して，発表論文 では剛体ヒンジ構造の大域剛性の組合せ的特徴づけを証明した．Connelly-Jordan-Whiteley(引用文献)によって予想された十分条件が実は必要十分条件として成立することを証明した．系として大域剛でないHendricksonグラフの無限族の存在を明らかにし，

Connellyによる3次元大域剛性予想の反例を与えた．

(8) 発表論文 では，グラフの2次元剛性解析の基本的道具であるHenneberg構築法の群ラベル付きグラフへの拡張を行い，これまで未解決であった2面体群に関して対称なグラフの2次元剛性の特徴づけに成功した．また提案した構築法に関して既約で最小なグラフが機械工学においてBottema's mechanismとして知られるメカニズムであることを証明し，さらに既約で極小なグラフからより広いクラスのメカニズムが存在することを明らかにした．

(9) 発表論文 では，対称グラフの剛性の必要条件として現れる群ラベル付きグラフ上の組合せ的係数条件を一般化・精密化することによって，発表論文 における群ラベル付グラフ上でのマトロイド構築法の一般化を行った．これまで知られている構築法はEdmondsによる交差劣モジュラ理論の特殊ケースであったが，本研究ではEdmondsの定理では解析できない広範囲の離散構造を取り扱うことに成功した．この構成法によって，既知の剛性必要条件がマトロイドを構築することが解明され，統一的な議論で対称グラフの剛性解析が可能となった．

#### <引用文献>

R. Connelly, Generic global rigidity, *Discrete Comput. Geom.* 33, 2005, pp.549-563.

R. Connelly, T. Jordan, and W. Whiteley, Generic global rigidity of body-bar frameworks, *J. Combin. Theory, Ser. B*, 103, 2013, pp.689-705.

S. Frank and J. Jiang, New classes of counterexamples to Hendrickson's global rigidity conjecture, *Discrete Comput. Geom.*, 45, 2011, pp.574-591.

B. Jackson and T. Jordan, Connected rigidity matroids and unique realizations of graphs, *J. Combin. Theory, Ser. B*, 94, 2005, pp.1-29.

N. Katoh and S. Tanigawa, A proof of the molecular conjecture. *Discrete Comput. Geom.*, 45, 2011, pp.647-700.

G. Laman, On graphs and rigidity of plane skeletal structures, *J. Eng. Math.*, 4, 1970, pp. 331-340.

J. Malestein and L. Theran. Generic combinatorial rigidity of periodic frameworks. *Adv. Math.*, 233, 2013,

pp.291-331.

T. Tay. Rigidity of multi-graphs. I: Linking rigid bodies in n-space. J. Combin. Theory Ser. B, 36, 1984, pp. 95-112.

T.S.Tay and W.Whiteley, Recent advances in the generic rigidity of structures, Struct. Topol., 9, 1984, pp.31-38.

E. Ross, Geometric and combinatorial rigidity of periodic frameworks as graphs on the torus, PhD thesis, York University, Toronto, May 2011.

T. Zaslavsky. Biased graphs II. the three matroids, J. Combin. Theory Ser. B, 51, 1991, pp.46-72.

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

Naoki Katoh, Shin-ichi Tanigawa, Rooted-tree decompositions with matroid constraints and the infinitesimal rigidity of frameworks with boundaries, SIAM Journal on Discrete Mathematics, 27, 2013, pp.155-185, 査読有, doi:10.1137/110846944

Bernd Schulze, Shin-ichi Tanigawa, Linking rigid bodies symmetrically, European Journal of Combinatorics, 42, 2014, pp.145-166, 査読有, doi:10.1016/j.ejc.2014.06.002

Ciprian Borcea, Ileana Streinu, Shin-ichi Tanigawa, Periodic body-and-bar frameworks. SIAM Journal on Discrete Mathematics, 29, 2015, pp.93-112, 査読有, doi:10.1137/120900265

Shin-ichi Tanigawa, Matroids of gain graphs in applied discrete geometry. Transactions of the American Mathematical Society, 367, 2015, pp.8597-8641, 査読有, doi: http://dx.doi.org/10.1090/tran/6401

Shin-ichi Tanigawa, Sufficient conditions for globally rigidity of graphs, Journal of Combinatorial Theory Series B, 113, 2015, pp.123-140, 査読有, doi:10.1016/j.jctb.2015.01.003

Bernd Schulze, Shin-ichi Tanigawa, Infinitesimal rigidity of symmetric frameworks, SIAM Journal on Discrete Mathematics, 29, 2015, pp.1259-1286, 査読有, doi: 10.1137/130947192

Tibor Jordan, Csaba Kiraly, Shin-ichi Tanigawa, Generic global rigidity of body-hinge frameworks, Journal of Combinatorial Theory Series B, 117, 2016, pp.59-76, 査読有, doi:10.1016/j.jctb.2015.11.003

Tibor Jordan, Viktoria Kaszanitzky, Shin-ichi Tanigawa, Gain-sparsity and symmetry-forced rigidity in the plane. Discrete & Computational Geometry, 55, 2016, pp.314-372, 査読有, doi: 10.1007/s00454-015-9755-1.

Ritanro Ikeshita, Shin-ichi Tanigawa, Count matroids of group-labeled graphs, arXiv:1507.01259, 2015, 査読無

[学会発表](計12件)

Sparsity count on group-labeled graphs for characterizing the infinitesimal rigidity of symmetric frameworks, Advances in Combinatorial and Geometric Rigidity, Banff, July 12-17, 2015.

Matroids of group-labeled graphs in graph rigidity, the DIAMANT symposium, Veenendaal, Netherlands, May 28, 2015.

Linking rigid bodies symmetrically. Workshop on Geometric Structures with Symmetry and Periodicity, Kyoto, June 9, 2014

Combinatorial conditions for the unique completability of low rank positive semidefinite matrices, Japan Conference on Graph Theory and Combinatorics 2014, Tokyo, May 17-21, 2014.

Conditions for the unique completability of low rank positive semidefinite matrices, The Japanese-Swiss Workshop on Combinatorics and Computational Geometry, Tokyo June 4, 2014.

Inductive constructions of sparse group-labeled graphs for the analysis of graph rigidity, The 25th Workshop on Topological Graph Theory (TGT25), Yokohama, November 2013.

Gain-sparsity and the rigidity of symmetric frameworks in the plane. Joint International Meeting of the American Mathematical Society and the Romanian Mathematical Society, Alba Iulia, Romania, June 27-30, 2013.

Rigidity of Graphs with Symmetry. The 8th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, Pannon University, Veszprem, Hungary, June 7, 2013.

Polymatroids of group-labeled graphs and packing non-zero A-paths. Geometric and topological graph theory 2013, University of Bristol, April 16, 2013.

Rigidity of graphs with symmetry. RIMS workshop, Discrete Convexity and Optimization. October 17, 2012.

Matroids of group-labeled graphs in applied discrete geometry. RIMS workshop, Discrete Geometric Analysis. August 29, 2012.

Matroids of gain graphs in applied discrete geometry. Rigidity Theory: Progress, Applications and Key Open Problems, Banff, July 19, 2012.

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

谷川 眞一 (TANIGAWA, Shinichi)

京都大学・数理解析研究所・助教

研究者番号：30623540