数学4千年の歴史を化学の目からイノベイトする

ピタゴラスの三角形と

トポロジカルインデックス

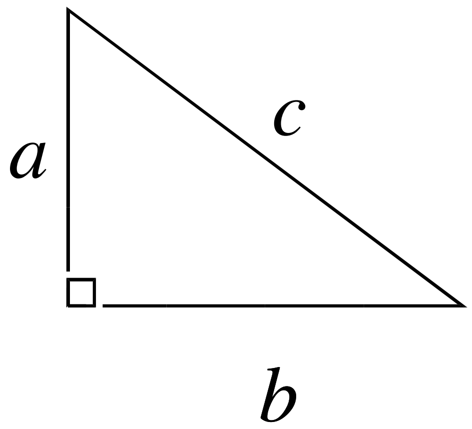
お茶の水女子大学
細矢治夫

サイエンティフィック・システム研究会
2008年度 合同分科会「イノベーション」

ピタゴラスの三角形 (Pythagorean triple)

三辺が整数の直角三角形

$$a^2 + b^2 = c^2$$



$$\text{足（leg）}\begin{cases} a & \text{奇数} \\ b & \text{偶数} \end{cases}$$

斜辺（hypotenuse）c 奇数

a, b, c が互いに素

⇓

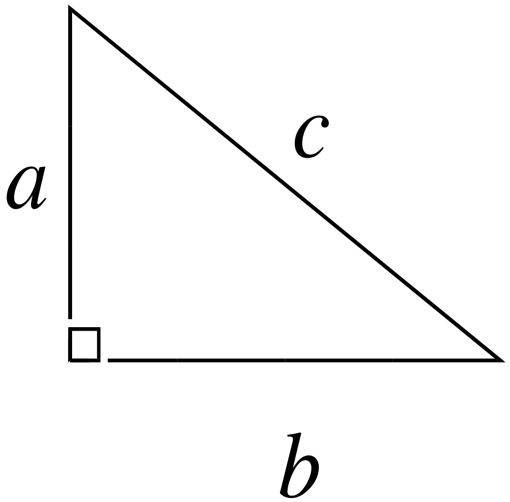
既約ピタゴラス三角形（pPT）

（3　4　5），（5　12　13），（21　20　29），他無数

primitive

既約PTは一対の整数(m,n)で表される

既約ピタゴラス三角形（pPT）



$$a = m^2 - n^2$$ 奇数

$$b = 2\,m\,n$$ 偶数

$$c = m^2 + n^2$$ 奇数

ただし，mとnは,

互いに素で,

かつ，偶と奇　又は　奇と偶

既約ピタゴラス三角形

$0 < a, b, c < 100$ の既約ピタゴラス三角形は１６種類

a	b	c	m	n	記号	分類	a	b	c	m	n	記号	分類
3	4	5	2	1	3+1	Δ1, d1	63	16	65	8	1	63–47	δ2
5	12	13	3	2	5+7	Δ1	21	20	29	5	2	21–1	d1
7	24	25	4	3	7+17	Δ1	45	28	53	7	2	45–17	δ8
15	8	17	4	1	15–7	δ2	33	56	65	7	4	33+23	Δ9
9	40	41	5	4	9+31	Δ1	77	36	85	9	2	77–41	δ8
11	60	61	6	5	11+49	Δ1	39	80	89	8	5	39+41	Δ9
35	12	37	6	1	35–23	δ2	55	48	73	8	3	55–7	d7
13	84	85	7	1	13+71	Δ1	65	72	97	9	4	65+7	d7

$0 < a, b, c < 1000$では 158 種類. その分布はほぼ一様.

0	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
	16	16	15	16	17	15	17	16	12	18

ピタゴラスの三角形の歴史

BC 1800　バビロニアの粘土板 (Plimpton 322)
　(3, 4, 5) から (12709, 13500, 18541) まで15種のPT
BC 550　ギリシャのピタゴラス (Pythagoras)
　平方根が有理数で表せないことを証明
BC 5世紀　インドのシュルバスートラ
　(3, 4, 5) (5, 12, 13) (8, 15, 17) (7, 24, 25) (12, 35, 37)
BC 300　ギリシャのディオファントス (Diophantus)
　$(m^2-n^2, 2mn, m^2+n^2)$の発見
AD 263　中国「九章算術」
　(3, 4, 5) (5, 12, 13) (55, 48, 73) (91, 60, 109)
AD 600　インドのブラマグプタ
　$(m^2-n^2, 2mn, m^2+n^2)$の発見
AD 1970　米国の A. Hall
　系統樹（行列 U, A, D）の発見

参考文献

大矢真一, ピタゴラスの定理, 東海大学出版 (2001).

シェルピンスキー（銀林 浩訳）, ピタゴラスの三角形, 東京図書 (1993).

マオール（伊里由美 訳）, ピタゴラスの三角形, 岩波書店 (2008).

小林吹代 , ピタゴラス数を生み出す行列のはなし,ベレ出版 (2008).

寺井伸浩 ， ピュタゴラス数, 数理科学, 2008年8月号.

A. Hall, *Mathematical Gazette*, **54** (1970) 377-379.

J. Roberts, *Elementary Number Theory*, MIT Press, Cambridge, MS (1977).

H. Hosoya, *Natl. Sci. Rept. Ochanomizu Univ.*, to appear.

既約 PT と行列 U, A, D の関係
A Hall (1970)

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \\ -2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

これらの行列を $(3\ \ 4\ \ 5)^T$に掛けると,

$\mathbf{U}\,(3\ \ 4\ \ 5)^T = (5\ \ 12\ \ 13)^T$, $\mathbf{U}\,(5\ \ 12\ \ 13)^T = (7\ \ 24\ \ 25)^T, \cdots$

Δ1グループ

$\mathbf{A}(3\ \ 4\ \ 5)^T = (21\ \ 20\ \ 29)^T$, $\mathbf{A}\,(21\ \ 20\ \ 29)^T = (119\ \ 120\ \ 169)^T, \cdots$

*d*1グループ

$\mathbf{D}\,(3\ \ 4\ \ 5)^T = (15\ \ 8\ \ 17)^T$, $\mathbf{D}\,(15\ \ 8\ \ 17)^T = (35\ \ 12\ \ 37)^T, \cdots$

δ1 グループ

また，全ての既約 PT $(a,\ b\ \ c)$, は, progenitor (3 4 5) に**U, A, D**を

ある順序で掛け合わせたものを掛けることで一意的に表せる.

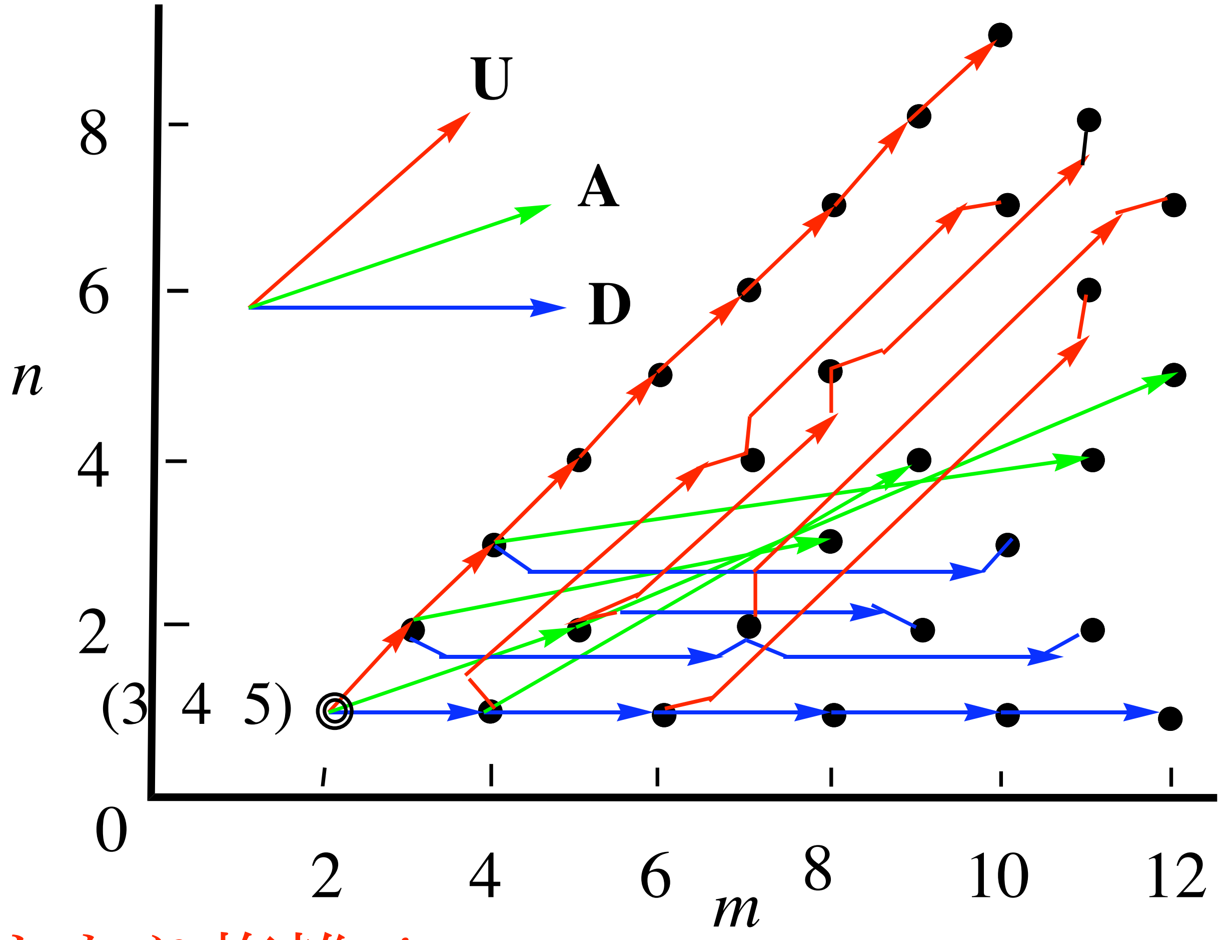
genealogy

既約PTの U, A, D による系統樹
A. Hall (1970)

(3 4 5) (2,1)	U	(5 12 13) (3,2)	U	(7 24 25) (4,3)
			A	(55 48 73) (8,3)
			D	(45 28 53) (7,2)
	A	(21 20 29) (5,2)	U	(39 80 89) (8,5)
			A	(119 120 169) (12,5)
			D	(77 36 85) (9,2)
	D	(15 8 17) (4,1)	U	(33 56 65) (7,4)
			A	(65 72 97) (9,4)
			D	(35 12 37) (6,1)

—> Easy, but <— Difficult

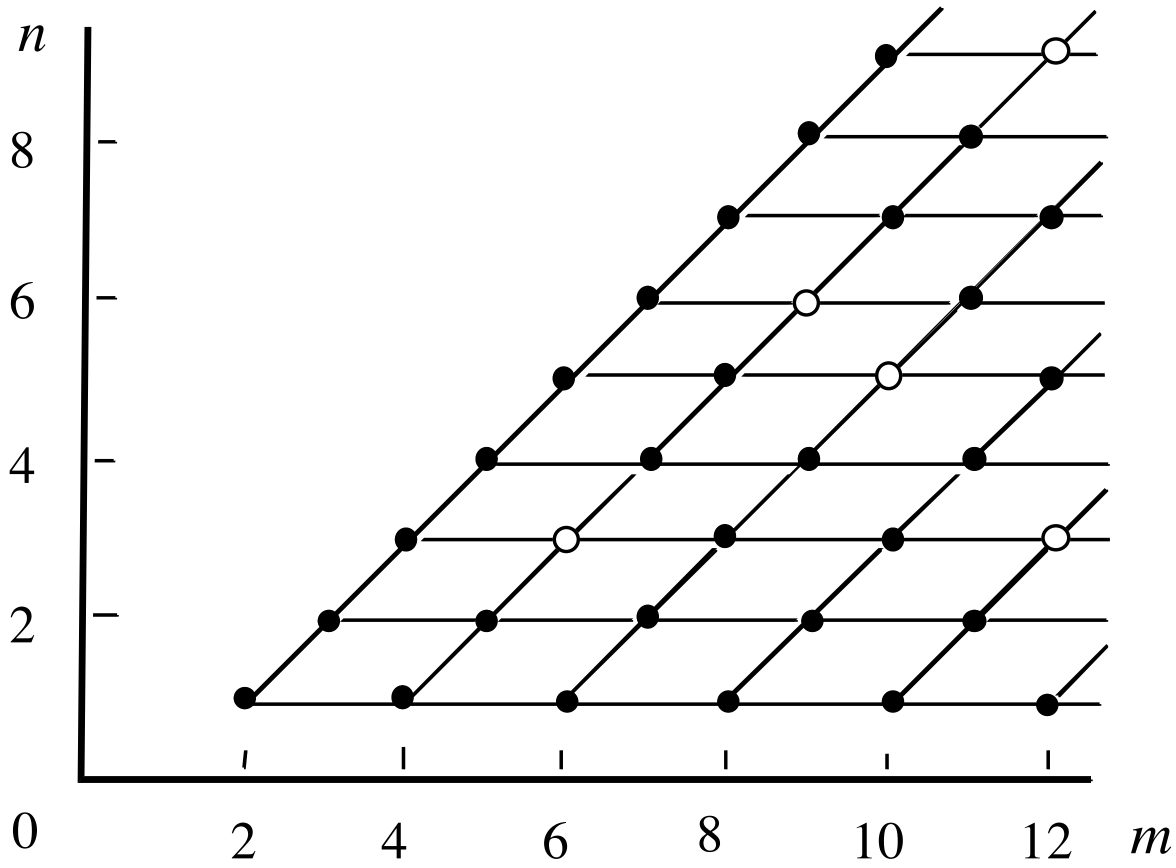
Hallの系統樹を(m,n)格子上にマップ



かなり複雑！

$$a = m^2 - n^2, \quad b = 2\,m\,n\,, \quad c = m^2 + n^2$$

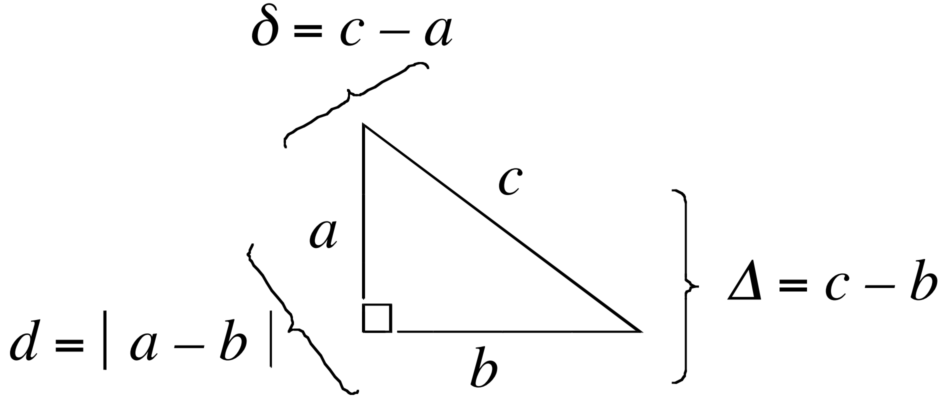
(m,n) 格子上の既約(●)と可約(○)PTの関係



合体させて分類した方がすっきりする

ピタゴラス三角形の分類

PT の表し方と分類　　　二辺間の差をとる



Δ = 1, 9, 25, 49, 81, 121, 169 ⋯　$(2k+1)^2$　奇数の平方　$\Delta\ k$

δ = 2, 8, 18, 32, 50, 72, 98, ⋯　$2k^2$　平方数の 2 倍　$\delta\ k$

d = 1, 7, 17, 23, 31, 41, 47, ⋯　$p \equiv \pm 1 \pmod{8}$

8で割った余りが +1か -1 の素数，及びpの積　$d\ p$

既約PTの分類（0 < c < 100）

a	b	c	m	n	Δ	δ	d	a	b	c	m	n	Δ	δ	d
3	4	5	2	1	1-1	1-1	1	63	16	65	8	1	7-1	1-4	47
5	12	13	3	2	1-2	2-1	7	21	20	29	5	2	3-2	2-2	1
7	24	25	4	3	1-3	3-1	17	45	28	53	7	2	5-2	2-3	17
15	8	17	4	1	3-1	1-2	7	33	56	65	7	4	3-4	4-2	23
9	40	41	5	4	1-4	4-1	31	77	36	85	9	2	7-2	2-4	41
11	60	61	6	5	1-5	5-1	49	39	80	89	8	5	3-5	5-2	41
35	12	37	6	1	5-1	1-3	23	55	48	73	8	3	5-3	3-3	7
13	84	85	7	6	1-6	6-1	71	65	72	97	9	4	5-4	4-3	7

各グループの漸化関係 (recursive relation)

Δ1			Δ3			δ1			δ2			*d*1			*d*7		
a	*b*	*c*	*a*	*b*	*c*	*a*	*b*	*c*	*a*	*b*	*c*	*a*	*b*	*c*	*a*	*b*	*c*
3	4	5	15	8	17	3	4	5	5	12	13	3	4	5	15	8	17
5	12	13	21	20	29	15	8	17	21	20	29	21	20	29	65	72	97
7	24	25	*27*	*36*	*45*	35	12	37	45	28	53	119	120	169	403	396	565
9	40	41	33	56	65	63	16	65	77	36	85	697	696	985			
11	60	61	39	80	89	99	20	101	117	44	125				5	12	13
13	84	85	*45*	*108*	*117*										55	48	73
															297	304	425

a: $f_n=2f_{n-1}-f_{n-2}$

b, c: $f_n=3f_{n-1}-3f_{n-2}+f_{n-3}$

a, c: $f_n=3f_{n-1}-3f_{n-2}+f_{n-3}$

b: $f_n=2f_{n-1}-f_{n-2}$

a, b: $f_n=5f_{n-1}+5f_{n-2}-f_{n-3}$

c: $f_n=6f_{n-1}-f_{n-2}$

共通

d グループでは漸化式と行列 $\mathbf{A}$ の作用が一致！

$d1$ グループ

$$(3\ \ 4\ \ 5) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{A}} (21\ \ 20\ \ 29) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{A}} (119\ 120\ \ 169) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{A}} (697\ \ 696\ \ 985) \rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21 \\ 20 \\ 29 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 21 \\ 20 \\ 29 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 119 \\ 120 \\ 169 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 119 \\ 120 \\ 169 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 697 \\ 696 \\ 985 \end{pmatrix}, \cdots$$

$$f_n = 5\,f_{n-1} + 5\,f_{n-2} - f_{n-3}$$

$f_n = 6\,f_{n-1} - f_{n-2}$			697	119	21	3
169	29	5	696	120	20	4

$\Delta 1$ グループでも漸化式と行列 **U** の作用が一致！

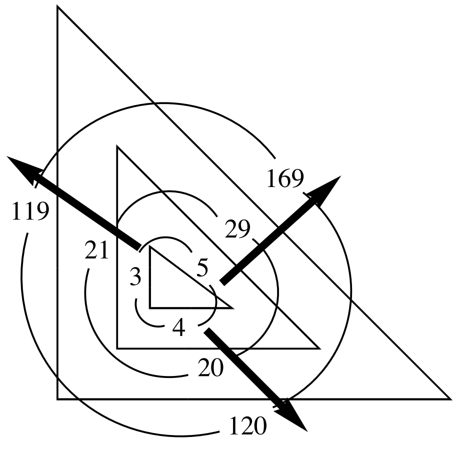
$$(3\ \ 4\ \ 5) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{U}} (5\ \ 12\ \ 13) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{U}} (7\ \ 24\ \ 25) \xrightarrow[\text{O}]{\mathbf{U}} (5\ \ 40\ \ 41) \rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 12 \\ 13 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 \\ 12 \\ 13 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 24 \\ 25 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 7 \\ 24 \\ 25 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 40 \\ 41 \end{pmatrix}, \cdots$$

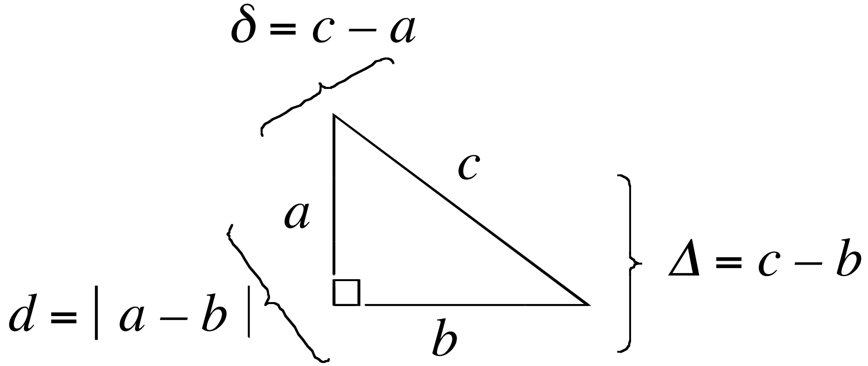
$$f_n = 3f_{n-1} - 3f_{n-2} + f_{n-3}$$

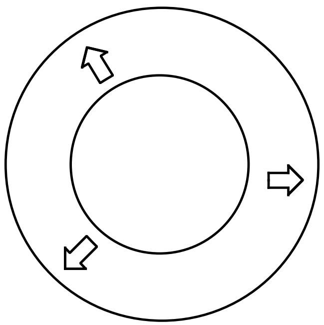
$f_n = 2f_{n-1} - f_{n-2}$			40	24	12	4
7	5	3	41	25	13	5

PT 探索の作戦とその戦果



PT の表し方と分類　　　二辺間の差をとる





中から同心円的に広げるのが
U, A, D 行列（３行３列）

operator technique

演算子法で両者の
関係をつなげた

同じ辺の増加傾向を見るのが
漸化式（３次）

この関係は演算子法で説明がつく

H. Hosoya, N. Ohkami, *J. Comput. Chem*., **4**, 585 (1983).

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \\ -2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

演算子**O** を定義し、上の行列の特性多項式を計算する。

$$\mathbf{O} f_n = f_{n+1}$$

$$\det(\mathbf{U} - \mathbf{OE}) = \begin{vmatrix} 1-\mathbf{O} & -2 & 2 \\ 2 & -1-\mathbf{O} & 2 \\ 2 & -2 & 3-\mathbf{O} \end{vmatrix} = -(\mathbf{O}-1)^3 = -(\mathbf{O}-1)(\mathbf{O}^2 - 2\mathbf{O} + 1) = -(\mathbf{O}^3 - 3\mathbf{O}^2 + 3\mathbf{O} - 1) = 0$$

この演算子多項式は、以下の漸化式を意味する。

$f_n = 2 f_{n-1} - f_{n-2}$ for a

$f_n = 3 f_{n-1} - 3 f_{n-2} + f_{n-3}$ for b and c

同様に

$$\det(\mathbf{D} - \mathbf{OE}) = -(\mathbf{O}-1)^3 = 0, \quad \text{and}$$

$$\det(\mathbf{A} - \mathbf{OE}) = -(\mathbf{O}+1)(\mathbf{O}^2 - 6\mathbf{O} + 1) = -(\mathbf{O}^3 - 5\mathbf{O}^2 - 5\mathbf{O} + 1) = 0$$

Δ3 グループは行列 U と漸化式の作用が合わない!

① (–21 20 29) → (–3 –4 5) → (**15 8 17**) → (**33 56 65**) → (**51 140 149**)

(–2, –5)　(1 ,–2)　↓　(4, 1)　→ U　(7, 4)　(10, 7)

↓　↓　↓　↓　↓

② (–15 8 17) → (3 –4 5) → (**21 20 29**) → (**39 80 89**) → (**57 176 185**)

(–1, –4)　(2, –1)　O　(5, 2)　→ U　(8, 5)　(11, 8)

↓　↓　↓　↓　↓

③ (–9 0 9) → (9 0 9) → (*27 36 45*) → (*45 108 117*) → (*63 216 225*)

(0, –3)　(3, 0)　↓　(6, 3)　→ U　(9, 6)　(12, 9)

Primitive and *non-primitive* PT

→: U matrix, ↓: recursive formulas

(m,n) コードの数列に注意！

Δ5 グループも行列 U と漸化式の作用が合わない!

①	(−115 252 277) (9, 14)	→	(−65 72 97) (4 ,9)	→	(−15 −8 17) (1, 4)	→	**(35 12 37)** (6, 1)	→	**(85 132 157)** (11,6)	→ U
	↓		↓		↓		↓		↓	
②	(−105 208 233) (8, 13)	→	(−55 48 73) (3, 8)	→	(−5 −12 13) (2, 3)	→	**(45 28 53)** (7, 2)	→	**(95 168 193)** (12, 7)	→ U
	↓		↓	O	↓		↓		↓	
③	(−95 168 193) (7, 12)	→	(−45 28 53) (2, 7)	→	(5 −12 13) (3, 2)	→	**(55 48 73)** (8, 3)	→	**(105 208 233)** (13, 8)	→ U
	↓		↓		↓		↓		↓	
④	(−85 132 157) (6, 11)	→	(−35 12 37) (1, 6)	→	(15 −8 17) (4, 1)	→	**(65 72 97)** (9, 4)	→	**(115 252 277)** (14, 9)	
	↓		↓		↓		↓		↓	
⑤	*(−75 100 125)* (5, 10)	→	*(−25 0 25)* (0, 5)	→	*(25 0 25)* (5, 0)	→	*(75 100 125)* (10, 5)	→	*(125 300 325)* (15, 10)	

(*m*,*n*) コードの数列に注意！　　一つずつ変化している

$\mathbf{U}^{1/n}$ の発見

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix}1&-2&2\\2&-1&2\\2&-2&3\end{pmatrix},\quad \mathbf{U}^2=\begin{pmatrix}1&-4&4\\4&-7&8\\4&-8&9\end{pmatrix},\quad \mathbf{U}^3=\begin{pmatrix}1&-6&6\\6&-17&18\\6&-18&19\end{pmatrix},\quad \mathbf{U}^4=\begin{pmatrix}1&-8&8\\4&-31&32\\8&-32&33\end{pmatrix}$$ 等から

$$\mathbf{U}^n=\begin{pmatrix}1&-2n&2n\\2n&1-2n^2&2n^2\\2n&-2n^2&1+2n^2\end{pmatrix},\quad \mathbf{U}^{j/k}=\frac{1}{k^2}\begin{pmatrix}k^2&-2jk&2jk\\2jk&k^2-2j^2&2j^2\\2jk&-2j^2&k^2+2j^2\end{pmatrix}$$ を発見、従って

$$\mathbf{U}^{1/3}=\frac{1}{9}\begin{pmatrix}9&-6&6\\6&7&2\\6&-2&11\end{pmatrix}$$ が得られた。それを使って

$\mathbf{U}^{1/3}\,(15\ \ 8\ \ 17)^{\mathrm{T}}=(21\ \ 20\ \ 29)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{U}^{1/3}\,(21\ \ 20\ \ 29)^{\mathrm{T}}=(\mathit{27}\ \ \mathit{36}\ \ \mathit{45})^{\mathrm{T}}$

$\mathbf{U}^{1/3}\,(\mathit{27}\ \ \mathit{36}\ \ \mathit{45})^{\mathrm{T}}=(33\ \ 56\ \ 65)^{\mathrm{T}}$, *etc.*,

が得られる。

$\mathbf{D}^{1/n}$ の発見

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \\ -2 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^2 = \begin{pmatrix} -7 & 4 & 8 \\ -4 & 1 & 4 \\ -8 & 4 & 9 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}^3 = \begin{pmatrix} -17 & 6 & 18 \\ -6 & 1 & 6 \\ -18 & 6 & 19 \end{pmatrix}$$

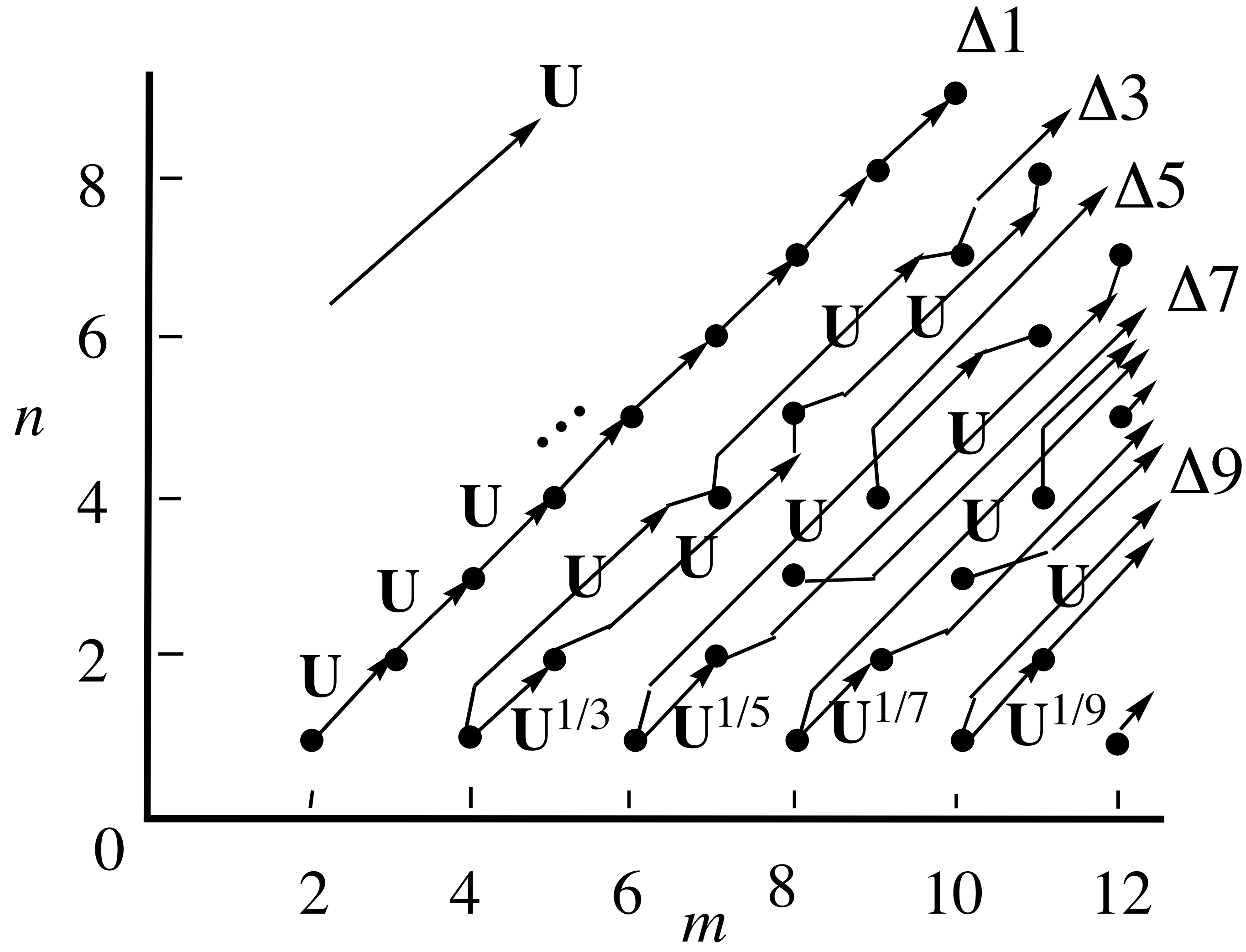
$$\mathbf{D}^n = \begin{pmatrix} 1-2n^2 & 2n & 2n^2 \\ -2n & 1 & 2n \\ -2n^2 & 2n & 1+2n^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^{j/k} = \frac{1}{k^2}\begin{pmatrix} k^2-2j^2 & 2jk & 2j^2 \\ -2jk & k^2 & 2jk \\ -2j^2 & 2jk & k^2+2j^2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}^{1/3} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 7 & 6 & 2 \\ -6 & 9 & 6 \\ -2 & 6 & 11 \end{pmatrix}$$

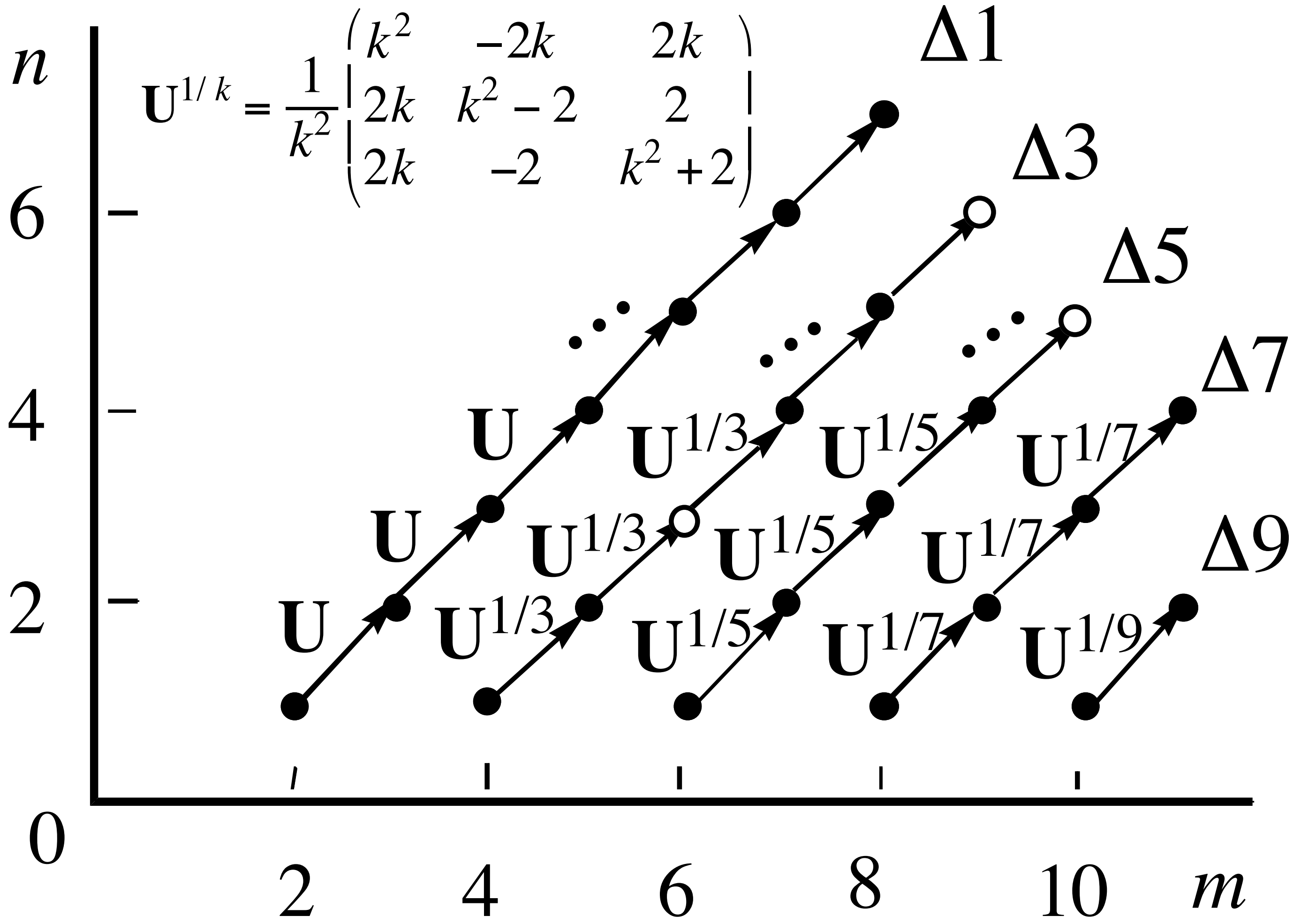
$$\mathbf{D}^{1/3}(7\ \ 24\ \ 25)^{\mathrm{T}} = (27\ \ 36\ \ 45)^{\mathrm{T}}, \mathbf{D}^{1/3}(27\ \ 36\ \ 45)^{\mathrm{T}} = (55\ \ 48\ \ 73)^{\mathrm{T}}$$

$$\mathbf{D}^{1/3}(55\ \ 48\ \ 73)^{\mathrm{T}} = (91\ \ 60\ \ 109)^{\mathrm{T}},\ \ etc.,$$

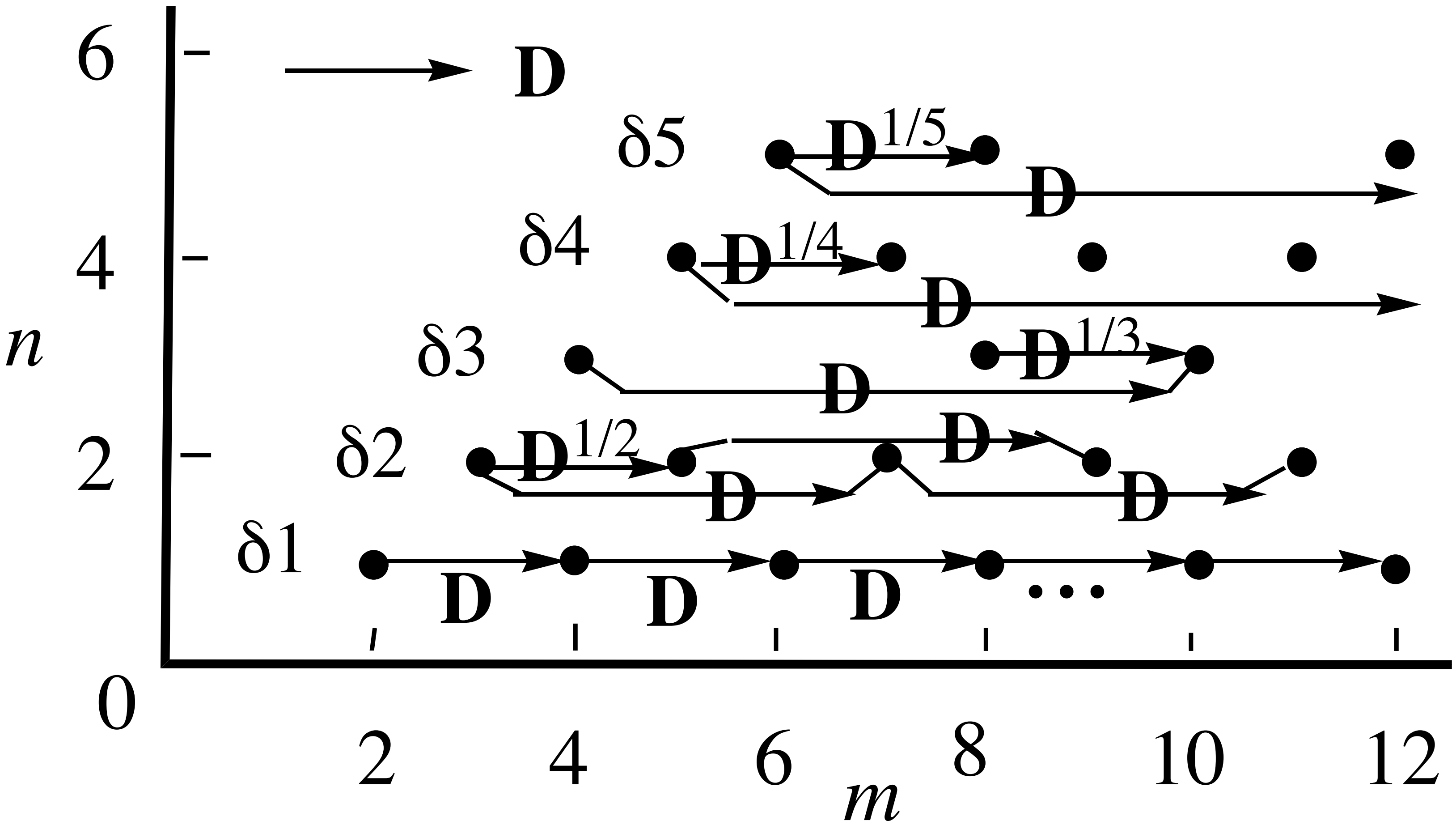
All the pPT's are related with $\mathbf{U}^{1/n}$ but not with $\mathbf{U}$



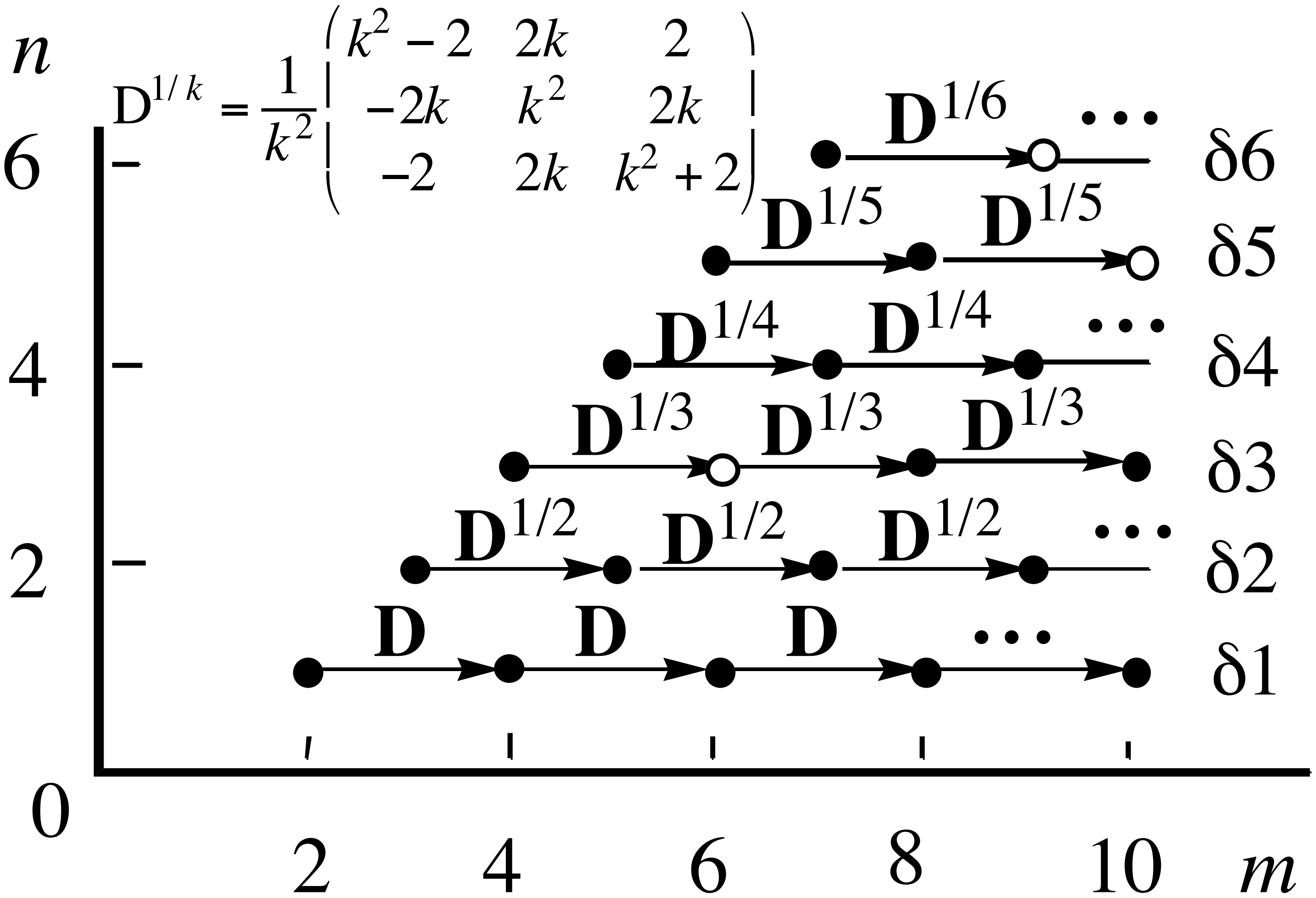
$\mathbf{U}^{1/n}$を使えば Δ グループは全て漸化式と同じ繋がり方になる



All the pPT's are related with $\mathbf{D}^{1/n}$ but not with $\mathbf{D}$



$\mathbf{D}^{1/n}$を使えばδグループは全て漸化式と同じ繋がり方になる



ここまでのまとめ
（ピタゴラス三角形の系統的分類と体系的な理解）

1) (既約)ピタゴラス三角形の新しい分類
   二辺間の差 (Δ, δ, d)
2) Hall の行列 UとD の j / k 乗根の一般式の導出とその意味付け
3) 全てのPTを $U^{j/k}(3\ 4\ 5)^T$ 又は $D^{j/k}(3\ 4\ 5)^T$で表す
4) A, U, D 系列の漸化式を行列 A, U, D から導出
   （演算子法）

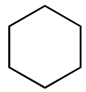
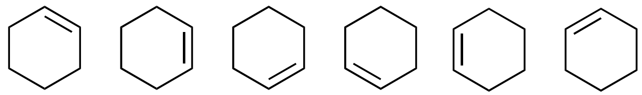
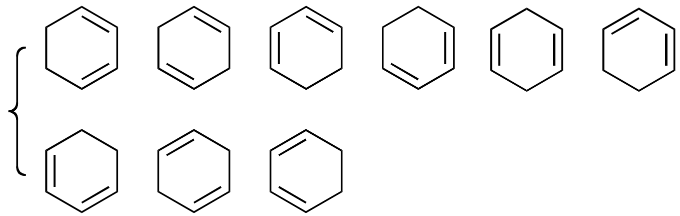
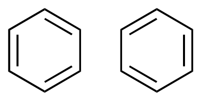
更に

5) トポロジカルインデックス Z による 1) の図形的意味付け
   （グラフ理論）
6) 整数 n の平方根を近似するPTの系列の発見
   （無理数の有理数近似）
7) アポロニウス の窓

トポロジカルインデックス Z (Hosoya 1971)

非隣接数 $p(\mathrm{G}, k)$
グラフGの中から互いに隣り合わないk本の辺を選ぶ組合せの数

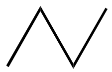
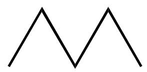
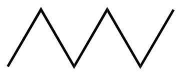
トポロジカルインデックス Z
$p(\mathrm{G}, k)$ の総和

k	$p(\mathrm{G},k)$	
0	1	 **(by definition)**
1	6	
2	9	
3	2	

$Z_G = 18$ $\quad Q_G(x) = 1 + 6x + 9x^2 + 2x^3$

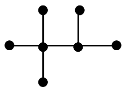
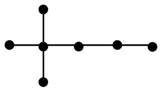
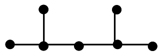
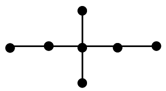
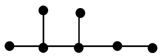
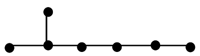
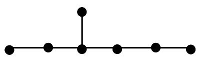
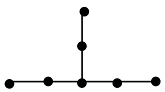
$M_G(x) = x^6 - 6x^4 + 9x^2 - 2$

経路グラフの Z はフィボナッチ数

N	G		$p(\mathrm{G}, k)$					Z_{G}
		$k =$	0	1	2	3	4	
1								1
2			1					2
3			1	2				3
4			1	3	1			5
5			1	4	3			8
6			1	5	6	1		13
7			1	6	10	4		21
8			1	7	15	10	1	34

Fibonacci numbers

Zは異性体の構造を識別できる

	$p(G,k)$				
k =	0	1	2	3	Z_G
	1	6	6	0	13
	1	6	7	0	14
	1	6	8	0	15
	1	6	7	2	16
	1	6	8	2	17
	1	6	9	2	18
	1	6	9	3	19
	1	6	9	4	20
	1	6	10	4	21

更に

アルカンの沸点 $\propto$ Z

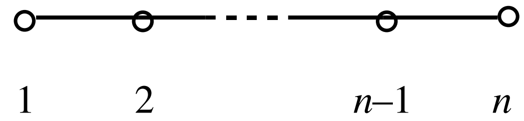
etc.

Zの整数論の中での役割

連分数 (continued fraction)
連分多項式 (continuant proposed by Euler)
毛虫グラフ (caterpillar graph)
ペル方程式（Pell equation）とその最速解法
一般フィボナッチ数（generalized Fibonacci series）
　ペル数（Pell number）及びそれらの Z グラフ
ピタゴラスの三角形（Pythagorean triangle）
ヘロンの三角形（Heronian triangle）

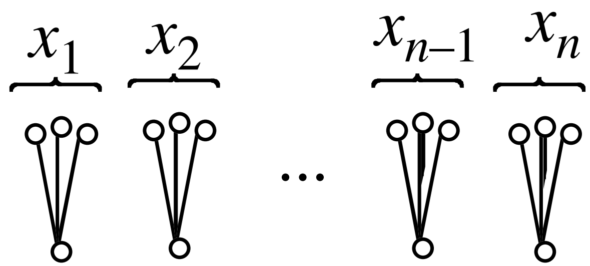
毛虫グラフ（ caterpillar graph ）

経路グラフ
path graph P_n



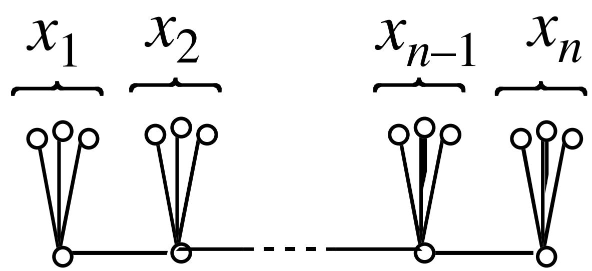
+

星グラフ
star graph
$S_n(x_1, x_2, \ldots, x_n)$



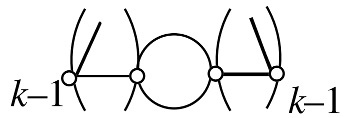
=

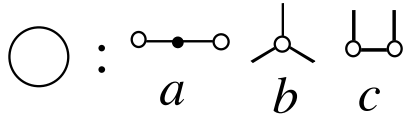
毛虫グラフ
caterpillar graph
$C_n(x_1, x_2, \ldots, x_n)$

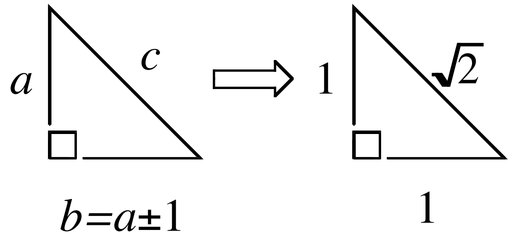


ピタゴラスの三つ子は「けむしグラフ」の Z

k	1	2	3	4	
(m, n)	(2, 1)	(5, 2)	(12, 5)	(29, 12)	
a_k	3	21	119	697	odd
b_k	4	20	120	696	odd
c_k	5	29	169	985	even







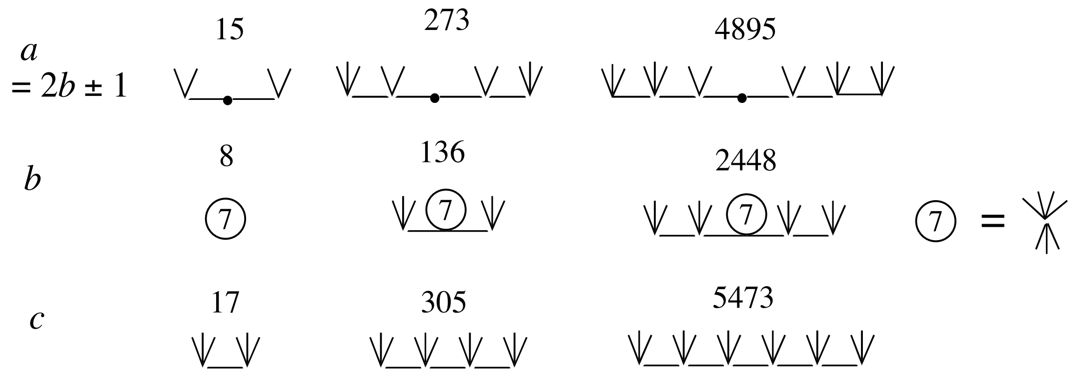
$a, b : f_k = 5 f_{k-1} + 5 f_{k-2} - f_{k-3}$ $\qquad$ $c, a+b : f_k = 6 f_{k-1} - f_{k-2}$

しかも、全てSymCat (symmetrical caterpillar)

$(1,2,\sqrt{5})$ PT を表すZ

これもSymCat (symmetrical caterpillar)

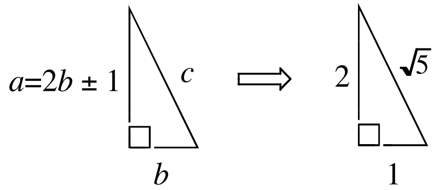
トポロジカル
インデックス
Z との対応



$$a, b : f_k = 17 f_{k-1} + 17 f_{k-2} - f_{k-3}$$

$$c : f_k = 18 f_{k-1} - f_{k-2}$$

$$m, n : f_k = 4 f_{k-1} + f_{k-2}$$



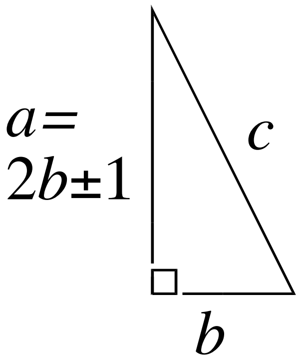
変換行列と
漸化式との
関係

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 7 & 4 & 8 \\ 4 & 1 & 4 \\ 8 & 4 & 9 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{X}(1 \quad 0 \quad 1)^{\mathrm{T}} = (15 \quad 8 \quad 17)^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{X}(15 \quad 8 \quad 17)^{\mathrm{T}} = (273 \quad 136 \quad 305)^{\mathrm{T}}, \text{etc.}$$

$$\det(\mathbf{X} - \hat{\mathrm{O}}\mathbf{E}) = -[\hat{\mathrm{O}}^3 - 17\hat{\mathrm{O}}^2 - 17\hat{\mathrm{O}} + 1] = -(\hat{\mathrm{O}} + 1)(\hat{\mathrm{O}}^2 - 18\hat{\mathrm{O}} + 1)$$

$\sqrt{n}$ を近似するPTの系列



$$a^2+b^2=c^2$$

に　$a=2b\pm1$　を代入すると

$$(5b\pm2)^2+1=5c^2$$

ここで　$x=5b\pm2,\quad y=c$　と置けば，問題は

ペル方程式　$x^2-5y^2=-1$　に帰結する．

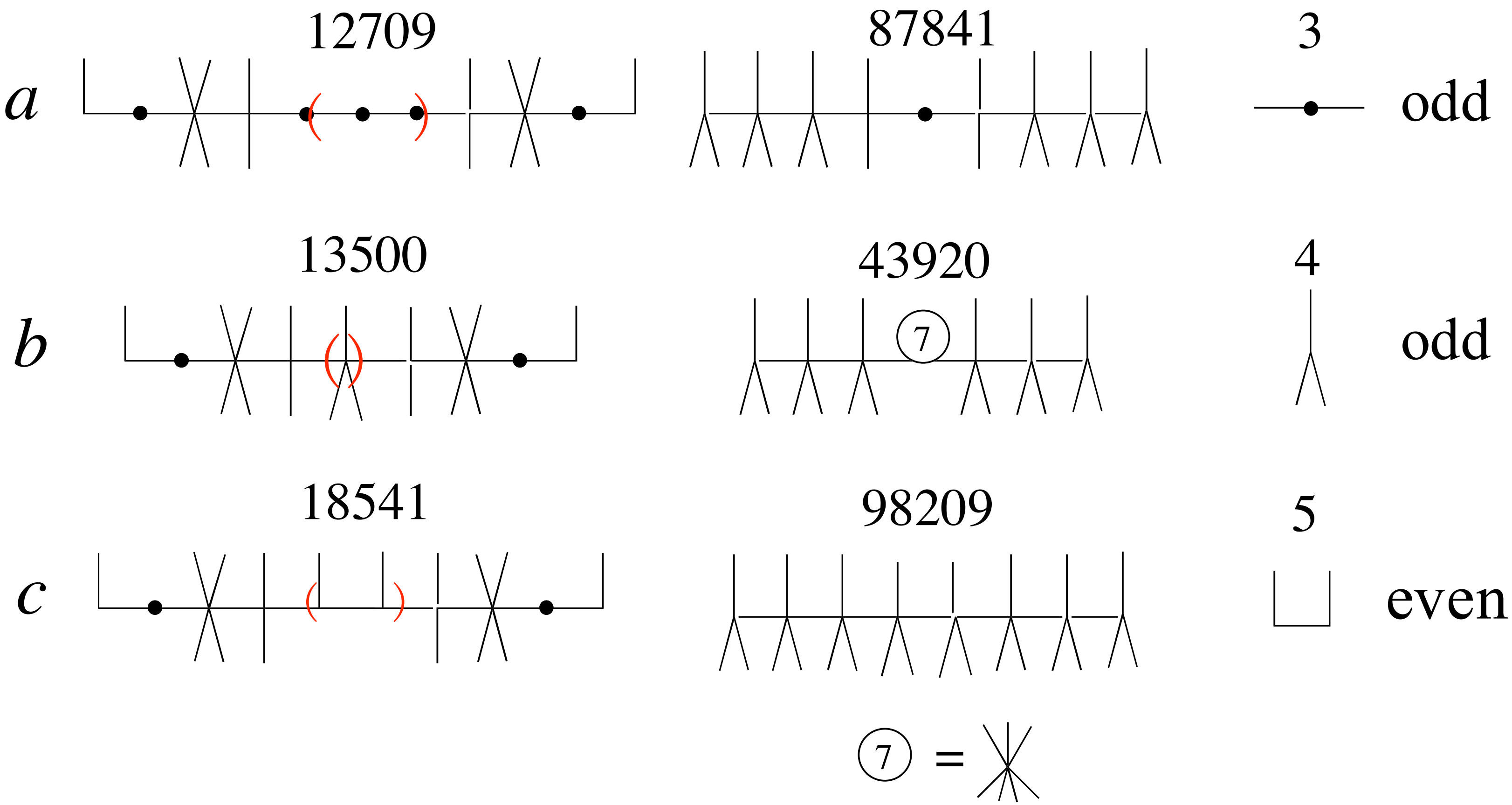
この結果，次のような系列のPTが得られる．

Pell equation

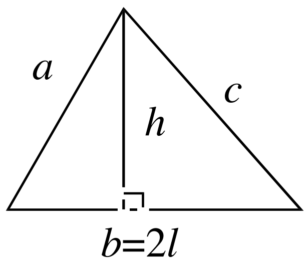
l	$x=5b\pm2$	$y=c$	$\pm$	b	$a=2b\pm1$	m	n	$(2a+b)/c$
1	38	17	−	8	15	4	1	2.23529
2	682	305	+	136	273	17	4	2.23606557
3	12238	5473	−	2448	4895	72	17	2.2360679700
4	219602	98209	+	43920	87841	305	72	2.2360679774766

全てのpPTの3辺はSymCatのZで表される

バビロニア　　$\sqrt{5}$を近似するpPT



ヘロンの三角形も topological index で整理される!



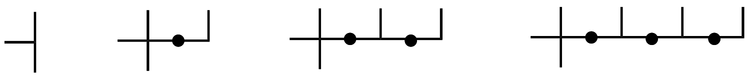
$$s = (a + b + c)/2$$

$$S = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)}$$

a, b, c, S : All integers

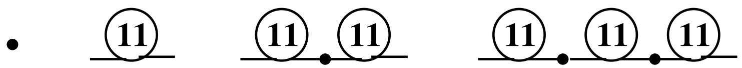
l	2	7	26	97
$a = 2l-1$	3	13	51	193
$b = 2l$	4	14	52	194
$c = 2l+1$	5	15	53	195

b



non-SymCat

$S = hl$	6	84	1170	16296
$S / 6$	1	14	195	2716



SymCat

Mathematical Chemistry（数理化学）のすすめ

化学は 本来 数学的な学問である
しかし、化学者自身 それを知らない
だから、数学とは 距離を置こうとする

自らの chemical thinking と
mathematical thinking の類似性を認識したい
それが、mathematical chemistry の第一歩

International Society of Mathematical Chemistry
Journal of Mathematical Chemistry (Springer)
www.springerlink.com