

Knots in rectilinear spatial complete graphs and homological invariants

新國 亮 (金沢大学人間社会学域)

本稿では、空間グラフが適当な条件下で含み得る結び目や絡み目の型や個数を、ホモロジー不変量を用いて評価するという研究を紹介します。

1. 研究の背景と動機

以下、グラフは全て有限グラフで自然に位相空間とみなします。グラフ G の \mathbb{R}^3 への埋め込み $f : G \rightarrow \mathbb{R}^3$ (またはその像 $f(G)$) を、 G の空間埋め込みまたは単に空間グラフといいます。円周と同相な G の部分グラフを G のサイクルといい、幾つかのサイクルの非交和の f による像として、 $f(G)$ は結び目や絡み目を含み得ます。 G の2つの空間埋め込み f と g は、 \mathbb{R}^3 の向きを保存する同相写像 Φ が存在して $\Phi \circ f = g$ となるとき、アンビエント・イソトピックであるといいます。また、 G の空間埋め込み f が自明であるとは、 f とアンビエント・イソトピックな G の空間埋め込み h で、 $h(G)$ が \mathbb{R}^3 内の平面に含まれるものが存在するときをいいます。

平面に埋め込めないグラフが存在することは良く知られており、そのようなグラフは自明な空間埋め込みを持ちません。それどころか、次の定理 1.1 のように、任意の空間埋め込みが非自明な結び目や絡み目を含んでしまうグラフが存在します。以下、 K_n で n 頂点完全グラフを表し、また、 $\text{lk}(L)$ で2成分絡み目 L の絡み数、 $a_2(K)$ で結び目 K の Conway 多項式 $\nabla_K(z)$ の z^2 の係数を表します。

定理 1.1. (Conway-Gordon の定理 [3])

- (1) K_7 の任意の空間埋め込み f に対し、 K_7 のあるサイクル γ が存在して、 $a_2(f(\gamma)) \equiv 1 \pmod{2}$ である。
- (2) K_6 の任意の空間埋め込み f に対し、 K_6 の互いに交わらないある2つのサイクル γ_1, γ_2 が存在して、 $\text{lk}(f(\gamma_1 \cup \gamma_2)) \equiv 1 \pmod{2}$ である。

定理 1.1 (1) において、含まれる非自明結び目の型を特定することはできません。実際、各辺に非自明結び目を適当に連結和することで、任意の結び目型に対し、それを含まない K_7 の空間埋め込みを構成することができます。(2) においても同様に、含まれる非自明絡み目の型は特定できません。では、各辺が線分となっている空間埋め込みではどうでしょうか？ いま、グラフ G の空間埋め込み f が直線型であるとは、 $f(G)$ の各辺が \mathbb{R}^3 内の線分であるときをいいます。直線型空間グラフは、特に化学への応用上の観点からは自然な概念です。即ち、分子化合物において2つ

の原子の間の共有結合を辺とみなしてできる分子グラフを空間グラフとして調べるのですが、共有結合部分はそれ自身で結ばったり絡まったりせず、線分と考えるのが自然なわけです。図 1.1 は K_6 の直線型空間埋め込みの例です。

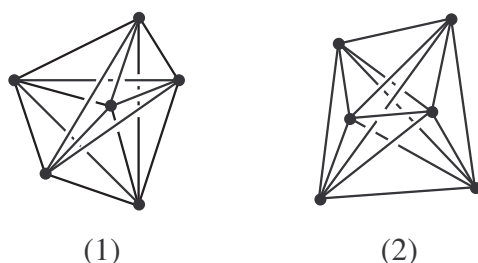


図 1.1: K_6 の直線型空間埋め込みの例

図 1.1 (1), (2) の埋め込みはいずれも 2 成分非自明絡み目を含んでおり、更に (2) は非自明結び目も含んでいます (探してみてください)。そこで直線型空間グラフが含む結び目や絡み目を調べるにあたり、**結び目や絡み目を区分的線型に実現する各線分の最小数が関係する**であろうことが想像できます。いま、絡み目 L とアンビエント・イソトピックな直線型空間埋め込みを持つグラフの最小辺数 $s(L)$ を、 L の棒指数といいます。棒指数においては、次の基本的事実が既に知られています。

定理 1.2. (1) 非自明結び目 K に対し、 $s(K) \geq 6$ である。特に、棒指数 6 の結び目は三葉結び目に限り、また、棒指数 7 の結び目は 8 の字結び目に限る。
 (2) 2 成分絡み目 L に対し、 $s(K) \geq 6$ である。特に、棒指数 6 の 2 成分絡み目は、2 成分自明絡み目及び Hopf 絡み目に限る。

従って、まず定理 1.2 (1) により、 K_7 の直線型空間埋め込みが含み得る非自明結び目 K は、三葉結び目もしくは 8 の字結び目のいずれかとなり、いずれも $a_2(K) \equiv 1 \pmod{2}$ を満たすのですが、実は次の定理が知られています。

定理 1.3. (Brown [2], Ramírez Alfonsín [7]) K_7 の任意の直線型空間埋め込み f に対し、 K_7 のあるサイクル γ が存在して、 $f(\gamma)$ は三葉結び目である。

注意すべきは、[2] は未出版であり、¹ また公式には [7] で出版された証明が、有向マトロイド理論と計算機の援用による計算幾何学的なものであるということです。一方、 K_6 の直線型空間埋め込みが含み得る 2 成分非自明絡み目は Hopf 絡み目に限り、非自明結び目は三葉結び目に限ることが、定理 1.2 (1), (2) から直ちにわかりますが、それらの間の関係及び個数について、次の定理が知られています。²

定理 1.4. (Huh-Jeon [5]) K_6 の任意の直線型空間埋め込み f に対し、 $f(K_6)$ に含まれる三葉結び目は高々 1 つしかない。更に、

¹筆者は文献 [2] の内容を確認できていません。

² K_6 の任意の線型空間埋め込みが高々 3 つの Hopf 絡み目しか含まないこと自体は、Hughes [4] でも示されていますが、三葉結び目の個数までは調べていないようです。

- (1) $f(K_6)$ が三葉結び目を含まない $\iff f(K_6)$ はただ1つの Hopf 絡み目を含む.
(2) $f(K_6)$ が三葉結び目を含む $\iff f(K_6)$ はちょうど3つの Hopf 絡み目を含む.

[5] ではマトロイドという言葉こそ出てきませんし計算機も用いませんが, 基本的に Alfonsín [7] の方法に沿っていますので, やはり計算幾何学的なものと言って良いと思います. そこで, **定理 1.3 及び定理 1.4 に対し, 有向マトロイド理論も計算機も用いない位相的別証明を与えたい**というのが今回の研究の動機です. 今回, いずれの定理にもそのような別証明を与えることができました. 次節ではそこで用いる空間グラフのホモロジー不変量に関する幾つかの結果を紹介します. 3, 4 節で, 定理 1.3, 定理 1.4 の別証明のアイディア及び概略をそれぞれ述べます.

2. 空間グラフのホモロジー不変量

グラフ G を5頂点完全グラフ K_5 もしくは $3+3$ 頂点完全2部グラフ $K_{3,3}$ とし, 図 2.1 に示したように各辺にラベルを貼り, また向きを入れておきます. いま, G の互いに交わらない2辺の非順序対 (x, y) に対し, ウェイト $\varepsilon(x, y) \in \{-1, 1\}$ を, $G = K_5$ のときは $\varepsilon(e_i, e_j) = 1, \varepsilon(d_i, e_j) = \varepsilon(d_i, d_j) = -1$ で定め, 一方, $G = K_{3,3}$ のときは $\varepsilon(c_i, c_j) = \varepsilon(b_i, b_j) = 1, c_i$ と b_j が図 2.1 において向きを込めて平行なら $\varepsilon(c_i, b_j) = 1$, そうでないなら $\varepsilon(c_i, b_j) = -1$ で定めます.

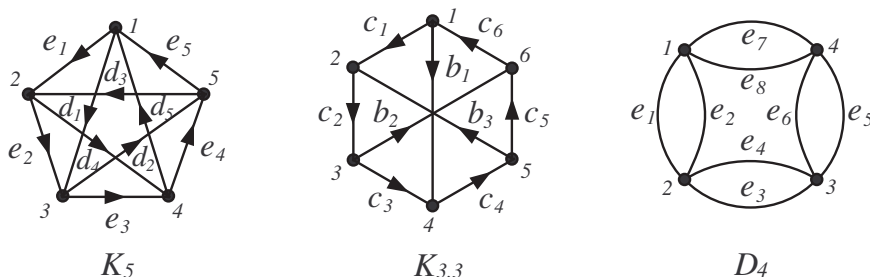


図 2.1: $K_5, K_{3,3}, D_4$

いま, G の空間埋め込み f と, G の互いに交わらない2辺の非順序対 (x, y) に対し, $f(x)$ と $f(y)$ の間の交差点の符号和を $l(f(x), f(y))$ と表すとき,

$$\mathcal{L}(f) = \sum_{(x,y)} \varepsilon(x, y) l(f(x), f(y))$$

を f の **Simon 不変量** と呼びます. 例えば図 2.2 の左図の K_5 の空間埋め込み f に対しては $\mathcal{L}(f) = -3$ です. Simon 不変量は奇整数に値を取るホモロジー不変量であることが知られています (谷山 [10]). ここでホモロジー不変量とは, [10] で導入された空間グラフの **ホモロジー** という同値関係で不変という意味です.³ 例えば絡み数は最も代表的なホモロジー不変量です.

³空間グラフのホモロジーの定義はここでは述べませんが, 現在では, グラフ G の2つの空間埋め込み f, g がホモロガスである為の必要十分条件は, f と g が有限回の **デルタ変形** とアンビエント・アイソトピーで移り合うことであることが知られています [6].

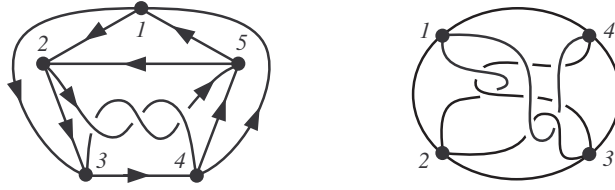


図 2.2: K_5 の空間埋め込み, 及び D_4 の空間埋め込み

さて, 一般にグラフ G の k サイクルとは, G のちょうど k 本の辺から成るサイクルのことをいい, 特に k が G の頂点数に等しいとき, **Hamilton サイクル**と呼ばれます. $\Gamma^{(k)}(G)$ で G の k サイクル全体の集合を表し, 特に G の Hamilton サイクル全体の集合を $\Gamma_h(G)$ と表すことにします. いま, $G = K_5$ もしくは $K_{3,3}$ のとき, G の空間埋め込み f に対し,

$$\alpha(f) = \sum_{\gamma \in \Gamma_h(G)} a_2(f(\gamma)) - \sum_{\gamma \in \Gamma^{(4)}(G)} a_2(f(\gamma))$$

とおきます. 一方, D_4 で 4 サイクルの各辺を 2 重化したグラフを表し, 図 2.1 に示したように各辺にラベルを貼っておきます. D_4 の 2 サイクル $e_i \cup e_j$ を γ_{ij} , 4 サイクル $e_i \cup e_j \cup e_k \cup e_l$ を γ_{ijkl} で表すとともに, $q = 0, 1$ に対し, $C_q \subset \Gamma^{(4)}(D_4)$ を

$$C_q = \{\gamma_{ijkl} \mid i + j + k + l \equiv q \pmod{2}\}$$

で定めます. そこで D_4 の空間埋め込み f に対し,

$$\lambda(f) = \sum_{\gamma \in C_0} a_2(f(\gamma)) - \sum_{\gamma \in C_1} a_2(f(\gamma))$$

とおきます. 実はこれら $\alpha(f)$, $\lambda(f)$ もそれぞれ f のホモロジー不変量となり, 更に以下の関係式が成り立つことが知られています.

定理 2.1. (本橋-谷山 [6]) K_5 もしくは $K_{3,3}$ の任意の空間埋め込み f に対し,

$$\alpha(f) = \frac{\mathcal{L}(f)^2 - 1}{8} \geq 0.$$

定理 2.2. (谷山-安原 [9]) D_4 の任意の空間埋め込み f に対し,

$$|\lambda(f)| = |\text{lk}(f(\gamma_{12} \cup \gamma_{56}))\text{lk}(f(\gamma_{34} \cup \gamma_{78}))|.$$

いずれの定理も, 空間グラフに含まれる非自明結び目を探す際に非常に有効です. 例えば図 2.2 の左図の空間埋め込み f に対しては, $\mathcal{L}(f) = -3$ から $\alpha(f) = 1$ となり, また図 2.2 の右図の D_4 の空間埋め込み f に対しては, $|\text{lk}(f(\gamma_{12} \cup \gamma_{56}))| = |\text{lk}(f(\gamma_{34} \cup \gamma_{78}))| = 1$ より $|\lambda(f)| = 1$ ですから, いずれの場合もどこかに非自明結び目が必ず見つかるというわけです. 定理 2.2 の関係式は, 昨今では K_7 のように任意の空間埋め込みが非自明結び目を含んでしまうグラフを探す研究に頻繁に応用されていますが, 定理 2.1 はこれまであまり応用されてこなかったような印象があります. 今回の研究では, 全面的に定理 2.1 の関係式を応用します.

3. 定理 1.3 の位相的別証明

まず, 全く位相的に成り立つ次の補題を用意します.

補題 3.1. $n \geq 7$ のとき, K_n の空間埋め込み f において, 次の (1) または (2) が必ず成り立つ.

- (1) K_n のある 5 サイクル, または n サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) > 0$.
- (2) K_n のある 4 サイクル, または $(n-1)$ サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) < 0$.

補題 3.2. $n \geq 7$ のとき, K_n の空間埋め込み f において, 次の (1) または (2) が必ず成り立つ.

- (1) K_n のある 6 サイクル, または n サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) > 0$.
- (2) K_n のある 4 サイクル, または $(n-2)$ サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) < 0$.

以下, 補題 3.1 を示します. (1) と (2) のいずれも成り立たない K_n の空間埋め込み g が存在したとします. いま, $n \geq 7$ のとき, K_n の任意の空間埋め込み f に対し, K_n のある Hamilton サイクル γ_0 が存在して, $a_2(f(\gamma_0)) \equiv 1 \pmod{2}$ となることが知られています (Blain-Bowlin-Foisys-Hendricks-LaCombe [1]). 従って仮定から $a_2(f(\gamma_0)) < 0$ です. そこで必要なら γ_0 の頂点のラベルを貼り替えて $12 \cdots n$ に揃えておき, この γ_0 に辺 13, 14, 24, 25, 35 を加えてできる K_n の部分グラフを H とおきます (図 3.1 の左図). H は K_5 の細分, 即ち K_5 に同相であることに注意して下さい. このとき, K_5 の 5 サイクルは H の 5 サイクル及び n サイクルに対応し, 一方, K_5 の 4 サイクルは H の 4 サイクル及び $(n-1)$ サイクルに対応することから

$$\alpha(g|_H) = \sum_{\substack{\gamma \in \Gamma^{(k)}(H) \\ k=5, n}} a_2(g(\gamma)) - \sum_{\substack{\gamma \in \Gamma^{(k)}(H) \\ k=4, n-1}} a_2(g(\gamma)) \quad (3.1)$$

となりますが, (3.1) の左辺は定理 2.1 から非負で, 一方, 右辺は仮定から負となり, 矛盾が生じます. 補題 3.2 は, H として図 3.1 の右図のような $K_{3,3}$ の細分を取ることで, 全く同様に示されます.

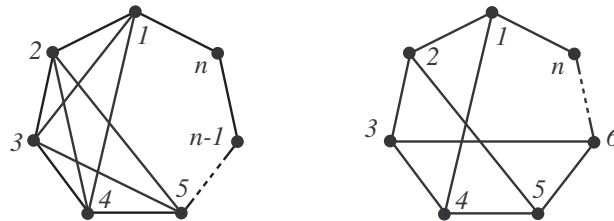


図 3.1: K_7 が含む $K_5, K_{3,3}$ の細分 H

そこでいま, 上の 2 つの補題に定理 1.2 (1) を組み合わせることにより, 特に直線型空間埋め込みに関して, 次の定理 3.3 の形にまとめることができます. 更に, この定理において特に $n = 7$ とすることで, 定理 1.3 の別証明を与えることができます.

定理 3.3. $n \geq 7$ のとき, K_n の直線型空間埋め込み f において, 次の (1), (2) または (3) が必ず成り立つ.

- (1) K_n のある n サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) > 0$.
- (2) K_n のある 6 サイクル γ , 及び $(n-1)$ サイクル γ' が存在して, $f(\gamma)$ は三葉結び目であり, かつ $a_2(f(\gamma')) < 0$.
- (3) K_n のある $(n-2)$ サイクル γ , 及び $(n-1)$ サイクル γ' が存在して, $a_2(f(\gamma)) < 0$ かつ $a_2(f(\gamma')) < 0$.

(定理 1.3 の別証明) K_7 の直線型空間埋め込みを f とします. 定理 1.2 (1) から, K_7 の任意の 6 サイクル γ において, $f(\gamma)$ は自明な結び目か三葉結び目にしかなり得ません. $a_2(\text{三葉結び目}) = 1$ ですから, 定理 3.3 において (1) のみが成り立ちます. 従って K_7 のある 7 サイクル γ_0 が存在して $a_2(f(\gamma_0)) > 0$ となりますが, 同じく定理 1.2 (1), 及び $a_2(\text{8 の字結び目}) = -1$ によって, $f(\gamma_0)$ は三葉結び目です. \square

ちなみに $n = 8$ の場合は, 次の系が得られます.

系 3.4. K_8 の直線型空間埋め込み f において, 次の (1) または (2) が必ず成り立つ.

- (1) K_8 のある 8 サイクル γ が存在して, $a_2(f(\gamma)) > 0$.
- (2) K_8 のある 6 サイクル γ , 及び 7 サイクル γ' が存在して, $f(\gamma)$ は三葉結び目であり, かつ $f(\gamma')$ は 8 の字結び目である.

注意 3.5. K_8 は自然に K_7 を含むので, 定理 1.3 によって K_8 の任意の直線型空間埋め込みは三葉結び目を含みますが, Alfonsín [8] によれば, K_8 のある直線型空間埋め込みで, 含まれる結び目は自明な結び目か三葉結び目しかないようなものが存在するようです. 従って, K_8 の任意の直線型空間埋め込みに必ず現れる結び目型は, K_7 と同様に三葉結び目に限ることになります. この三葉結び目が必ず 8 サイクルの像で実現できるかどうかは, 筆者は知りません. 実現できないような例, 即ち系 3.4 の (1) が成り立たない例があると面白いと思います.

4. Conway-Gordon の定理の精密化と定理 1.4 の位相的別証明

さて今度は, 定理 1.4 の別証明を与えます. いま, K_6 の部分グラフで K_5 と同型なものを G_i ($i = 1, 2, \dots, 6$), $K_{3,3}$ と同型なものを H_i ($i = 1, 2, \dots, 10$), 更に互いに交わらない 2 つの 3 サイクルの組を L_i ($i = 1, 2, \dots, 10$) と表しておきます. 今回, K_6 の空間埋め込み f に対し, $f|_{G_i}$, $f|_{H_i}$ の Simon 不変量及び $f|_{L_i}$ の絡み数について, 全く位相的に次の関係式が成り立つことがわかりました.

補題 4.1. K_6 の任意の空間埋め込み f に対し,

$$\sum_{i=1}^{10} \mathcal{L}(f|_{H_i})^2 - \sum_{i=1}^6 \mathcal{L}(f|_{G_i})^2 = 4 \sum_{i=1}^{10} \text{lk}(f|_{L_i})^2. \quad (4.1)$$

そこで, (4.1) の各 $\mathcal{L}(f|_{G_i})^2, \mathcal{L}(f|_{H_i})^2$ に定理 2.1 を適用して計算すると, 最終的に次の形にまとめることができます.

定理 4.2. K_6 の任意の空間埋め込み f に対し,

$$\sum_{i=1}^{10} \text{lk}(f|_{L_i})^2 = 2 \left\{ \sum_{\gamma \in \Gamma^{(6)}(K_6)} a_2(f(\gamma)) - \sum_{\gamma \in \Gamma^{(5)}(K_6)} a_2(f(\gamma)) \right\} + 1. \quad (4.2)$$

(4.2) を 2 を法として考えれば, $\sum_{i=1}^{10} \text{lk}(f|_{L_i}) \equiv 1 \pmod{2}$ ですから, ある L_i が存在して $\text{lk}(f|_{L_i}) \equiv 1 \pmod{2}$ となります. これは Conway-Gordon の定理 (定理 1.1 (2)) にほかなりません. 即ち, 定理 4.2 は K_6 に関する Conway-Gordon の定理の, いわば整数持ち上げを与えています. この定理 4.2 を用いることで, 定理 1.4 に別証明を与えることができます.

(定理 1.4 の別証明) K_6 の直線型空間埋め込みを f とします. 定理 1.2 (1) によって, K_6 の任意の 5 サイクル γ に対し $f(\gamma)$ は自明な結び目ですので, 定理 4.2 から

$$\sum_{i=1}^{10} \text{lk}(f|_{L_i})^2 = 2 \sum_{\gamma \in \Gamma^{(6)}(K_6)} a_2(f(\gamma)) + 1. \quad (4.3)$$

となります. 更に, $f(K_6)$ が含み得る 2 成分非自明絡み目は Hopf 絡み目に限り, また非自明結び目は三葉結び目に限ることを思い出します. $\text{lk}(\text{Hopf 絡み目}) = \pm 1$, $a_2(\text{三葉結び目}) = 1$ ですから, 従って (4.3) より

$$\text{Hopf 絡み目の個数} = 2(\text{三葉結び目の個数}) + 1 \quad (4.4)$$

となります. Hopf 絡み目の個数は $\sum_{i=1}^{10} \text{lk}(f|_{L_i}) \equiv 1 \pmod{2}$ から奇数ですので, 1, 3, 5, 7, 9 のいずれかです. 従って $f(K_6)$ が含む三葉結び目の個数と Hopf 絡み目の個数の組は, (4.4) から (0, 1), (1, 3), (2, 5), (3, 7), (4, 9) のいずれかに限られます. 以下, 我々の目標は (2, 5), (3, 7), (4, 9) の実現可能性を排除することです.



図 4.1: $F_{ij} = L_i \cup L_j$, 及びその直線型空間埋め込み

いま, $i \neq j$ に対し, $F_{ij} = L_i \cup L_j$ は必ず図 4.1 の左図のグラフと同型で, 共有辺を 1 点に縮約すると D_4 が得られることに注意します. もし $|\text{lk}(f|_{L_i})| = |\text{lk}(f|_{L_j})| = 1$ なら (例えば図 4.1 の右図), 定理 2.2 を $f|_{F_{ij}}$ に適用できて $\sum_{\gamma \in \Gamma^{(6)}(F_{ij})} a_2(f(\gamma)) = 1$ となり, $f(F_{ij})$ はただ 1 つの三葉結び目を含むこととなります (少々細かい議論が

必要). そこで $(2, 5)$ が実現されたと仮定すると, ある 10 個の F_{ij} が存在して, $f(F_{ij})$ はただ 1 つの三葉結び目を含みます. このとき, K_6 の任意の 6 サイクルはちょうど 3 つの F_{ij} に共通することを考慮しても, $f(K_6)$ は少なくとも 4 つの三葉結び目を含まなければなりません, 含まれる三葉結び目はちょうど 2 つのはずですから, 矛盾が生じます. $(3, 7)$, $(4, 9)$ も同様にして実現されないことがわかります. \square

高分子化学への応用上の観点からは, その分子グラフが K_6 や K_7 そのものではなく, その細分となっているような高分子を扱うほうが自然であるように思います. その意味では, 今回の別証明は位相的な命題の系として与えていますから, 少しは意義があるのではないかと考えています.

謝辞. 本研究を始めたきっかけは, 広島大学の寺垣内 政一氏に Ramírez Alfonsín 氏の論文 [7] の存在を教えて頂いたことです. また, 早稲田大学の谷山 公規氏には幾つかの有益なコメントを頂きました. お 2 人に感謝申し上げます.

参考文献

- [1] P. Blain, G. Bowlin, J. Foisy, J. Hendricks and J. LaCombe, Knotted Hamiltonian cycles in spatial embeddings of complete graphs, *New York J. Math.* **13** (2007), 11–16 (electronic).
- [2] A. F. Brown, Embeddings of graphs in E^3 , Ph. D. Dissertation, Kent State University, 1977.
- [3] J. H. Conway and C. McA. Gordon, Knots and links in spatial graphs, *J. Graph Theory* **7** (1983), 445–453.
- [4] C. Hughes, Linked triangle pairs in a straight edge embedding of K_6 , *Pi Mu Epsilon J.* **12** (2006), 213–218.
- [5] Y. Huh and C. Jeon, Knots and links in linear embeddings of K_6 , *J. Korean Math. Soc.* **44** (2007), 661–671.
- [6] T. Motohashi and K. Taniyama, Delta unknotting operation and vertex homotopy of graphs in \mathbf{R}^3 , *KNOTS '96 (Tokyo)*, 185–200, *World Sci. Publ., River Edge, NJ*, 1997.
- [7] J. L. Ramírez Alfonsín, Spatial graphs and oriented matroids: the trefoil, *Discrete Comput. Geom.* **22** (1999), 149–158.
- [8] J. L. Ramírez Alfonsín, Spatial graphs, knots and the cyclic polytope, *Contributions to Algebra and Geometry (Beiträge zur Algebra und Geometrie)*, to appear.
- [9] K. Taniyama and A. Yasuhara, Realization of knots and links in a spatial graph, *Topology Appl.* **112** (2001), 87–109.
- [10] K. Taniyama, Cobordism, homotopy and homology of graphs in R^3 , *Topology* **33** (1994), 509–523.

920-1192 金沢市角間町 金沢大学人間社会学域学校教育学類
nick@ed.kanazawa-u.ac.jp