

数学と化学の学際共同研究と福井プロジェクト II

有本 茂^{1*} 福田信幸^{2*} 廣木一^{3*} 村上達也^{4*}

成木勇夫^{5*} 斎藤恭司^{6*} 竹内 茂^{7*} 横谷正明^{8*}

Mathematics and Chemistry

Interdisciplinary Joint Research and the Fukui Project II

Shigeru ARIMOTO, Nobuyuki FUKUDA, Kazuaki HIROKI, Tatsuya MURAKAMI
Isao NARUKI, Kyoji SAITO, Shigeru TAKEUCHI, and Masaaki YOKOTANI

This is the second part of the series of articles that records essentials of the Mathematics and Chemistry Interdisciplinary Symposium 2013 Tsuyama, whose main themes were symmetry, periodicity, and repetition. The symposium was held on April 5th and 6th in Tsuyama city, Okayama, Japan, in conjunction with the Fukui Project and was devoted to the memory of the late Professor Kenichi Fukui (1981 Nobel Prize) who initiated the project. The present series also provides a challenging cross-disciplinary problem which is directly related to the Fukui conjecture and to recent carbon nanotube research. This problem is formulated using mathematical language of unique factorization domain (UFD) and related notions, which are not well known among chemists despite the importance of these notions in elucidating additivity and high-speed asymptotic phenomena in molecules having many repeating identical moieties.

Key Words: the Fukui conjecture, Elliptic functions, Unique factorization domain (UFD), Carbon nanotube, Polyacetylene

1. 緒 言

福井予想の証明には理論化学、数理論理学において比較的親近性を持つ関数解析やオペレータ代数の数学言語と同時に一般の化学者に馴染みの少ない環論、UFDの理論、特異点解消に関連する数学言語が基本的意義をもつ。

読者は本報読後の文献 1)-5)を参考にされたい。

2. UFDの数学 II

成木勇夫

定義 I: R が UFD (一意分解環) であるとは K^*/I が埋込写像

$$\Lambda \hookrightarrow K^*/I$$

によって、 Λ を基底とする自由加群 $\mathbb{Z}[\Lambda]$ と自然に同型となるときに言う。

この定義の意味をよく理解するために、任意の空でない集合 M に対して、 M を基底とする自由加群 $\mathbb{Z}(M)$ を具体的に構成して見よう。

まず次のことを注意しよう。 M から整数全体のなす加群 $\mathbb{Z}$ の中への写像の全体の集合 $\text{Map}(M, \mathbb{Z})$ は次のように定義される二つの和によって、明らかに加群 (=アーベル群= $\mathbb{Z}$ -加群) となる:

$$(\phi + \psi)(\mu) = \phi(\mu) + \psi(\mu) \quad (\mu \in M)$$

$$(\phi, \psi \in \text{Map}(M, \mathbb{Z}))$$

任意の $\phi \in \text{Map}(M, \mathbb{Z})$ に対して、その台 (=support) を

$$\text{supp}(\phi) := \{\mu \in M \mid \phi(\mu) \neq 0\}$$

と置いて定義するならば、その台が空集合となる元は零元であり、 $-\phi$ は $(-\phi)(\mu) = -\phi(\mu)$ によって決まる。

原稿受付 平成 25 年 8 月 30 日

1*, 2*, 8* 津山高専 一般科目 3* 津山高専 一般科目

4* 京都大学 物質-細胞統合システム拠点 (iCeMS)

5* 立命館大学 理工学部・数学物理学系・数理科学科

6* 東京大学 カブリ数物連携宇宙研究機構

7* 岐阜大学 教育学部・数学科

さて、目的の $Z(M)$ は $\text{Map}(M, Z)$ の部分群として次のように定義される：

$$Z(M) := \{\phi \in \text{Map}(M, Z) \mid \text{supp}(\phi) : \text{finite set}\}$$

これが部分加群であることは

$$\text{supp}(\phi) = \text{supp}(-\phi)$$

$$\text{supp}(\phi + \psi) \subseteq \text{supp}(\phi) \cup \text{supp}(\psi)$$

などから理解される。

この $Z(M)$ が M を底とする自由加群と呼ばれるのは、 M を $Z(M)$ の中に埋め込む標準写像

$$\iota : M \rightarrow Z(M)$$

が次のように定義されるからである。すなわち、与えられた $\mu_0 \in M$ に対して

$$\iota(\mu_0)(\mu) = \begin{cases} 1 & (\mu = \mu_0) \\ 0 & (\mu \neq \mu_0) \end{cases}$$

と定義する。

写像 ι は単射であり、 M と像 $\iota(M)$ を ι によって同一視すれば M は $Z(M)$ の部分集合となり、 $Z(M)$ は M の有限個の元の形式的 Z -係数 1 次結合の全体として表現される。実際、 $\phi \in Z(M)$ に対して、自明な等式

$$\phi = \sum_{\mu \in \text{supp}(\phi)} \phi(\mu) \iota(\mu)$$

が成り立つからである。

この説明から、次の $Z(M)$ の普遍的性質が証明される：

定理 I： 集合 M から任意のアーベル群 (= 加群) A の中への任意の写像 f に対して、加群準同型

$$\tilde{f} : Z(M) \rightarrow A$$

が一意的に存在して

$$f = \tilde{f} \circ \iota$$

が成り立つ。

実際

$$\tilde{f}(\phi) = \sum_{\mu \in \text{supp}(\phi)} \phi(\mu) f(\mu)$$

と必然的に定義され、また、この定義は定理の要請に対して十分である。

M を基底とする自由加群 $Z(M)$ はこの普遍的性質によって (同型を除いて) 特徴付けられることも簡単に理解される。この性質を持つ二つの加群があれば、それらのどちらにも M は自然に埋め込まれているので、一方から他方への加群準同型が二つ得られるが、それらの合成も (合成の向きを変えることによって) 二つ得られるが、どちらも恒等写像である。定理の f が M 上で恒等写像であるならば、 $\tilde{f}$ も一意性によって恒等写像でなければならないからである。このような自由加群 $Z(M)$ は函手論的なものである。

さて、 R は UFD であると仮定して、 R の商体 K の乗法群 K^* の構造を明らかにするために定理 I を応用し

て見よう。

まず UFD であるとの仮定から同型

$$(i) \quad K^* / I \cong Z(\Lambda)$$

が成り立っている。 Λ は K^* / I の既約類の集合であった。

Λ の任意の元 λ は K^* / I における剰余類であるので類 λ の中から λ を代表する (K^* の) 元を一つ選び、それを $\hat{\lambda}$ で表す。 $R^* \subseteq K^*$ なので $\lambda \mapsto \hat{\lambda}$ を Λ から加群 K^* の中への写像と考え

$$f(\lambda) := \hat{\lambda}$$

と写像 $f : \Lambda \rightarrow K^*$ を定義する。

ここで $M = \Lambda$, $A = K^*$ と置いて、定理 I を適用すれば、加群準同型

$$(ii) \quad \tilde{f} : Z(\Lambda) \rightarrow K^*$$

が得られる。これを更に同型 (i) と合成すれば、準同型

$$(iii) \quad \sigma : K^* / I \rightarrow K^*$$

が定義される。更にこれを標準的全射

$$\pi : K^* \rightarrow K^* / I$$

と合成すれば $\pi \circ \sigma$ は f の取り方から Λ ($\subseteq K^* / I$)

をそれ自身に恒等的に写している。再び定理 I を同型

(i) を通して適用すれば

$$(iv) \quad \pi \circ \sigma = id_{(K^* / I)}$$

が得られる。

等式 (iv) によって、特に σ は単射であることが解り、また任意の $v \in K^*$ に対して、 v と $\sigma \circ \pi(v) = \sigma(\pi(v))$ の商は π の核 I に属することも解る。 $(K^*$ は、まだ乗法可換群と考えている。) すなわち v は I の元と $\text{Im}(\sigma)$ の元として一意に書かれる。すなわち乗法可換群 K^* は I と $\text{Im}(\sigma)$ の直積である。明らかに $\text{Im}(\sigma)$ は加法可換群 $K^* / I \cong Z(\Lambda)$ と同型だから、結局 K^* は直積

$$I \times Z(\Lambda)$$

と同型であることが証明されたのである。

具体的には $(u, \phi) \in I \times Z(\Lambda)$ に対応する K^* の元は

$$u \cdot \prod_{\lambda \in \text{supp}(\phi)} \hat{\lambda}^{\phi(\lambda)}$$

と一意的に表される。

既約類 $\lambda \in \Lambda$ は $\hat{\lambda} \in K^*$ によって代表されているので $\lambda = [\hat{\lambda}] = I\hat{\lambda}$ であるが、 λ に対応する単項イデアルは

$$(\hat{\lambda}) = \{a\hat{\lambda} \mid a \in R\}$$

と取り敢えず代表元を用いて表現する他なかったのであるが、もちろんこの単項イデアルは代表系 $\hat{\lambda}$ の取り方に依存しないので、もっと合理的に、この単項イデアルを記号

$$(\lambda)$$

で表現することにしよう。

この約束のもとで次の定理が成り立つ：

定理 II： R は UFD であり、 Λ は R^* / I における全既約類の集合であるとする。このとき、すべての $\lambda \in \Lambda$ に対して、単項イデアル (λ) は素イデアルである。

証明) R^* の元 v, v' に対して

$$vv' \in (\lambda)$$

であると仮定する。すなわち

$$(vv') \subseteq (\lambda)$$

すなわち

$$(1) \quad \lambda \leq \pi(v) + \pi(v')$$

であると仮定する。 $R^* \ni v, v'$ なので

$$0 \leq \pi(v), \pi(v')$$

すなわち

$$\phi = \pi(v), \phi' = \pi(v')$$

と置けば、もちろん λ に対しても

$$\phi(\lambda), \phi'(\lambda) \geq 0$$

である。(1) より

$$\phi(\lambda) + \phi'(\lambda) \geq 1$$

となるので

$$\phi(\lambda) \geq 1, \text{ 或いは } \phi'(\lambda) \geq 1$$

でなければならない。すなわち

$$v \in (\lambda), \text{ 或いは } v' \in (\lambda)$$

が成り立つ。これで (λ) が素イデアルであることが証明された。

ここで、次のような反省をして見る。 R が UFD であることは、同型

$$\mathbb{Z}(\Lambda) \cong K^* / I$$

の存在であった。 Λ は K^* / I の部分集合なので写像 $\mathbb{Z}(\Lambda) \rightarrow K^* / I$ は埋込 $\Lambda \hookrightarrow K^* / I$ から一意的に決まるが、これが同型であることが、 R が UFD であることの決定的な意味である。すなわち逆同型

$$K^* / I \rightarrow \mathbb{Z}(\Lambda)$$

が存在することが重要なのである。

実際、まず標準写像 $K^* \rightarrow K^* / I$ と合成することによって、写像

$$K^* \rightarrow \mathbb{Z}(\Lambda)$$

が得られ、また各 $\lambda \in \Lambda$ に対して射影写像

$$\mathbb{Z}(\Lambda) \rightarrow \mathbb{Z} \cdot \iota(\lambda) \approx \mathbb{Z}$$

を更に連結して、加群準同型

$$v_\lambda : K^* \rightarrow \mathbb{Z}$$

が得られる。これは商体 K に対して、付値 (valuation) と呼ばれるものを本質的に与えているのである。このことについて、少し説明をして見よう。

一般に体 K と全順序加群 G が与えられているとき、 K から $G \cup \{\infty\}$ への写像 v が付値であるとは次の諸条件が満たされているときに言う：

$$(1) \quad v(a) = \infty \Leftrightarrow a = 0$$

$$(2) \quad \text{制限写像 } v|_{K^*} : K^* \rightarrow G \text{ は加群準同型である}$$

$$(3) \quad v(a+b) \geq \min\{v(a), v(b)\}$$

ここで ∞ は $G \cup \{\infty\}$ の最大元となる形式的元である。

R が UFD であるとき、さらに

$$v_\lambda(0) = \infty$$

で定義を補えば、

$$v_\lambda \quad (\lambda \in \Lambda)$$

はすべて付値であることが簡単に解る。今の場合 $G = \mathbb{Z}$ であって、実数の間の自然な大小関係によって、全順序加群と見做される。このような付値は一般に離散付値 (discrete valuation) と呼ばれる。この場合、さらに

$$v_\lambda(K^*) = \mathbb{Z}$$

となるので、正規離散付値 (normalized ~) と呼ばれる。

結局、 $a \in K^* = K - \{0\}$ の類 $[a] = Ia$ に同型

$$K^* / I \cong \mathbb{Z}(\Lambda)$$

を通して対応する $\mathbb{Z}(\Lambda)$ の元 ϕ を ($\mathbb{Z}(\Lambda)$ を含む) $\text{Map}(M, \mathbb{Z})$ の元と考えるとき

$$\phi(\lambda) = v_\lambda(a) \quad (\lambda \in \Lambda)$$

が成り立っており、またこの等式によって対応が確認される。

整域 R とその可逆元全体のなす群 I も、この正規離散付値族 $\{v_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ によって、それぞれ

$$\alpha) \quad R = \{a \in K \mid v_\lambda(a) \geq 0 \quad (\forall \lambda \in \Lambda)\}$$

$$\beta) \quad I = \{a \in K \mid v_\lambda(a) = 0 \quad (\forall \lambda \in \Lambda)\}$$

と特徴付けられる。(0 $\in R$, 0 $\notin I$ に注意。)

今や UFD の定義を次のように変更することが可能となる：

定義 A： 整域 R が UFD であるとは R の商体 K が、上の $\alpha), \beta)$ の他に、以下の条件を満たす正規離散付値族 $\{v_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ を持つときに言う：

$\gamma)$ 任意の $a \in K^* = K - \{0\}$ に対して $v_\lambda(a) \neq 0$ となる $\lambda \in \Lambda$ は有限個しかない。

$\delta)$ 写像

$$K^* \ni a \mapsto \sum_{\lambda \in \Lambda} v_\lambda(a) \iota(\lambda) \in \mathbb{Z}(\Lambda)$$

は加群同型

$$K^* / I \approx \mathbb{Z}(\Lambda)$$

を引き起こす。

整域 R がこの定義の意味で UFD であるとき加群

$$K^* / I \cong \mathbb{Z}(\Lambda)$$

は単なるアーベル群であるのみではなく、順序加群であることをもう一度思い起そう：

条件 (α) を見れば分るように、 $R^* = R - \{0\}$ は $K^* = K - \{0\}$ の非負元の全体であり、 K^* / I における順序関係は (R^* に基く) 整除関係に由来するものであった。(α) は全順序群 $\mathbb{Z}$ から導かれる自由加群 $\mathbb{Z}(\Lambda)$ における順序関係と一致することを述べているのである。

もちろん、 $\mathbb{Z}(\Lambda)$ における順序は一般には全順序ではない。しかし有難いことに、空でない有限部分集合に対する上限、下限の存在は既に ($\mathbb{Z}(\Lambda)$ を含んでいる) $\text{Map}(\Lambda, \mathbb{Z})$ において保証されているからである。

実際、有限部分集合

$$F = \{\phi_1, \dots, \phi_m\} \subseteq \text{Map}(\Lambda, \mathbb{Z})$$

に対して

$$(\sup F)(\lambda) = \max\{\phi_1(\lambda), \dots, \phi_m(\lambda)\}$$

$$(\inf F)(\lambda) = \min\{\phi_1(\lambda), \dots, \phi_m(\lambda)\}$$

$$\lambda \in \Lambda$$

とすれば F の上限、下限が決定されている。また $F \subseteq \mathbb{Z}(\Lambda)$ の場合は $\sup F, \inf F \in \mathbb{Z}(\Lambda)$ であることも明らかである。

これら上限、下限の存在の意義は、 K^* / I から K^* に、また K^* から R^* に戻って考えれば、非常に直観的なものとなる：

与えられた有限集合

$$\{a_1, \dots, a_m\} \subseteq R^*$$

に対して $\phi_j = [a_j] = I a_j$ ($1 \leq j \leq m$) と置き $F = \{\phi_1, \dots, \phi_m\}$ とすれば $\sup F, \inf F$ は R^* / I の元として定まる。このとき剰余類 $\sup F$ に属する元は (上限の定義により) $a_1, \dots, a_m$ の共通の倍元 (公倍元, common multiple) であり、またすべての公倍元を整除するもの、すなわち最小公倍元である。そのようなものは一般に一個ではなく、 R^* / I における一つの剰余類として定まるのである。

反対に下限 $\inf F$ は $a_1, \dots, a_m$ の共通の約元 (公約元, common divisor) であり、すべての公約元の倍元となっているもの、すなわち最大公約元のなす剰余類を意味している。

さて、いよいよ R は UFD であると仮定し、 R 上の一変数多項式環

$$S := R[X] \quad (X: \text{不定元})$$

が UFD であることの証明に、この最大公約元類の概念

を応用して見よう：
まず

$$S^* := S - \{0\}$$

と置き、 S^* の元

$$f = f(X)$$

を任意に一つ取って考えよう。すなわち多項式 f の 0 でない係数の集合を F とし、 $\inf F$ すなわちそれらの係数の最大公約元類を考えよう。

$$c \in \inf F$$

とすれば

$$p := c^{-1}f$$

はまだ S^* の元であり、与えられた f は

$$f = cp$$

と表される。では、ここで $p = p(X)$ はどのような多項式かと問うと、その 0 でない係数の公約元はすべて可逆元 (すなわち $\in I$) であるような多項式である。この性質を持つ多項式は一般に原始的 (primitive) と呼ばれるが、この概念の最も便利な定義は次のようなものである。

定理 II によって $\lambda \in \Lambda$ に対応する単項イデアル (λ) は素イデアルであるので、剰余環

$$R_\lambda := R / (\lambda)$$

は整域であり、標準全射

$$\pi_\lambda : R \rightarrow R_\lambda$$

は整域の準同型

$$\hat{\pi}_\lambda : R[X] \rightarrow R_\lambda[X]$$

を引き起す。

定義 B: S^* の元 p が原始的であるとは、すべての $\lambda \in \Lambda$ に対して

$$\hat{\pi}_\lambda(p) \neq 0$$

となることを意味する。

この定義によって有名なガウスの補題が簡単に証明される。

定理 III: S^* に属する原始多項式の全体 P は積に関して閉じている。すなわち P は S^* の部分半群である。

実際 $p, p' \in P$ とすれば、任意の $\lambda \in \Lambda$ に対して

$$\hat{\pi}_\lambda(p) \neq 0, \quad \hat{\pi}_\lambda(p') \neq 0$$

$R_\lambda[X]$ は整域であるので

$$\hat{\pi}_\lambda(pp') = \hat{\pi}_\lambda(p)\hat{\pi}_\lambda(p') \neq 0 \quad (\lambda \in \Lambda)$$

従って $pp' \in P$ 。

上で行った議論により、次の定理も証明されている：

定理 IV : 上記の記法の下で

$$S^* = R^*P$$

が成り立つ。

上の議論では、 $f \in S^*$ に対する分解表現

$$f = cp \quad (c \in R^*, p \in P)$$

の多様性もまったく明らかになっている。すなわち

$$cp = c'p' \quad (c, c' \in R^*; p, p' \in P)$$

であるならば

$$c' = uc, \quad p = up'$$

となる $u \in I$ が存在する。従って群 I の軌道空間に移行することによって、半群 S^*/I の直積表示

$$S^*/I = (R^*/I) \times (P/I)$$

が、定理の等式 $S^* = R^*P$ の補足として得られる。

さて、ここで反省して見ると、 S^*/I を含む

$$K^*/I \cong \mathbb{Z}(\Lambda)$$

が既に順序加群であり、有限部分集合に対する下限の存在定理が成り立っているので、 R 係数の多項式ばかりではなく、(0 ではない) K 係数多項式 $f = f(X)$ に対しても分解表現

$$f = cp \quad (c \in K^*, p \in P)$$

が得られる。

この事実に定理 IV と類似の表現を与えるために

$$T := K[X], \quad T^* := T - \{0\}$$

と置く。

定理 V : 上の記号のもとで

$$T^* = K^*P$$

が成り立つ。これより同型

$$T^*/K^* \cong P/I$$

および直積表示

$$T^*/I = (K^*/I) \cdot (P/I)$$

などが得られる。

さて、我々の目的は (R が UFD であるとの仮定の下で) $S = R[X]$ が UFD であることの証明であった。その目的を果すため、まず T が体 K 上の一変数多項式環として UFD であることに注意しよう。 T はユークリッドの互除法により PID (単項イデアル環) であることが解り、簡単な議論により任意の PID は UFD であることが示されるからである。

さて、ここで S と T の商体が一致してしまうことに

注意しよう。包含関係

$$R \subseteq S \subseteq T$$

によって S の商体は R の商体 K を含み、それはまた $T = KS$ を含んでしまうからである。この S と T の共通の商体を記号 L で表そう。 L は 体 K 上の一変数有理関数体 と呼ばれるものである。

まず P/I は T^*/K^* との同型を通じて L^*/K^* の部分半群となるが、 T は PID なので L^*/K^* は P/I の正の全極小元の集合 Λ' を底とする自由加群と同型になる：

$$L^*/K^* \cong \mathbb{Z}(\Lambda')$$

次に加群の完全列

$$0 \rightarrow K^*/I \rightarrow L^*/I \rightarrow L^*/K^* \rightarrow 0$$

を考える。これは、今までに得られた同型によって

$$0 \rightarrow \mathbb{Z}(\Lambda) \rightarrow L^*/I \rightarrow \mathbb{Z}(\Lambda') \rightarrow 0$$

と書き直される。しかし、 $\mathbb{Z}(\Lambda')$ は自由加群なので同型

$$L^*/I \cong \mathbb{Z}(\Lambda \cup \Lambda') = \mathbb{Z}(\Lambda) \oplus \mathbb{Z}(\Lambda')$$

が得られる。右辺は $\Lambda \cup \Lambda'$ を底とする自由加群である。また、 $\Lambda \cup \Lambda'$ は半群 S^*/I の中の正の全極小元集合と解釈することができる。

これで S が UFD であることが証明された。実際 L は S の商体であり、 S の全可逆元の群は R のそれと一致する。多項式環 $S = R[X]$ の可逆元の次数は 0 でなければならないからである。この証明の仮定は R が UFD であることのみであったので、次の定理が得られる：

主定理 : UFD 上の一変数多項式環は UFD である。

これでこの小論の目的は完全に果たされた。

参考文献

- 1) S. Arimoto, M. Spivakovsky, K.F. Taylor, and P.G. Mezey, Proof of the Fukui conjecture via resolution of singularities and related methods. I, J. Math. Chem. 37 (2005) 75.
- 2) S. Arimoto, M. Spivakovsky, K.F. Taylor, and P.G. Mezey, Proof of the Fukui conjecture via resolution of singularities and related methods. II, J. Math. Chem. 37 (2005) 171.
- 3) S. Arimoto, Proof of the Fukui conjecture via resolution of singularities and related methods. III, J. Math. Chem. 47 (2010) 856.
- 4) S. Arimoto, M. Spivakovsky, K.F. Taylor, and P.G. Mezey, Proof of the Fukui conjecture via resolution of singularities and related methods. IV, J. Math. Chem. 48 (2010) 776.
- 5) S. Arimoto, M. Spivakovsky, E. Yoshida, K.F. Taylor, and P.G. Mezey, Proof of the Fukui conjecture via resolution of singularities and related methods. V, J. Math. Chem. 49 (2011) 1700.