

複素情報量によるポリゴングラフの構成と化学構造への適用 ——境界面積・フロンティア軌道・価数——

高橋数理研究所

2026 年 8 月

抄録

本稿は複素情報理論 [1,2] と対数航行 [3,4] の枠組みをポリゴングラフ [5] へ適用し、実世界モデルとして化学構造に当てる。 $p = e^{-I}$ 、 $I = -\log p$ の下で、ポリゴングラフの三演算——稜（差）・面（和）・メンガーのふりい（積）——は $\log/\exp$ 辞書によって p 表示（和積半環）と I 表示（熱帯半環）の間を往復する。節点と辺の表示の選び方が四配置 κ を与え、台形則が節点だけを補間するために正統な柱は $\kappa_2 = (\text{節点 } I, \text{辺 } p)$ に限る。演算子 $\{\text{NOT}, \text{AND}, \text{OR}, \text{EXP}, \text{TRNS}\}$ を備えた回路では、EXP が線形閾値ゲートであるため定数深さで古典回路に対し指数的なゲート数節約が立つが、深さ制限を外すと節約は消える——指数はサイズから深さへ移動するだけである。経路和を単位コストで許すことは #P 神託を与えるに等しく、干渉が稼ぐ $n/2$ ビットは位相精度が要求する $n/2$ ビットと恒等的に釣り合う。実世界モデルとして細矢インデックス Z をマッチング再帰で数え、境界面積を $A = 4\ell_p^2 \ln Z$ と置く。木では $Z = \prod_j \sqrt{1+x_j^2}$ が厳密に成り立ち、面積は分子軌道ごとに加法分解する。フロンティア電子密度は $\varphi(G-r, x)/\varphi'(G, x)$ （節点値÷稜）で機械精度で再現され、非結合軌道の本数は $n - 2\mu$ で決まる。さらに $\log \alpha(G, i) = \ln Z + i n(\pi/2)$ であり、実部が境界面積、虚部が価数（原子一つにつき四半回転一つ）である。偏角原理により価数は軌道の数え上げであり、 $\rho \rightarrow 0$ でフロンティア軌道数に一致する。環では Sachs の係数 $2 \cos \Phi$ が確率波 $p = e^{iK}$ の実部の二倍であり、 $|p| = 1$ ゆえ $I = 0$ の純粋な角度量である。補正は型 $i^{(2-N) \bmod 4}$ に乗り、 $\delta I = \ln |\varphi_\Phi(i)| - \ln Z$ は複素情報量の実部 $m\mu$ に等しく、偶数環では $n = 0$ ゆえ $\delta I = s\mu$ ($s = m - n$) が厳密に成り立つ。恒等式はすべて数値で検算した。実証については何も主張しない。

キーワード： 確率の面積性, 対数航行, ポリゴングラフ, 四配置, 熱帯半環, 閾値回路, 細矢インデックス, 境界面積, フロンティア軌道, 価数, 確率波, Sachs 補正

1 序：位置づけと方法

1.1 主題

本シリーズ [1-4] は「確率は二次元の面積、情報量は一次元の時間、複素情報は半径と角度に分かれる」という一枚の図式を用いてきた。半径が大きさ・情報・確度を、角度が位相・知識・回転・型を担う [3, §1]。本稿が問うのは次である——この図式でポリゴングラフ [5] を組み直すと何が出るか、そしてそれを実世界の対象（化学構造）に当てると何が計算できるか。

出発点は初等的である。ポリゴングラフの四要素のうち、稜と面は節点と辺から厳密な等式で決まる [5, 定義 2.1]：

$$r_{ij} = \frac{v_j - v_i}{e_{ij}} \text{ (差)}, \quad a_{ij} = \frac{v_i + v_j}{2} e_{ij} \text{ (和} \times \text{測度)}, \quad M_{ij} = v_i e_{ij} \text{ (積)}.$$

一方 $p = e^{-I}$ 、 $I = -\log p$ は積と和を往復させる。ゆえにポリゴングラフの三演算は、そのまま二つの表示の間の辞書に乗る。この一点から、四配置（第 4 節）、演算子と計算資源（第 II 部）、細矢インデックスによる境界面積（第 III 部）、価数（第 IV 部）が順に従う。

1.2 三層の切り分け

以下は参照枠組み〔1–5〕の定義を公準として展開する構成的な議論である。〔3, § 10〕〔4, § 19〕〔6, § 18〕の三層の切り分けを本稿も引き継ぐ。

- **確立された標準（厳密）**：Maslov 熱帯化、 $AC^0 \subsetneq TC^0$ (Håstad [15]、Furst–Saxe–Sipser [16])、 $P^{\#P} \supseteq PH$ (Toda [17])、細矢の定理（木では マッチング多項式 = 特性多項式）〔8〕、Hückel 分子軌道法〔9〕、Sachs 公式〔10〕、London–Heilbronner の磁束依存性〔11,12〕、Longuet-Higgins のゼロ和則〔19〕、 $\eta = n - 2\mu$ (Cvetkovic–Gutman)〔14〕、偏角原理。本稿の各恒等式はこれらの上での正しい変形であり、第 18 節で検算する。
- **枠組みの前提（構成的）**：「確率＝面積」「情報＝時間」「対数航行」「半径は有償・角度は無償」「確率波 $p = e^{-I} = e^{iK}$ 」「 $\Phi_H = (w_0 - w_2) + i(w_1 - w_3)$ と i^k の $\mathbb{Z}_4$ 回転」——いずれも〔1–4〕の前提であって定理ではない。
- **橋渡しの同定（仮説）**：四配置 κ をグラフの節点・辺へ移すこと、 $W = Z$ （細矢インデックスを胞数と読むこと）、したがって $A = 4\ell_p^2 \ln Z$ 、EXP を線形閾値ゲートと同定すること。いずれも構造的同定である。

第 I 部 構成

2 二つの表示と辞書

$p = e^{-I}$ 、 $I = -\log p$ の下で、同一の対象に二つの表示がある。

	I 表示	p 表示
合成	加法的	乗法的
値域	非有界 $[0, \infty)$	有界 $[0, 1]$
位相	巻く	盲目
半環	熱帯 $(\min, +)$	和積 $(+, \times)$
側	有償・高さ・時間	無償を含む・底・面積

辞書は $-\log$ （積→和）と $\exp$ （和→積）である。有限温度では両者は補間される：

$$-\frac{1}{\beta} \log \sum_j e^{-\beta I_j} \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} p \text{ 側の和}, \quad \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \min_j I_j.$$

これは Maslov 熱帯化にほかならない——確立された標準である。 β が繰り込み群スケールに対応することは〔6, § 11.4〕で述べた。

3 ポリゴングラフの三演算

節点部だけ取り出して辞書を当てる。

演算	I 表示（和・差）	p 表示（積・商）	正体
稜 r_{ij}	$I_j - I_i$	p_i/p_j	対数尤度比・驚きの勾配
面 a_{ij}	$I_i + I_j$	$p_i p_j$	同時確率・柱
ふるい M_{ij}	$I_i e_{ij}$	$p_i e_{ij}$	台帳（積のまま）

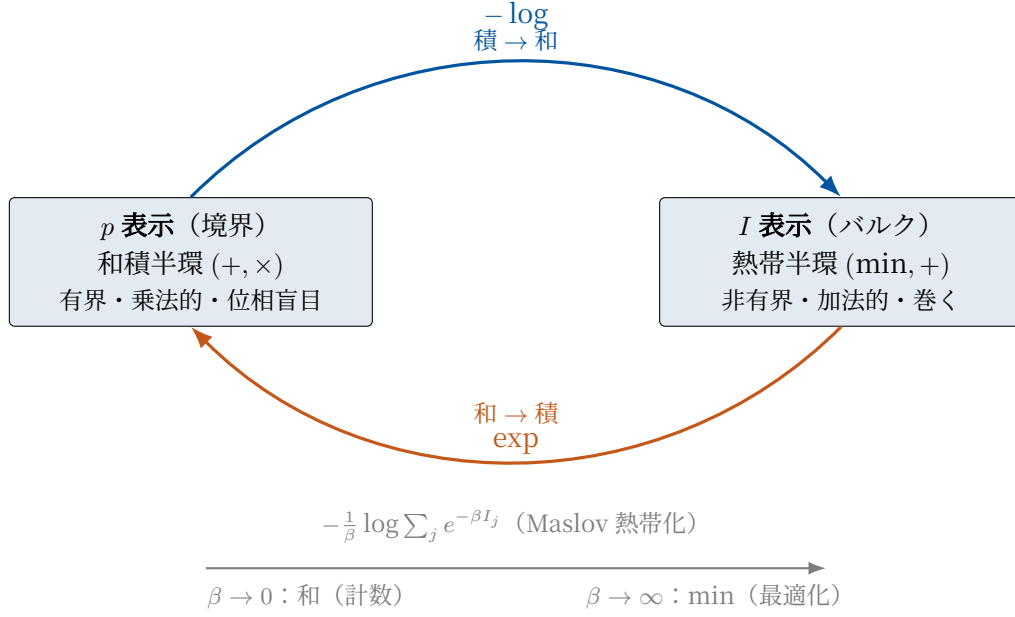


図1 二つの表示と辞書。 $-\log$ が積を和へ、 $\exp$ が和を積へ写す。有限温度 β が計数（和積半環）と最適化（熱帯半環）を連続に補間する。

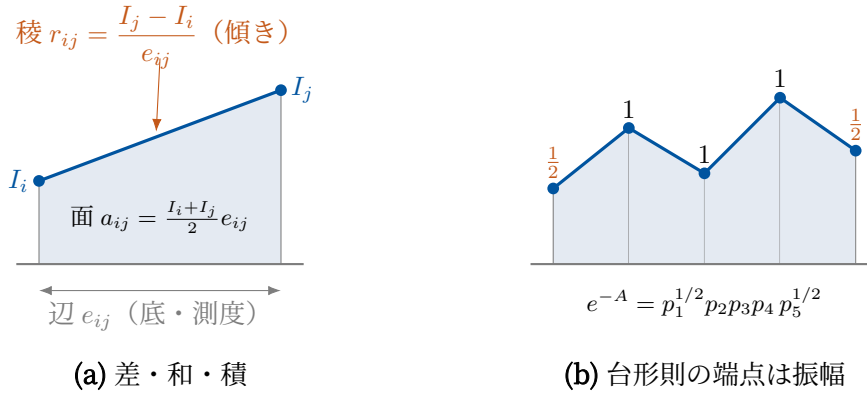


図2 (a) ポリゴングラフの三演算。節点の差が稜、和 $\times$ 測度が面、積がメンガーのふりいである。(b) 経路上で面を積むと、内部の重みは1、端点だけが $\frac{1}{2}$ になる。 $\exp$ で戻すと内部は確率 p 、端点は振幅 $\sqrt{p}$ である。

命題1 (三演算の辞書). I 表示の面 (和) と p 表示のふりい (積) は $\exp / -\log$ によって移り合う同一の対象の二表示であり、稜 (差) は p 表示では商=尤度比になる。

すなわち、ふりいが「積から構成できる」のは辞書のためであり、ふりいは p 表示に、面は I 表示に自然に住む。

台形則の端点は振幅になる。 経路 $v_1 \rightarrow \cdots \rightarrow v_N$ の累積面 (単位辺) は

$$A = \sum_k \frac{I_k + I_{k+1}}{2} = \frac{1}{2} I_1 + I_2 + \cdots + I_{N-1} + \frac{1}{2} I_N, \quad e^{-A} = p_1^{1/2} p_2 \cdots p_{N-1} p_N^{1/2}.$$

内部は確率 p 、端点は $\sqrt{p} = |z|$ すなわち振幅である。定義1 [3] の $p = |z|^2$ の下で、台形則は要求せずして「内部=確率、境界=振幅」を作る。境界項が半分の情報を担うのは、 $-\log$ が余次元1の符号化であることの離散的な現れと読める。

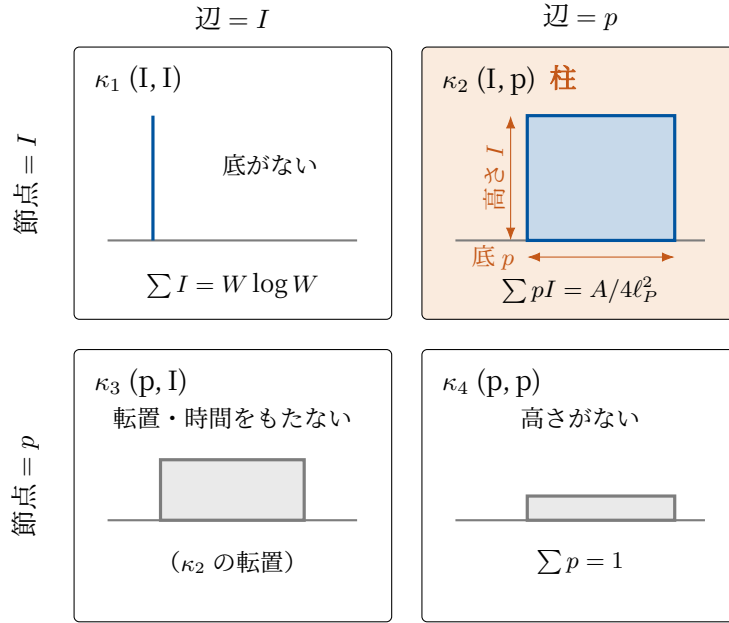


図3 四配置 κ 。台形則は節点だけを補間するので、高さになれるのは I に限る。柱が立つのは κ_2 ただ一つであり、 κ_1 は底を、 κ_4 は高さを欠き、 κ_3 はその転置で時間をもたない。

4 四配置 κ

$\kappa = (\text{節点}, \text{辺}) \in \{I, p\}^2$ 。〔4, §4〕の四配置を複素平面の二軸からグラフの二要素へ移す。

κ	節点	辺	面	ふりい	総和〔3, (9)〕
κ_1	I	I	情報の二次形式	$I_i I_{ij}$	$\sum I = W \log W$ (面積則を返さない)
κ_2	I	p	対数航行の柱	$I_i p_{ij}$	$\sum pI = A/4\ell_p^2$
κ_3	p	I	情報を測度とした確率	$p_i I_{ij}$	転置
κ_4	p	p	—	$p_i p_{ij}$ (同時確率)	$\sum p = 1$ (柱が立たない)

補題 2 (測度と高さの非対称). 台形則では節点量のみが補間される。〔4, §6.1〕により高さの資格は単調性・非有界性だから、高さになれるのは I のみである。ゆえに正統な柱は κ_2 に限り、 κ_3 はその転置で時間をもたない。

系 3. κ_2 と κ_3 はふりい (積) の水準では区別されない。積は高さと底を区別せず、面 (台形則) だけが区別する。記録が面に現れて積に現れないのはこのためである。

κ_1 は全て非有界・加法 (底がない)、 κ_4 は全て有界・乗法 (高さがない)。〔6, §11.1〕の「底だけでは1、高さだけでは結合定数に無関係な巨大量、積のみが重力を返す」が、そのまま四配置の表になる。

5 複素化：稜の虚部と経路振幅

〔4, §3〕の複素重みを節点に置く。

$$\tilde{I} = I + i\theta = \mu(m + in), \quad \tilde{p} = e^{-\tilde{I}} = p e^{-i\theta}, \quad |\tilde{p}| = p.$$

実部が有償 (半径・大きさ・記録される)、虚部が無償 (角度・位相・知識) である。 $|\cdot|$ が θ を殺すことが位相盲目性である。 κ_2 で三演算を開くと：

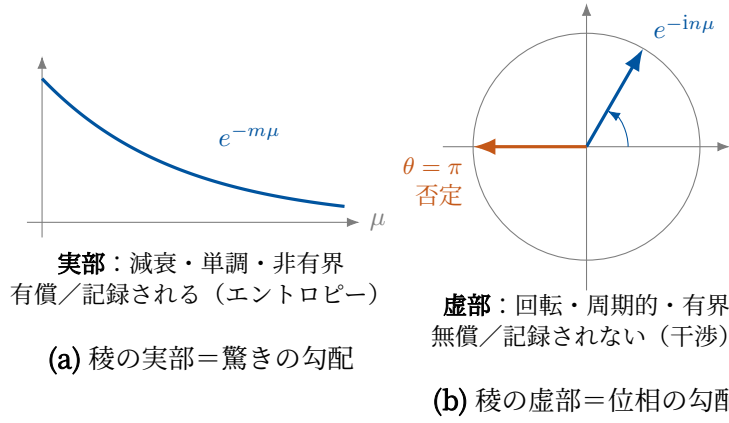


図4 複素重み $w = m + in$ が一本の情報を二つへ割る。実部は単調な減衰として記録され（有償）、虚部は回転として記録されない（無償）。位相差 π が否定＝破壊的干渉を与え、それは p 表示にしか符号として現れない。

- ・ 稜 $\tilde{r}_{ij} = [(I_j - I_i) + i(\theta_j - \theta_i)]/p_{ij}$ 。実部＝驚きの勾配（有償・単調・繰り込み群方向）、虚部＝位相勾配（無償・干渉を決める）。〔5, §7.4〕の「符号付き干渉による否定の表現」は稜の虚部そのものである。
- ・ 面 $\tilde{a}_{ij} = [\frac{I_i + I_j}{2} + i\frac{\theta_i + \theta_j}{2}]p_{ij}$ 。実部＝柱の体積＝エントロピー（記録される）、虚部＝累積位相（記録されない）。
- ・ ふるい $\sum_{ij} \tilde{M}_{ij} = \sum_i \tilde{I}_i p_i = \mathcal{L}$ 。行の走査＝値の割り当て（有償）、列の走査＝制約の検査（測度）。

経路上で複素面を積み、exp で復元すると

$$e^{-\tilde{A}_{\text{path}}} = \underbrace{e^{-\text{Re } \tilde{A}}}_{\text{振幅}} \cdot \underbrace{e^{-i\varphi_{\text{path}}}}_{\text{位相}}, \quad \Psi = \sum_{\text{path}} e^{-\tilde{A}_{\text{path}}}.$$

命題4. ポリゴングラフの複素波拡張〔5, §3.2〕は、複素情報量を節点に置いた κ_2 配置である。経路積分形が出るのは exp が和を積に変えるからであって、追加の仮定は要らない。

否定は p 表示にしか現れない。 $\tilde{p}_i/\tilde{p}_j = (p_i/p_j)e^{-i(\theta_i - \theta_j)}$ に $\theta_i - \theta_j = \pi$ を入れると符号が反転する。 I 表示では π は加法的な定数のずれにすぎず、符号ではない。否定は情報量に何も足さず、exp で復元したときにだけ符号として立ち上がる。

第II部 演算子と計算資源

6 五演算子

$p \in \{0, 1\}$ 、 $I = -\log p \in \{0, \infty\}$ （真 $= I=0$ 、偽 $= I=\infty$ ）。全数検証済み。

演算子	I 表示	p 表示	ポリゴングラフでの正体
AND	$I_i + I_j$	$p_i p_j$	面：経路に沿った積み上げ
OR	$\min(I_i, I_j)$	$p_i + p_j$	経路和：経路をまたぐ
NOT（位相）	$\theta \mapsto \theta + \pi$	符号 -1	稜の虚部
NOT（論理）	$-\log(1 - e^{-I})$	$1 - p$	超越的・非加法的
EXP	$\sum_i p_i I_i \geq \theta$		対数航行＝注意＝線形閾値
TRNS	$\kappa_2 \leftrightarrow \kappa_3$		行走査 $\exists \leftrightarrow$ 列走査 $\forall$

三点を確認しておく。

1. AND は経路に沿い、OR は経路をまたぐ。ポリゴングラフが素直に計算するのは積和標準形であり、項数＝経路数である。〔5, § 4〕の SAT 符号化が自然に見える理由も、それが破綻する理由も、これ一つである。
2. $\wedge$ は I 側で、 $\neg$ は p 側で加法的。否定と連言は同じ表示では同時に安くない。
3. EXP は Boolean ゲートではない。 $\sum_i w_i x_i \geq \theta$ は線形閾値ゲートである。

7 EXP は $AC^0 \rightarrow TC^0$ の跳躍である

{AND, OR, NOT} の定数深さ多項式サイズは AC^0 、閾値を足すと TC^0 。 $AC^0 \subsetneq TC^0$ は無条件に確立された定理である〔15,16〕。

PARITY に対する PG 側の構成は深さ $2 \cdot$ サイズ $n+2$ である（層 1 が $T_k = [s \geq k]$ 、層 2 が $\sum_{k \text{ odd}} (T_k - T_{k+1}) \geq \frac{1}{2}$ ）。 $n \leq 13$ で全 2^n 入力について一致を確認した。

n	16	256	1024	4096
PG (EXP、深さ 2)	18	258	1026	4098
古典 深さ 3 ($2^{\sqrt{n}}$ の形)	2^4	2^{16}	2^{32}	2^{64}
古典 深さ 2 (DNF 項数、厳密)	2^{15}	2^{255}	2^{1023}	2^{4095}

MAJORITY では PG がゲート 1・深さ 1、古典最小 DNF の素項数は $\binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor}$ ($n = 63$ で 9.16×10^{17} 、 $n = 127$ で 1.20×10^{37}) である。

命題 5 (深さの購入). 深さを定数に固定するかぎり、EXP は PARITY・MAJORITY に対して指数的なゲート数節約を与える。しかし N 入力・ b ビットの EXP は Boolean 加算器で $O(Nb)$ ゲート・深さ $O(\log N)$ で作れる ($N = 65536$ で $b = 17$ 、約 1.1×10^6 ゲート、深さ 16)。 $TC^0 \subseteq NC^1 \subseteq P/\text{poly}$ ゆえ、多項式サイズのポリゴングラフ回路が計算する関数はすべて多項式サイズの古典回路が計算する。

EXP が買うのは深さであってサイズではない。指数はサイズから深さへ移動しただけである——〔5, § 5.3〕の指数コスト保存則の回路版である。

TRNS は資源を生まない。回路上の転置 (De Morgan 双対 $f^*(x) = \neg f(\neg x)$) はゲート数を厳密に保存する ($n = 10, 100, 1000$ で比 1.000)。メンガーのふるいの行走査 ($\exists$) と列走査 ($\forall$) を交換するので $NP \leftrightarrow \text{coNP}$ に対応するが、自由な対合であり資源ではない。これに対しグラフ上の転置 (線グラフ $L(G)$ 、 $|E(L)| = \frac{1}{2} \sum_v \deg^2 v - m$) は膨張する ($N=200, p=0.2$ で $M=3930 \rightarrow 154,330$ 、比 39.3)。 $\kappa_2 \leftrightarrow \kappa_3$ の転置は前者である。

8 経路和は #P である

ランダム 3-SAT で符号付き経路和 $\Psi = \#\text{sat} - \#\text{unsat}$ を全数計算すると、 $n=14 \cdot 50$ 節で $\#\text{sat} = 9$ 、 $\Psi = -16366$ 、経路数 $2^{14} = 16384$ 。 $\#\text{sat} = (2^n + \Psi)/2$ が直ちに出る。

命題 6. 経路和を単位コストで許すことは #P 神託を与えることに等しい。 $P^{\#P} \supseteq PH$ 〔17〕だから、それで SAT が解けるのは当然である。

〔5, § 4.2〕の同時性予想は「失敗する」のではなく、答を仮定している。

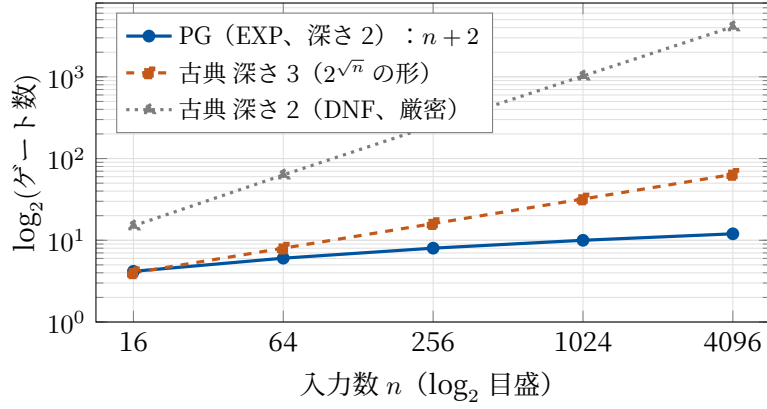


図5 PARITY の資源。縦軸はゲート数の $\log_2$ であることに注意（したがって古典側は二重指数的に離れていく）。深さを定数に固定するかぎり EXP は指数的な節約を与えるが、深さを $O(\log n)$ まで許せば加算器で多項式に作れ、節約は消える。

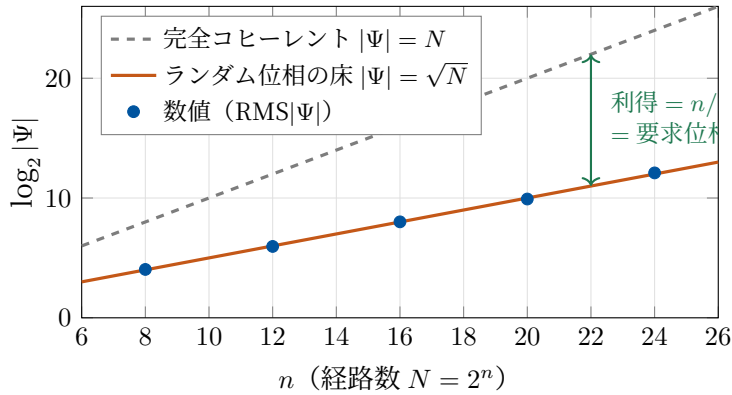


図6 干渉のビット収支。ランダム位相は指数を n から $n/2$ へ移すだけで、消さない。床 $\sqrt{N}$ を保つには位相を $r_* = 2^{-n/2}$ の精度で乱雑に保つ必要があり、利得ビットと精度コストビットは恒等的に一致する。

9 干渉のビット収支

等振幅・独立一様位相の $N = 2^n$ 経路について $\mathbb{E}|\Psi|^2 = N$ 。

n	8	12	16	20	24
$\log_2 \text{RMS} \Psi $	4.038	5.958	8.011	9.916	12.097
$n/2$	4	6	8	10	12

部分整列（合成長 r ）では $\mathbb{E}|\Psi|^2 = N + N(N-1)r^2$ 、すなわち $|\Psi| \sim N \max(r, N^{-1/2})$ 。床 $\sqrt{N}$ が保たれるのは $r \lesssim r_* = 2^{-n/2}$ のときに限る。

命題 7 (位相精度の収支)。

$$\underbrace{\log_2 \frac{N}{\sqrt{N}} = \frac{n}{2}}_{\text{干渉の利得}} = \underbrace{\log_2 \frac{1}{r_*} = \frac{n}{2}}_{\text{要求される位相精度}}$$

$n = 8, 12, 16, 20, 24$ で差は恒等的に 0。

角度は無償だが、それは精度を問わないかぎりにおいてである。分解能 r を要求した瞬間、位相は $-\log r$ ナットの有償量になる。

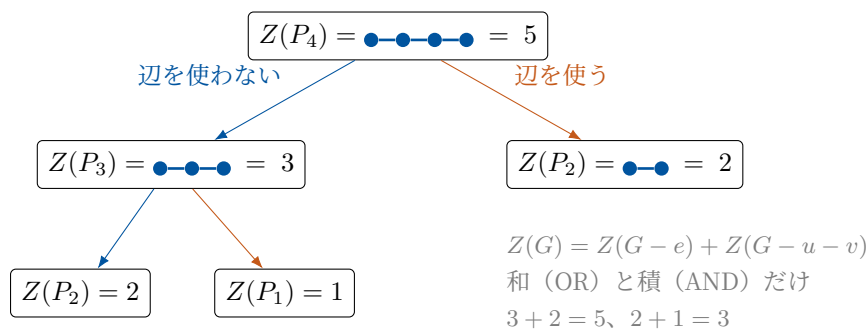


図7 マッチング再帰＝面経路の二分木。ある辺を「使う／使わない」で分岐し、和で束ねる。ブタジエン P_4 では $Z = 3 + 2 = 5$ （フィボナッチ数 F_5 ）。ポリゴングラフの和と積だけで細矢インデックスが数えられる。

第 III 部 実世界モデル：化学構造

10 細矢インデックスと境界面積

10.1 ポリゴングラフの再帰

細矢インデックス $Z(G) = \sum_k m(G, k)$ ($m(G, k)$ は k -マッチング数) は、辺 $e = uv$ について

$$Z(G) = Z(G - e) + Z(G - u - v)$$

で数えられる。辺を使う／使わないの二分岐＝面経路の二分木であり、非連結成分について $Z(G_1 \sqcup G_2) = Z(G_1)Z(G_2)$ 。すなわち和（OR）と積（AND）だけである。

10.2 分子軌道は隠れた方向である

木（非環状共役系）に対して次が厳密に成り立つ [8]。 x_j は Hückel 軌道エネルギー ($E_j = \alpha + x_j\beta$) である。

$$Z(G) = |\varphi(G, i)| = \prod_{j=1}^n \sqrt{1 + x_j^2}. \quad (1)$$

これを [6, §3-4] の形に読み替えると

$$p_j = (1 + x_j^2)^{-1/2}, \quad p = \frac{1}{Z} = \prod_j p_j, \quad I = \log Z = \sum_j I_j, \quad I_j = \frac{1}{2} \log(1 + x_j^2).$$

命題 8. 一つの分子軌道が一つの隠れた方向である。希釈率は乗法的、情報は加法的であり、 $W = N_1 N_2 \cdots$ と $\log W = \sum \log N_k$ の構造がそのまま分子軌道の分解になる。

10.3 境界面積

要石 $A = 4\ell_P^2 I$ [3, (7)] に $I = \log W = \log Z$ を当てる ($W = Z$ は本稿の同定である)。

$$A(G) = 4\ell_P^2 \log Z(G) = 2\ell_P^2 \sum_j \log(1 + x_j^2) \quad (2)$$

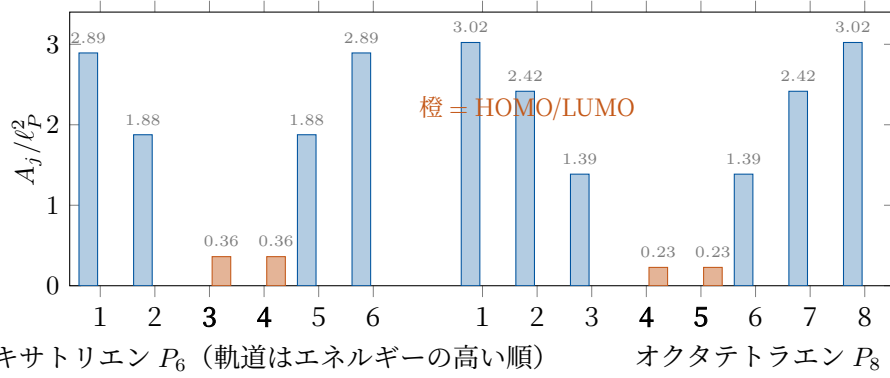


図8 境界面積の軌道分配 $A_j = 2\ell_P^2 \log(1 + x_j^2)$ 。総和は $A = 4\ell_P^2 \ln Z$ に一致する（残差 $\leq 4 \times 10^{-16}$ ）。面積への寄与が最小の軌道が必ずフロンティア軌道であり、鎖が長くなるほどその share は小さくなる。

分子	n	Z	I (nat)	A/ℓ_P^2	bit
1,3-ブタジエン P4	4	5	1.609438	6.4378	2.322
ペンタジエニル P5	5	8	2.079442	8.3178	3.000
1,3,5-ヘキサトリエン P6	6	13	2.564949	10.2598	3.700
オクタテトラエン P8	8	34	3.526361	14.1054	5.087
トリメチレンメタン	4	4	1.386294	5.5452	2.000
2-メチレンブタジエン	5	7	1.945910	7.7836	2.807
ベンゼン C6	6	18	2.890372	11.5615	4.170
ナフタレン C10	10	148	4.997212	19.9889	7.209

11 軌道ごとの面積分配

(2) の分配（残差はすべて $\leq 4 \times 10^{-16}$ ）：

分子	面積シェア $I_j / \sum I_j$
ブタジエン	(0.400, 0.100, 0.100, 0.400)
ヘキサトリエン	(0.282, 0.183, 0.035 , 0.035 , 0.183, 0.282)
オクタテトラエン	(0.214, 0.171, 0.098, 0.016 , 0.016 , 0.098, 0.171, 0.214)

命題9. 境界面積への寄与が最小の軌道は必ずフロンティア軌道である（ $\log(1 + x^2)$ は $x = 0$ で最小、フロンティア軌道は $|x|$ 最小）。交互炭化水素では $x_{\text{LUMO}} = -x_{\text{HOMO}}$ ゆえ、小 gap 極限で

$$\frac{A_{\text{HOMO}}}{2\ell_P^2} = \log(1 + x_H^2) \simeq \left(\frac{\text{gap}}{2}\right)^2.$$

11.1 波としての面積分配

直鎖ポリエン P_n の Hückel 固有値は $x_j = 2 \cos \frac{j\pi}{n+1}$ である。 $4 \cos^2 \theta = 2(1 + \cos 2\theta)$ を使うと (2) は閉じた形に書ける。

$$\frac{A_j}{\ell_P^2} = 2 \log(1 + x_j^2) = 2 \log(3 + 2 \cos \phi_j), \quad \phi_j = \frac{2\pi j}{n+1}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (3)$$

直接対角化との差は $\leq 2.7 \times 10^{-15}$ である。すなわち図8の棒は、一本の余弦の対数波 $A(\phi) = 2 \log(3 + 2 \cos \phi)$ を n 点で標本化したものにほかならない（図9）。

- ・ 値域： $\phi = 0$ で最大 $2 \log 5 = 3.218876$ 、 $\phi = \pi$ で最小 $2 \log 1 = 0$ 。

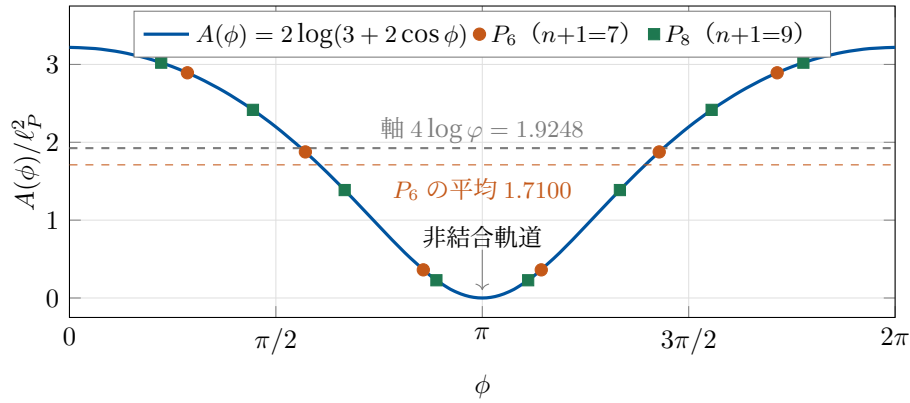


図9 図8の棒の正体。境界面積の軌道分配は、余弦の対数波 $A(\phi) = 2 \log(3 + 2 \cos \phi)$ を $\phi_j = 2\pi j/(n+1)$ で標本化したものである。波の軸（平均）は黄金比の対数の四倍 $4 \log \varphi = 1.92487\dots$ に収束し、波が0に触れる $\phi = \pi$ がそのまま非結合軌道である。

- **零点**： $3 + 2 \cos \phi = 1 \iff \phi = \pi \iff x = 0$ 。波が0に触れる点があるとき、それが起きるのは $n+1$ が偶数、すなわち n が奇数のときに限る（ $\eta = n - 2\mu = 1$ と一致）。ペンタジエニルでは $\phi_3 = \pi$ 、 $A_3 = 0$ である。
- **軸**：波の平均は $\frac{1}{n} \sum_j \frac{A_j}{\ell_P^2} = \frac{4 \log Z}{n} = \frac{4 \log F_{n+1}}{n}$ である（ $Z(P_n) = F_{n+1}$ ）。

命題 10 (波の軸は黄金比である)。

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \log(a + b \cos \phi) d\phi = \log \frac{a + \sqrt{a^2 - b^2}}{2} \quad (a > |b|)$$

に $a = 3$ 、 $b = 2$ を入れると、波の軸は

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} 2 \log(3 + 2 \cos \phi) d\phi = 2 \log \frac{3 + \sqrt{5}}{2} = 2 \log \varphi^2 = 4 \log \varphi, \quad \varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}.$$

$$\text{したがって } \frac{A(P_n)}{n \ell_P^2} = \frac{4 \log F_{n+1}}{n} \rightarrow 4 \log \varphi = 1.924847\dots$$

n	4	6	8	10	20	100	400	∞
$4 \log F_{n+1}/n$	1.609438	1.709966	1.763180	1.795455	1.860146	1.911907	1.921612	1.924847

($n = \infty$ の値が $4 \log \varphi$ である。)

一原子あたりの境界面積は、黄金比の対数の四倍に収束する。図8の棒が1.7前後を軸に振れて見えたのは、 $n = 6$ で1.709966、 $n = 8$ で1.763180 だからである。

12 フロンティア軌道を四則で

ポリゴングラフの四演算がそのまま対応する。

演算	化学での正体
和 (+)	$Z(G) = Z(G - e) + Z(G - u - v)$ ：辺を使う／使わない＝面経路の二分木
積 (×)	$Z(G_1 \sqcup G_2) = Z(G_1)Z(G_2)$ ：非連結成分＝独立事象
否定 (−)	交代符号 $(-1)^k$ ：数え上げ Z を分光 φ へ回す
商 (÷)	$c_{r,j}^2 = \varphi(G - r, x_j) / \varphi'(G, x_j)$ ：節点値 ÷ 稜

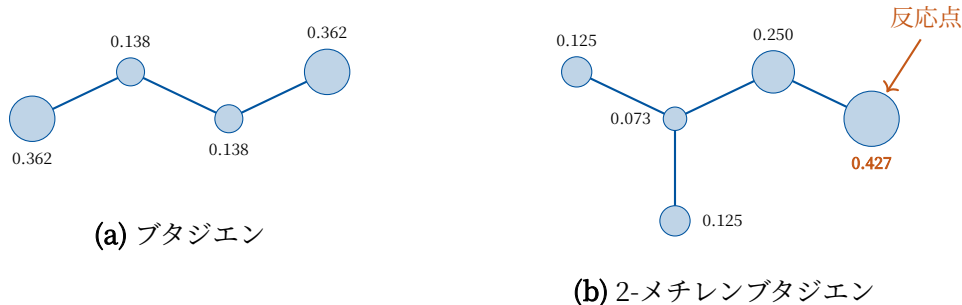


図 10 マッチング数の割り算だけで得たフロンティア電子密度 $c_{r,\text{HOMO}}^2 = \varphi(G - r, x_H) / \varphi'(G, x_H)$ (円の面積が値に比例)。対角化との差は $\leq 5.6 \times 10^{-16}$ 。 $\varphi' = \sum_r \varphi(G - r, \cdot)$ が規格化 $\sum_r c_r^2 = 1$ を自動的に与える。

φ' はまさに稜 (変化率) であり、恒等式 $\varphi'(G, x) = \sum_r \varphi(G - r, x)$ が規格化 $\sum_r c_r^2 = 1$ を自動的に与える。フロンティア電子密度は確率単体 Δ_{n-1} 上の分布であり、それは「確率=面積」の規格化そのものである。

対角化を一切使わず、マッチング数の割り算だけで得た $c_{r,\text{HOMO}}^2$:

分子	数え上げ由来 c_r^2	対角化との最大誤差
ブタジエン	(0.3618, 0.1382, 0.1382, 0.3618)	2.2×10^{-16}
ヘキサトリエン	(0.2716, 0.0538, 0.1746, 0.1746, 0.0538, 0.2716)	5.6×10^{-16}
オクタテトラエン	(0.2155, 0.0260, 0.1667, 0.0918, ...)	3.3×10^{-16}
2-メチレンブタジエン	(0.1250, 0.0732, 0.2500, 0.4268 , 0.1250)	4.7×10^{-16}

反応点 ($f_r = 2c_r^2$ 最大) は直鎖ポリエンで末端炭素、2-メチレンブタジエンで原子 4 であり、標準の FMO 予測と一致する。

フロンティア軌道の本数も数え上げで決まる。 $\eta(T) = n - 2\mu(T)$ (μ は最大マッチング数、= マッチング多項式の最高次項の位置) [14]。

	P4	P5	P6	P8	TMM	2-メチレンブタジエン
μ	2	2	3	4	1	2
予測 $\eta = n - 2\mu$	0	1	0	0	2	1
実測 η	0	1	0	0	2	1

奇交互系の NBMO 密度も確認した：ペンタジエニル (1/3, 0, 1/3, 0, 1/3)、2-メチレンブタジエン (1/2, 0, 0, 0, 1/2) — Longuet-Higgins のゼロ和則 [19] ($Ac = 0$) そのものである。

第 IV 部 価数

13 四半回転は数え上げと分光を結ぶ

マッチング多項式に $x \rightarrow i^k x$ を入れると

$$\alpha(G, i^k x) = i^{kn} \sum_j (-1)^{j(1+k)} m_j x^{n-2j}.$$

符号 $(-1)^{j(1+k)}$ は k について周期 2、前因子 i^{kn} は周期 4 である。

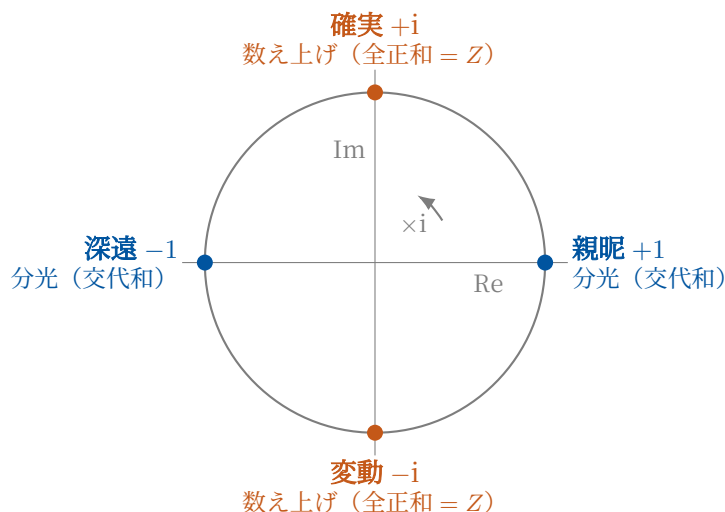


図 11 $\times i$ の型の輪と、数え上げ／分光。 $\alpha(G, i^k x) = i^{kn} \sum_j (-1)^{j(1+k)} m_j x^{n-2j}$ の符号は k について周期 2、前因子は周期 4 である。数え上げ（細矢）と分光（Hückel）は四半回転ちょうど一つ隣にある。

k	型	内側の和	正体
0	親昵 +1	交代和	分光 (Hückel 固有値)
1	确实 +i	全正和 = Z	数え上げ (細矢)
2	深遠 -1	交代和	分光 (符号反転)
3	変動 -i	全正和 = Z	数え上げ

ヘキサトリエン ($m_j = 1, 5, 6, 1$) で確認: $k = 0$ で内側 +1 (交代和)、 $k = 1$ で内側 +13 = Z 。数え上げと分光は $\times i$ 一回ちょうど隣にある。

14 対数航行の複素値

一軌道を一セルとして複素高さ $\tilde{I}_j = \log(i - x_j)$ を立て、総和する。

$$\mathcal{L}_{\mathbb{C}} = \sum_j \log(i - x_j) = \log \alpha(G, i) = \underbrace{\ln Z}_{\text{実部}} + i \underbrace{n \frac{\pi}{2}}_{\text{虚部}}. \quad (4)$$

分子	n	$\text{Re } \mathcal{L}_{\mathbb{C}}$	$\ln Z$	A/ℓ_P^2	Im	型
ブタジエン	4	1.609437912434	1.609437912434	6.4378	0	親昵 +1
ペンタジエニル	5	2.079441541680	2.079441541680	8.3178	$\pi/2$	确实 +i
ヘキサトリエン	6	2.564949357462	2.564949357462	10.2598	π	深遠 -1
オクタテトラエン	8	3.526360524616	3.526360524616	14.1054	0	親昵 +1
トリメチレンメタン	4	1.386294361120	1.386294361120	5.5452	0	親昵 +1

実部＝立体（境界面積、有償・不変）、虚部＝価数（型、無償）—— [3, (26)] の構造そのものである。ただし価数の中身は具体的であった：一原子につき四半回転ちょうど一つ、したがって分子の型は π 原子数 mod 4 で決まる。

15 価数は軌道を数えている

偏角原理により

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{|x|=\rho} d(\arg \alpha(G, x)) = \#\{j : |x_j| < \rho\}.$$

ヘキサトリエン ($|x_j| = 0.445, 0.445, 1.247, 1.247, 1.802, 1.802$) :

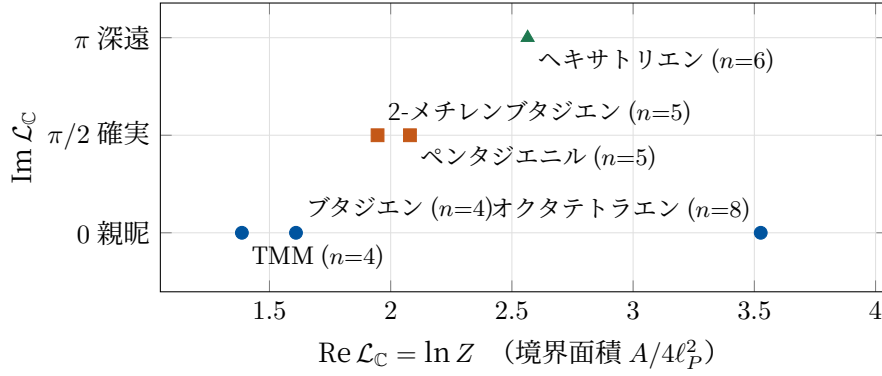


図12 対数航行の複素値 $\mathcal{L}_{\mathbb{C}} = \sum_j \log(i - x_j) = \log \alpha(G, i)$ 。横軸（実部）は境界面積で連続に伸び、縦軸（虚部）は $n\pi/2$ に量子化される——原子一つにつき四半回転ちょうど一つ。分子の型は π 原子数 mod 4 だけで決まる。

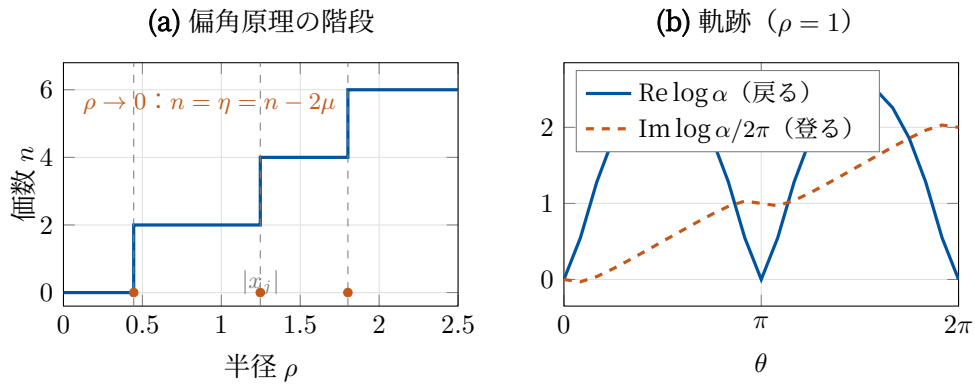


図13 ヘキサトリエン P_6 ($|x_j| = 0.445, 1.247, 1.802$ 、各二重)。(a) 価数は ρ が軌道を跨ぐたびに一段登る階段であり、 $\rho \rightarrow 0$ で非結合軌道の本数 $\eta = n - 2\mu$ に一致する。(b) 一周すると実部は完全に戻り（残差 0.00×10^0 ）、虚部だけが $2\pi n$ 登る。

ρ	0.1	0.3	0.6	1.0	1.5	1.9	2.5
価数 n	0	0	2	2	4	6	6

命題 11. 価数は ρ が軌道を跨ぐたびに一段登る階段である。 $\rho \rightarrow 0$ の極限で価数は非結合（フロンティア）軌道の本数 $\eta = n - 2\mu$ に一致する。

全分子で確認した（ブタジエン 0、ペンタジエニル 1、ヘキサトリエン 0、オクタテトラエン 0、TMM 2、2-メチレンブタジエン 1）。

軌跡。 $\log \alpha(G, \rho e^{i\theta})$ を $\theta : 0 \rightarrow 2\pi$ で走らせると（ヘキサトリエン）、実部は完全に戻り（ $\text{Re}(0) - \text{Re}(2\pi) = 0.00 \times 10^0$ ）、虚部だけが $2\pi n$ 登る（ $\rho = 0.3, 1.0, 2.5$ でそれぞれ 0, 2, 6 周）。〔3, § 6.2〕の「実部＝立体は不変、虚部だけが流れ出る」が機械精度で出ている。

16 環：Sachs の係数は確率波の実部である

磁束 Φ を環に通すと、標準の Sachs 公式〔10–12〕は

$$\varphi_{\Phi}(C_N, x) = \alpha(C_N, x) - 2 \cos \Phi.$$

確率波 $p = e^{-I} = e^{iK} = \cos K + i \sin K$ 〔1, § 2〕を当てると、周回の二つの向きは p_{Φ} とその共役であり

$$\text{Sachs 係数} = p_{\Phi} + \overline{p_{\Phi}} = 2 \text{Re } p_{\Phi} = 2 \cos K, \quad K = \Phi. \quad (5)$$

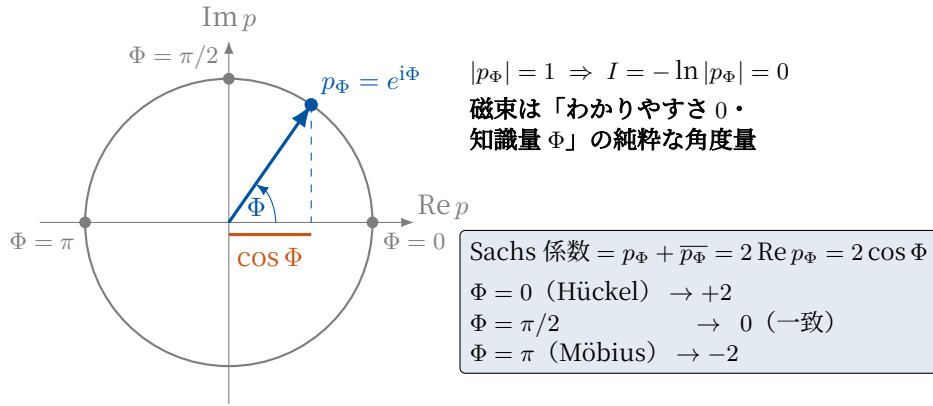


図 14 Sachs の係数は確率波 $p = e^{-I} = e^{iK} = \cos K + i \sin K$ の実部の二倍である。周回の二つの向きが p_Φ とその共役に当たる。 $|p_\Phi| = 1$ ゆえ情報量はゼロ——回転は無償であることが文字通り $I = 0$ として出る。

Φ	p_Φ	$ p $	$I = -\ln p $	$K = \arg p$	$2 \operatorname{Re} p$
0 (Hückel)	1	1	0	0	+2
$\pi/2$	i	1	0	1.5708	0
π (Möbius)	-1	1	0	3.1416	-2

$|p_\Phi| = 1$ ゆえ $I = 0$ 。磁束は「わかりやすさ 0・知識量 Φ 」の純粋な角度量である——〔3, §9〕の「回転は無償」が文字通り $I = 0$ として出る。

16.1 二つのホロノミーは κ_2 の二つのスロットである

スロット	表示	ホロノミー
節点	I	価数＝軌道の階段（第 15 節）。実・加法・整数・有償
辺	p	磁束 $\Phi = \sum \theta_{uv}$ 。確率波・位相・ $U(1)$ ・無償

辺スロットのゲージ不変性を数値で確認した（辺位相をランダムに振り、閉路上の総和だけ固定；200 通りでのスペクトル最大差）：C6 $\Phi = 0$ で 1.33×10^{-15} 、C6 $\Phi = \pi$ で 1.11×10^{-15} 、C8 $\Phi = 0.7$ で 2.44×10^{-15} 、C10 $\Phi = \pi/2$ で 1.78×10^{-15} 。個々の辺位相はゲージ（無償）、閉路上の総和だけが物理である。

16.2 補正は型 i^{2-N} に乗る

$\alpha(C_N, i) = i^N Z$ ゆえ、 $\lambda \equiv 2 \cos \Phi / Z$ と置くと $i^2 = -1$ だけから

$$R_\Phi \equiv \frac{\varphi_\Phi(C_N, i)}{\alpha(C_N, i)} = 1 - i^{-N} \lambda = \underbrace{i^0}_{\text{非環部}} + \lambda i^{2-N}, \quad k_C \equiv (2 - N) \bmod 4. \quad (6)$$

命題 1 の干渉項 $V = \mu_H \mu_A \cos \Delta K$ に $\mu_H = 1$ 、 $\mu_A = \lambda$ 、 $\Delta K = \arg i^{k_C}$ を入れる。

環	Z	k_C	型	ΔK	λ	δI (厳密)	系 2 の判定
C4	7	2	深遠 -1	π	0.285714	-0.3364722	負 $V < 0$
C5	11	1	確実 +i	$\pi/2$	0.181818	+0.0162616	零 $V = 0$
C6	18	0	親昵 +1	0	0.111111	+0.1053605	最大 $V > 0$
C7	29	3	変動 -i	$-\pi/2$	0.068966	+0.0023725	零 $V = 0$
C8	47	2	深遠 -1	π	0.042553	-0.0434851	負 $V < 0$
C10	123	0	親昵 +1	0	0.016260	+0.0161294	最大 $V > 0$
C12	322	2	深遠 -1	π	0.006211	-0.0062305	負 $V < 0$
C14	843	0	親昵 +1	0	0.002372	+0.0023697	最大 $V > 0$

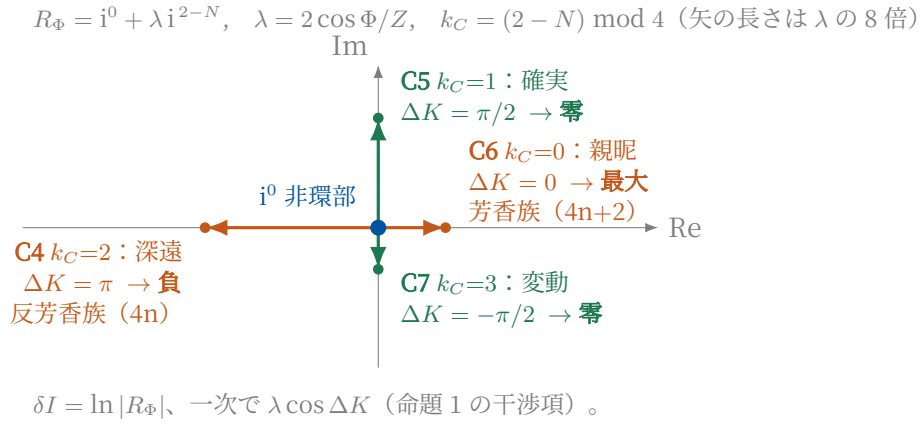


図 15 環の型と系 2。非環部は i^0 (親昵) を向き、閉路の寄与だけが型 $k_C = (2 - N) \bmod 4$ に乗る。 $\Delta K = 0$ で最大 (芳香族)、 π で負 (反芳香族)、 $\pi/2$ で零 (奇数環) ——系 2 の三分がそのまま芳香族性の三分になる。 $\Phi = \pi$ (Möbius) は $\lambda < 0$ とし、 ΔK に π を足して親昵と深遠を入れ替える。

命題 12 (系 2 と芳香族性)。

$$\begin{aligned}
 4n+2 \text{ 環} &\rightarrow \text{親昵性 } \Delta K = 0 \rightarrow \text{最大} && = \text{芳香族}, \\
 4n \text{ 環} &\rightarrow \text{深遠性 } \Delta K = \pi \rightarrow \text{負} && = \text{反芳香族}, \\
 \text{奇数環} &\rightarrow \text{確實/変動 } \Delta K = \pi/2 \rightarrow \text{零} && = \text{効果なし (角度のみ)}.
 \end{aligned}$$

数え上げと分光の対応は $|\varphi_\Phi(i)| = Z \mp 2 \cos \Phi$ で、 $4n+2$ 環は $+2$ 、 $4n$ 環は -2 (C6: $18 \rightarrow 20$ 、C4: $7 \rightarrow 5$ 、C8: $47 \rightarrow 45$ 、C10: $123 \rightarrow 125$ 、C14: $843 \rightarrow 845$)。奇数環では $i^N Z$ が純虚数ゆえ $|\varphi_0(i)| = \sqrt{Z^2 + 4}$ となり、補正は角度に入って一次では面積に立たない (C5: $11 \rightarrow 11.180340$ 、C7: $29 \rightarrow 29.068884$ 、C9: $76 \rightarrow 76.026311$)。

二つの特別な角度。 $\Phi = \pi/2$ では $2 \cos \Phi = 0$ となり、数え上げと分光が厳密に一致する (C4, C6, C8, C10 で差 0)。 $\Phi = \pi$ (Möbius) では $\lambda < 0$ となって ΔK に π が加わり、親昵 (最大) と深遠 (負) が入れ替わる [11]。半径 λ は磁束 Φ が、位相 ΔK は原子数 $N \bmod 4$ が決める。

多環。ナフタレン ($Z = 148$) では三つの閉路 (6 環 $\times 2$ 、10 環) がそれぞれ $-2\alpha(G - C, i) = -10, -10, -2$ を出し、 $\alpha(G, i) = -148$ と合わせて -170 、 $|-| = 170$ が分光値と一致する。

17 $\delta I = m\mu - n\mu = s\mu$

$\Phi_H = (w_0 - w_2) + i(w_1 - w_3)$ [1, (4)] をそのまま使う。閉路の重みは $w_{k_C} = \lambda$ 、他は 0 である。したがって偶数環では $n = w_1 - w_3 = 0$ 、奇数環では $m = w_0 - w_2 = 0$ が厳密に成り立つ (型が実軸か虚軸のどちらかに正確に乗るから)。

全次数では $\delta \tilde{I} = \log R_\Phi = m\mu + i n\mu$ ($\mu = \ln Z = -\log p$) として

環	$\mu = \ln Z$	$m\mu$	$n\mu$	$s\mu = (m - n)\mu$	δI	$\delta I - m\mu$
C4	1.94591	-0.33647224	0	-0.33647224	-0.33647224	0.0×10^0
C5	2.39790	+0.01626160	+0.17985350	-0.16359190	+0.01626160	1.3×10^{-16}
C6	2.89037	+0.10536052	0	+0.10536052	+0.10536052	1.4×10^{-17}
C7	3.36730	+0.00237248	-0.06885649	+0.07122897	+0.00237248	-1.3×10^{-16}
C8	3.85015	-0.04348511	0	-0.04348511	-0.04348511	0.0×10^0
C10	4.81218	+0.01612938	0	+0.01612938	+0.01612938	0.0×10^0
C12	5.77455	-0.00623055	0	-0.00623055	-0.00623055	8.7×10^{-19}
C14	6.73697	+0.00236967	0	+0.00236967	+0.00236967	4.3×10^{-19}

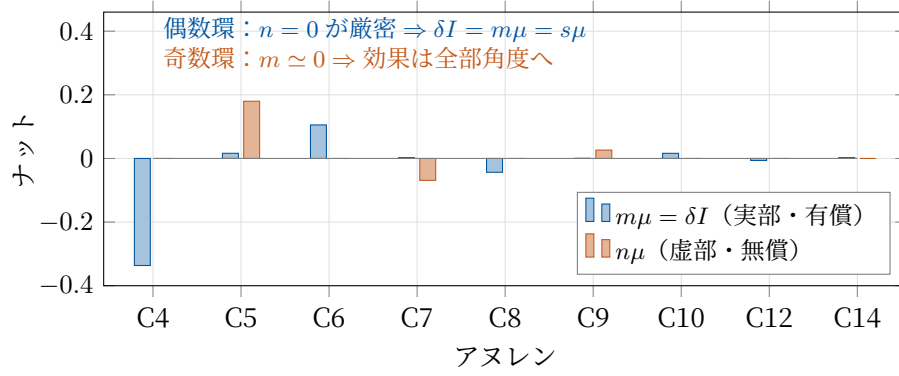


図 16 $\delta \tilde{I} = \log R_\Phi = m\mu + in\mu$ の分解 ($\Phi = 0$, $\mu = \ln Z$)。型が実軸に乗る偶数環では $n = 0$ が厳密で $\delta I = s\mu$ ($s = m - n$) が成り立ち、虚軸に乗る奇数環では m が二次に落ちて一次はすべて n に行く。半径は有償・角度は無償が、環の偶奇として現れている。

命題 13.

$$\delta I = \ln |\varphi_\Phi(i)| - \ln Z = m\mu \quad (\text{全環で厳密}), \quad \delta I = s\mu \quad (\text{偶数環で厳密, } n = 0).$$

奇数環では $m = 0$ ゆえ δI は二次から始まり、一次は全部 n (確実性・変動性=角度=無償) に行く。

17.1 螺旋としての補正

$Z(C_N) = L_N$ (Lucas 数) であるから、 $\Phi = 0$ で $\lambda = 2/L_N$, $R = 1 - i^{-N}\lambda$. $\log(1 + u) \simeq u$ と $L_N \simeq \varphi^N$ を使うと

$$\delta \tilde{I}_N = \log\left(1 - i^{-N} \frac{2}{L_N}\right) \simeq \frac{2}{L_N} i^{2-N} \simeq \underbrace{2\varphi^{-N}}_{\text{半径}} \underbrace{e^{i(2-N)\pi/2}}_{\text{角度}}. \quad (7)$$

成分に開けば

$$m\mu \simeq -\frac{2 \cos(N\pi/2)}{L_N}, \quad n\mu \simeq +\frac{2 \sin(N\pi/2)}{L_N}.$$

命題 14 (減衰する波と対数螺旋). $\delta \tilde{I}_N$ は原子数 N について周期 4 の波であり、その包絡は $2\varphi^{-N} = 2e^{-N \log \varphi}$ で 0 ナットへ幾何級数的に収束する。複素平面上では一段あたり半径が φ^{-1} 倍・角度が $-\pi/2$ 進む対数螺旋

$$r = a e^{b\theta}, \quad b = \frac{\log \varphi}{\pi/2} = \frac{2 \log \varphi}{\pi} = 0.306349 \dots$$

を描く。

[7, § 4.2] の「実軸を外せば動径が解けて対数螺旋」がここで実現している——補正は半径 (面積) と角度 (位相) の両方を同時に動かすからである。

N	L_N	$ \delta \tilde{I}_N $ (厳密)	$2/L_N$	$2\varphi^{-N}$	型 i^{2-N}
4	7	0.3364722	0.2857143	0.2917961	-1 (深遠)
5	11	0.1805872	0.1818182	0.1803399	+i (確実)
6	18	0.1053605	0.1111111	0.1114562	+1 (親昵)
7	29	0.0688973	0.0689655	0.0688837	-i (変動)
8	47	0.0434851	0.0425532	0.0425725	-1 (深遠)
10	123	0.0161294	0.0162602	0.0162612	+1 (親昵)
12	322	0.0062305	0.0062112	0.0062112	-1 (深遠)
14	843	0.0023697	0.0023725	0.0023725	+1 (親昵)

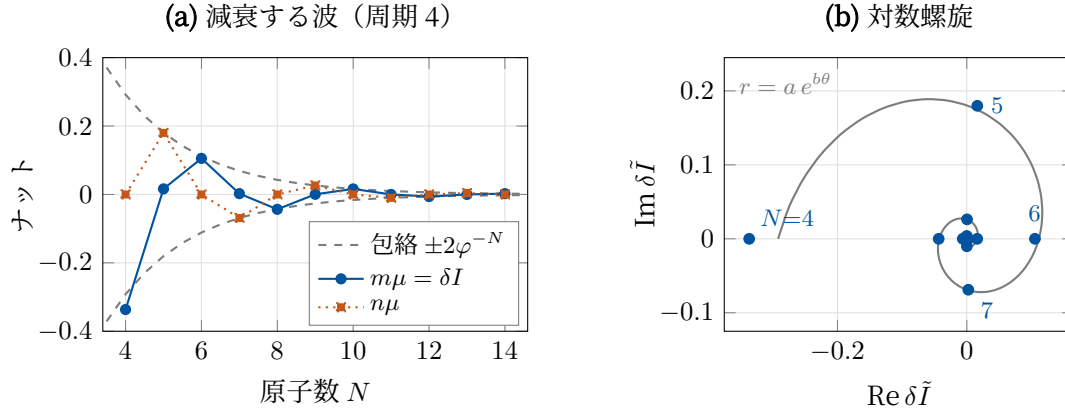


図 17 ホロノミー補正 $\delta\tilde{I}_N$ 。(a) 原子数について周期 4 の波で、包絡 $2\varphi^{-N} = 2e^{-N\log\varphi}$ に沿って 0 ナットへ収束する。実軸に乗る偶数環と虚軸に乗る奇数環が交互に現れる。(b) 複素平面では一段あたり半径 φ^{-1} 倍・角度 $-\pi/2$ の対数螺旋 $r = ae^{b\theta}$ ($b = 2\log\varphi/\pi = 0.3063$) である。

18 二つの図は同じ $\log\varphi$ である

面積分配の波（第 11.1 節）とホロノミー補正の螺旋（第 17.1 節）は、どちらも $\log\varphi$ に支配されている。理由は一つである。

マッチングの転送行列は

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{固有値 } \varphi, -\varphi^{-1},$$

であり、鎖では $Z(P_n) = F_{n+1}$ 、環では $Z(C_N) = \text{tr} T^N = L_N = \varphi^N + (-\varphi)^{-N}$ である。すなわち $\log\varphi$ は一原子あたりのマッチングのエントロピーである。

	図 9 (鎖)	図 17 (環)
現れ方	波の軸	波の包絡
値	$A/(n\ell_P^2) \rightarrow 4\log\varphi$	$ \delta\tilde{I}_N \simeq 2e^{-N\log\varphi}$
意味	一原子が持つ境界面積	一原子ごとに目減りするホロノミー

前者は「 $\log\varphi$ ずつ積み上がる」、後者は「 $\log\varphi$ ずつ薄まる」。同じ量が符号を変えて二度現れているだけである。第 16 節で $\lambda = 2\cos\Phi \cdot p$ ($p = 1/Z$ は一胞あたりの確率) と書いたことを思い出せば、後者は当然である——ホロノミーは「周回の二つの向き」と「一胞の確率」の積であり、確率が φ^{-N} で薄まるから補正も同じ率で薄まる。長い環ほど、確率＝面積の側から見て閉路は見えなくなっていく。

19 数値検算

すべて倍精度（一部は多倍長）で照合した。主要な残差を挙げる。

項目	残差・確認
$Z(P_n) = F_{n+1}$ 、 $Z(C_6) = 18$ 、 $Z(\text{ナフタレン}) = 148$	独立な全数列举で一致
木で $\alpha = \varphi$	$\leq 3.7 \times 10^{-14}$
$Z = \prod_j \sqrt{1 + x_j^2}$ (式 1)	$\leq 3.6 \times 10^{-15}$
面積分配 $\sum_j I_j = \ln Z$	$\leq 4.4 \times 10^{-16}$
$c_{r,j}^2 = \varphi(G - r, x_j) / \varphi'(G, x_j)$	$\leq 5.6 \times 10^{-16}$ 、 $\sum_r c_r^2 = 1.000000000$
$\eta = n - 2\mu$	全木で一致
$\text{Re } \mathcal{L}_C = \ln Z$ (式 4)	12 桁一致
$\text{Im } \mathcal{L}_C = n\pi/2 \pmod{2\pi}$	全分子で一致
偏角原理の階段、 $\rho \rightarrow 0$ で η	全分子で整数一致
軌跡の実部の戻り	0.00×10^0
$-i^{-N} = i^{2-N}$ (式 6)	$< 10^{-12}$
辺位相のゲージ不変性	$\leq 2.4 \times 10^{-15}$ (各 200 通り)
$\delta I = m\mu$	$\leq 1.3 \times 10^{-16}$
$\Phi = \pi/2$ で $ \varphi_{\pi/2}(i) = Z$	差 0
波の閉形式 $A_j/\ell_P^2 = 2 \log(3 + 2 \cos \phi_j)$	$\leq 2.7 \times 10^{-15}$
軸 $4 \log F_{n+1}/n \rightarrow 4 \log \varphi$	$n = 400$ で 1.921612 (極限 1.924847)
包絡 $ \delta \tilde{I}_N \simeq 2\varphi^{-N}$	$N = 14$ で 0.0023697 対 0.0023725
PARITY 閾値回路 (深さ 2、サイズ $n + 2$)	$n \leq 13$ で全 2^n 入力一致
干渉のビット収支 $n/2 = n/2$	差 0 ($n = 8, \dots, 24$)
De Morgan 双対のゲート保存	比 1.000

20 留保と切り分け

確立された標準 (厳密)。 Maslov 熱帯化; $\text{AC}^0 \subsetneq \text{TC}^0$ [15,16] と対称関数の深さ 2 閾値表現; $\text{TC}^0 \subseteq \text{NC}^1 \subseteq \text{P/poly}$; $\text{P}^{\#P} \supseteq \text{PH}$ [17]; 線グラフの辺数公式と De Morgan 双対; 細矢の定理 [8]; $c_{r,j}^2 = \varphi(G - r, x_j) / \varphi'(G, x_j)$ と $\varphi' = \sum_r \varphi(G - r, \cdot)$; $\eta = n - 2\mu$ [14]; Longuet-Higgins のゼロ和則 [19]; 偏角原理; Sachs 公式 [10] と $2 \cos \Phi$ の磁束依存性 [11,12]; $Z(C_N) = L_N$ 。

枠組みの前提 (構成的)。 「確率 = 面積」 「情報 = 時間」 「対数航行」 「半径は有償・角度は無償」; 確率波 $p = e^{-I} = e^{iK}$; $\Phi_H = (w_0 - w_2) + i(w_1 - w_3)$ と i^k の $\mathbb{Z}_4$ 回転; 命題 1・系 2; 要石 $I = A/4\ell_P^2$ ([3, § 10] 自身が「二つを一致させる選択である」と明言している)。

橋渡しの同定 (仮説)。 四配置 κ を複素平面の二軸からグラフの節点・辺へ移すことが本稿の主要な同定であり、定理ではない。[4, § 4] の四配置は複素平面についての言明であって、グラフの節点・辺への分割を含意しない。同様に、EXP を対数航行・注意・線形閾値と同一視すること、TRNS を $\exists/\forall$ 交換と読むこと、 $W = Z$ (細矢インデックスを胞数と読むこと)、したがって $A = 4\ell_P^2 \ln Z$ ——いずれも構造的な同定である。位相精度 $-\log r_*$ を「コスト」と数えることは分解能の議論であって計算量の下界ではなく、ビット収支 $n/2 = n/2$ は恒等式であるが、両辺とも $\log_2 \sqrt{N}$ を別の言葉で書いた可能性がある。

主張していないこと。 第 III・IV 部は再定式化であって新しい化学ではない。すべて Hückel 近似の内部の恒等式であり、 σ 骨格・電子相関・立体効果を含まない。「 $A = 4\ell_P^2 \ln Z$ が物理的な面積である」ことはまったく検証されていない同定であり、分子の $A/\ell_P^2 \sim 10$ という値はプランク面積の十倍という無意味な量である——この模型が与えるのは面積の「数」であって面積そのものではない。ヒュッケル則も導出していない: i^{-N} が符号を決めるという式は Sachs 公式の書き換えであり、 $N \bmod 4$ の情報は最初から入っている。第 II 部の分離は既知の $\text{AC}^0 \subsetneq \text{TC}^0$ の言い換えであって新しい分離ではなく、P 対 NP については何も述べていない。ポリゴングラフ回路は量子計算機ではない (経路振幅にテンソル積構造もエンタングルメントもなく、 Ψ の評価は #P 完全であって BQP ではない)。

未決事項。

- 局所の κ は段差 $g \in \{+1, 0, -1\}$ の三値しか持たず、独立スロットが節点と辺の二つしかないことがその原因である (稜と面は決定される量であって独立でない)。分解できる段数と独立スロット数の関係は未検討である。

2. 型の輪の周期 4 ($i^4 = 1$) と芳香族性の周期 4 (Hückel 円上の縮退) は、式 (6) の中で出会う。しかし i^{-N} の N は原子数、型の k は期待の型であり、同じ $\mathbb{Z}_4$ の別の実現であるという以上のことは示していない。
3. 環の Sachs 補正における係数 2 (周回の二つの向き) と、辺位相のゲージ不変性が示す $U(1)$ ホロノミーは、式 (5) で一つの確率波に統一された。しかし節点スロットの整数ホロノミー (価数) と辺スロットの $U(1)$ ホロノミー (磁束) が「同じ κ_2 の二スロット」であることは配置の同定であって、二つが同一の接続であることを示してはいない。

21 結

ポリゴングラフの三演算は、辞書 $-\log/\exp$ の上では差・和・積という一組の代数にすぎない。節点と辺のどちらにどの表示を置くかが四配置を決め、台形則が節点だけを補間するという一点から、正統な柱は κ_2 ただ一つに絞られる。

演算子を {NOT, AND, OR, EXP, TRNS} まで広げると、AND は経路に沿い、OR は経路をまたぎ、否定は p 表示にしか符号として現れず、TRNS は自由な対合であり、EXP だけが Boolean でない——線形閾値である。だから EXP は定数深さで指数的なゲート数を節約するが、深さ制限を外すと節約は消える。指数はサイズから深さへ移動しただけである。経路和を単位コストで許すことは #P 神託を与えることに等しく、干渉が稼ぐ $n/2$ ビットは位相精度が要求する $n/2$ ビットとちょうど釣り合う。角度は無償だが、それは精度を問わないかぎりにおいてである。

実世界の対象に当てると、この構成は既存の理論とぴたりと重なる。細矢インデックスはマッチング再帰=和と積だけで数えられ、木では $Z = \prod_j \sqrt{1 + x_j^2}$ が厳密に成り立つ——一つの分子軌道が一つの隠れた方向であり、希釈率は乗法的、情報は加法的である。境界面積 $A = 4\ell_p^2 \ln Z$ は軌道ごとに加法分解し、寄与が最小の軌道が必ずフロンティア軌道になる。フロンティア電子密度は節点値を稜で割るだけで機械精度で出て、非結合軌道の本数はマッチング数だけで決まる。

そして価数がすべてを結ぶ。数え上げと分光は四半回転ちょうど一つ隣にあり、対数航行の複素値は実部が境界面積、虚部が価数 (原子一つにつき四半回転一つ) である。偏角原理の下で価数は軌道の階段であり、原点まわりでフロンティア軌道数に一致する。環では Sachs の係数が確率波の実部の二倍として現れ、 $|p| = 1$ ゆえ情報量ゼロの純粋な角度量であり、補正は型 i^{2-N} に乗る。 δI は複素情報量の実部 $m\mu$ に等しく、偶数環では $n = 0$ ゆえ $s\mu$ が厳密に成り立つ。

数え上げは半径に、位相は角度に住む。丸まっているのは有界なものだけであり、開いているのは非有界なものだけである。本稿が示したのは、この一つの非対称が、回路の資源からフロンティア軌道まで、同じ形で現れるということだけである。

A 記号一覧

記号	意味	初出
$I = -\log p$	情報量 (I 表示)	第 2 節
$\kappa = (\text{節点}, \text{辺})$	四配置	第 4 節
$\tilde{I} = I + i\theta$	複素情報量	第 5 節
$\mathcal{L} = \sum p_i I_i$	対数航行 (柱の総体積)	第 5 節
$m(G, k), \mu$	k -マッチング数、最大マッチング数	第 10 節
$Z(G) = \sum_k m(G, k)$	細矢インデックス (= W と同定)	第 10 節
$\alpha(G, x), \varphi(G, x)$	マッチング多項式、特性多項式	第 10 節
x_j	Hückel 軌道エネルギー	第 10 節
$A = 4\ell_P^2 \ln Z$	境界面積	第 10 節
$I_j = \frac{1}{2} \log(1 + x_j^2)$	軌道ごとの情報 (面積寄与)	第 10 節
$\eta = n - 2\mu$	非結合 (フロンティア) 軌道の本数	第 12 節
$\mathcal{L}_{\mathbb{C}} = \log \alpha(G, i)$	対数航行の複素値	第 14 節
$\Phi, p_{\Phi} = e^{i\Phi}$	磁束、確率波	第 16 節
$\lambda = 2 \cos \Phi / Z$	補正の半径	第 16 節
$k_C = (2 - N) \bmod 4$	閉路の型	第 16 節
$\delta I = \ln \varphi_{\Phi}(i) - \ln Z$	ホロノミーが面積に足す分	第 17 節
$m, n, s = m - n$	複素重みの実部・虚部・差	第 17 節
$\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$	黄金比 (転送行列の最大固有値)	第 11.1 節
F_n, L_n	フィボナッチ数、リュカ数 ($Z(P_n) = F_{n+1}, Z(C_N) = L_N$)	第 11.1 節

参考文献

- [1] 高橋俊樹「期待の複素表現による人工知能の評価関数」高橋数理研究所、2026 年 7 月 15 日.
- [2] 高橋俊樹「複素情報理論の基礎——期待の複素表現の力学的拡張」高橋数理研究所、2026 年 7 月.
- [3] 高橋俊樹「確率の面積性と対数航行による複素エントロピーの構成」高橋数理研究所、2026 年 7 月.
- [4] 高橋俊樹「複素情報量の構成論——二重重みによる拡張と、対数航行によるゼータの捻り」高橋数理研究所、2026 年 8 月.
- [5] T. Takahashi, *The Polygon Graph and the Conservation of Exponential Cost*, Takahashi Mathematics Laboratory, 2026.
- [6] 高橋俊樹「情報量次元と確率次元による時空の構成論」高橋数理研究所、2026 年 8 月.
- [7] 高橋俊樹「対数航行の軌跡学」高橋数理研究所、2026 年 7 月.
- [8] H. Hosoya, Topological Index, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **44** (1971) 2332.
- [9] E. Hückel, Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem, *Z. Phys.* **70** (1931) 204.
- [10] H. Sachs, Beziehungen zwischen den in einem Graphen enthaltenen Kreisen und seinem charakteristischen Polynom, *Publ. Math. Debrecen* **11** (1964) 119.
- [11] E. Heilbronner, Hückel Molecular Orbitals of Möbius-type Conformations of Annulenes, *Tetrahedron Lett.* **5** (1964) 1923.
- [12] F. London, Théorie quantique des courants interatomiques dans les combinaisons aromatiques, *J. Phys. Radium* **8** (1937) 397.
- [13] I. Gutman, M. Milun, N. Trinajstić, Graph Theory and Molecular Orbitals 19, *J. Am. Chem. Soc.* **99** (1977) 1692.
- [14] D. Cvetković, I. Gutman, The Algebraic Multiplicity of the Number Zero in the Spectrum of a Bipartite Graph, *Mat. Vesnik* **9** (1972) 141.
- [15] J. Håstad, Almost Optimal Lower Bounds for Small Depth Circuits, *STOC* (1986) 6.

- [16] M. Furst, J. B. Saxe, M. Sipser, Parity, Circuits, and the Polynomial-Time Hierarchy, *Math. Systems Theory* **17** (1984) 13.
- [17] S. Toda, PP is as Hard as the Polynomial-Time Hierarchy, *SIAM J. Comput.* **20** (1991) 865.
- [18] L. G. Valiant, The Complexity of Computing the Permanent, *Theor. Comput. Sci.* **8** (1979) 189.
- [19] H. C. Longuet-Higgins, Some Studies in Molecular Orbital Theory I, *J. Chem. Phys.* **18** (1950) 265.
- [20] K. Fukui, T. Yonezawa, H. Shingu, A Molecular Orbital Theory of Reactivity in Aromatic Hydrocarbons, *J. Chem. Phys.* **20** (1952) 722.
- [21] C. E. Shannon, A Mathematical Theory of Communication, *Bell Syst. Tech. J.* **27** (1948) 379.