[研究新領域報導]

花樣生成問題

交通大學應用數學系 林松山

一、前言

1996 年中,我與交大同事莊重、石至文及 清大林文偉等教授帶研究生一齊研究細胞類神 經網路(Cellular Neural Network,CNN)的平衡態 問題時,碰到了花樣生成問題(Pattern Generation Problems)。

花樣生成問題在數學上是個很古老的問題,經常以 tiling (鋪磚)及 patterns (花樣,圖案)等名稱出現[4]。在日常生活裡,是要用幾種不同花樣的磁磚來鋪地板、牆壁或天花板。當然,拼出來的圖案要美觀、耐看、賞心悅目才好。

以下就以平面花樣生成問題來說明。考慮 (無窮) 平面分成大小相同的正方塊,這些方塊可以用 $\mathbb{Z}^2 = \{(m,n) | m,n \in \mathbb{Z}\}$ 表示(方塊的中心點 記爲(m,n)) 。接著再利用 p 種不同磁磚(或顏色),記爲 $S_p = \{1,2,...,p\}$,鋪滿 \mathbb{Z}^2 或其部分區域 R。這些磁磚在拼排時必須遵守某些規則 (B)。想問的問題是:根據這些拼圖規則(B),在 R 上能拼出什麼樣的花樣(patterns)來?先舉下面一個簡單的例子來說明:

例 1. 若只用黑白兩種顏色,亦即

$$S_2 = \{ [], [] \} = \{1, 2\}$$

拼圖的規則爲黑色不得(在水平及垂直)相鄰。

考慮 $\mathbb{Z}_{m\times n} = \{(i,j) | 1 \le i \le m, 1 \le j \le n\}$ 爲一 $m\times n$ 個格子的方形區域。則很容易看出在 $\mathbb{Z}_{2\times 1}$ 和 $\mathbb{Z}_{1\times 2}$ 可容許的花樣分別爲



較一般性的問題是:

問題 1.

- (i) 根據鋪排規則(**B**),所有在 $\mathbb{Z}_{m \times n}$ 可排出的花 樣 $\Sigma_{m \times n}$ (**B**)爲何?
- (ii) $\Sigma_{m \times n}(\mathbf{B})$ 的個數 $\Gamma_{m \times n}(\mathbf{B}) (= |\Sigma_{m \times n}|)$ 有多少?
- (iii)當m,n→∞時, $\Gamma_{m \times n}$ (**B**)如何增長?
- (iv)空間熵(spatial entropy)

$$h(\mathbf{B}) \equiv \lim_{m,n \to \infty} \frac{1}{mn} \log \Gamma_{m \times n} \tag{1.1}$$

爲何?

習慣上,若 h > 0,則 $\Gamma_{m \times n}(\mathbf{B})$ 呈指數成長,此時稱出現空間混沌(spatial chaos);否則,當 h = 0,則 $\Gamma_{m \times n}(\mathbf{B})$ 的成長要慢於指數成長,稱有花樣形成(patterns formation)。

回顧一維花樣生成問題,最重要的一個概念,就是引進生成規則(B)所決定的轉移矩陣(transition matrix 或 transfer matrix) T(= T(B))。

例 2. 考慮一維的情況,用黑白二色,但黑色不可相鄰。

若把 Z₂₄ 上所容許的花樣 H₁ 以矩陣表示:

其中,X 表示黑色與黑色不得相鄰。對應於(1.2),其轉移矩陣爲

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} , \tag{1.3}$$

其中,1表示可向右接,0表示不可向右接。

當維度爲一時,問題 1 可全由 T 來回答。例如:可以很容易驗證:對任意 n 個水平格子區域 $\mathbb{Z}_{n\times 1}$, $n\geq 2$, $\Sigma_{n\times 1}$ 的個數爲

$$\Gamma_{n\times 1} = |\mathsf{T}^{n-1}|,\tag{1.4}$$

其中 $|\mathbf{A}| = \sum_{i,j=1}^{k} a_{ij}$ 爲 $k \times k$ 矩陣 $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ 的範數。由 (1.4)及 Perron-Frobenius 定理可求出

$$h = \log g, \tag{1.5}$$

 $g = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ 為黃金比例;即為方程式 $x^2 - x - 1 = 0$ 的最大根,也是(1.3)裡 **T** 的最大固有値。

由一維的啓發,在研究二維問題時,去尋找 轉移矩陣,就成爲花樣生成問題的首要課題;也 是我們研究群主要的目標之一。

記得 98 年的某一天,在每週例行討論會中,莊老師說他的博士生謝世峰君,發現一個高階轉移矩陣可由低階矩陣推導的方法:把前一階所生成的花樣當作新的顏色,用來建構此階的轉移矩陣;如此就可以得到遞迴公式,並可解決一些特定問題[5]。

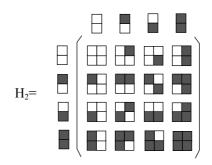
問題是新顏色的個數經常是指數成長(在空間混沌就是如此),且每次都要重新排列,在實際應用時,效果會受到一些限制。因此,能否找到更簡單的方法,就變成重要課題。過了蠻長一段時間,沒有太多進展。直到 2000 年有一天,我的一位博士生班榮超君來跟我說他的家教學生,時唸建中高一的戴淯淙同學,想以二維花樣生成問題當作科展題目。榮超已經把二維花樣生成問題讓淯淙去拼圖。淯淙沒唸過線性代數,但拼出一些花樣生成的規則來,這些規則竟然出現tensor product 和 Hadamard product。淯淙以此成果參加 90 年度的全國高中科展,獲得第一名,並到加拿大參加國際科展;題目是:二維細胞神經網路之個數解研究。

我回想以前我的一位博士生楊智烜君在用電腦計算由 L 形去拼花樣的個數時,電腦儲存的是花樣而不是轉移矩陣[6]。以例 2 來說明,電腦是紀錄(1.2)的 \mathbf{H}_1 而不是(1.3)的 \mathbf{T} 。因此,榮超

與我決定把世峰所發現的轉移矩陣遞迴公式結合志烜及淯琮的花樣生成規則,往前推究花樣生成的遞迴公式。最後,在 Z_{m×n} 花樣生成及轉移矩陣的簡潔公式就出現了。

二、花樣的有序矩陣

爲簡單起見,考慮只用黑白二色,且基本格子區域(fundamental lattice domain) R 爲 $\mathbb{Z}_{2\times 2}$ 。則用黑白二色排在 $\mathbb{Z}_{2\times 2}$ 的花樣集合 $\Sigma_{2\times 2}$ 總共有 2^4 =16 種。 $\Sigma_{2\times 2}$ 的花樣依水平($\mathbb{Z}_{2\times 2} = \mathbb{Z}_{1\times 2} \oplus \mathbb{Z}_{1\times 2}$) 及垂直($\mathbb{Z}_{2\times 2} = \mathbb{Z}_{2\times 1} \oplus \mathbb{Z}_{2\times 1}$)方向可排成下列兩種方式:



$$= \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} \\ h_{311} & h_{32} & h_{33} & h_{34} \\ h_{41} & h_{42} & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix}$$
(2.1)

以及

$$=\begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & v_{13} & v_{14} \\ v_{21} & v_{22} & v_{23} & v_{24} \\ v_{311} & v_{32} & v_{33} & v_{34} \\ v_{41} & v_{42} & v_{43} & v_{44} \end{bmatrix}$$
 (2.2)

比較(2.1)和(2.2)中的相同花樣,可發現

$$\mathbf{H}_{2} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & v_{21} & v_{22} \\ v_{13} & v_{14} & v_{23} & v_{24} \\ v_{31} & v_{32} & v_{41} & v_{42} \\ v_{33} & v_{34} & v_{43} & v_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{2;1} & H_{2;2} \\ H_{2;3} & H_{2;4} \end{bmatrix} \quad (2.3) \qquad \mathbf{A}_{2} = \mathbf{B}_{2} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

及

$$\mathbf{V}_{2} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{21} & h_{22} \\ h_{13} & h_{14} & h_{23} & h_{24} \\ h_{31} & h_{32} & h_{41} & h_{42} \\ h_{33} & h_{4} & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{2;1} & V_{2;2} \\ V_{2;3} & V_{2;4} \end{bmatrix}$$
(2.4)

 $(2.1)\sim(2.4)$ 表示, V_2 的第 k 列,即爲 H_2 的第 k 塊 $H_{2:k}$ 。換句話說, V_2 的第 k 列,以 Z 字形的方式, 折成一個 2×2 的花樣矩陣,放在 H_{2:k}的位置。若 以(2.3)中 v_{ii} 來表達,先以第一足碼i=1,2,3,4以 Z字形切成四塊,而 $H_{2:i}$ 中,再以 v_{ii} 第二足碼 i=1,2,3,4 折成 Z 字形的 2×2 方陣。由此可進一步 推論出, S_2 在 $\mathbb{Z}_{2\times n}$ 的所有花樣 $\Sigma_{2\times n}$ 所排出 n 階有 序花樣矩陣(ordering matrix) H_n 有下列遞迴公 式:

$$H_{n} = \begin{bmatrix} v_{11}H_{n-1;1} & v_{12}H_{n-1;2} & v_{21}H_{n-1;1} & v_{22}H_{n-1;2} \\ v_{13}H_{n-1;3} & v_{14}H_{n-1;4} & v_{23}H_{n-1;3} & v_{24}H_{n-1;4} \\ v_{31}H_{n-1;1} & v_{32}H_{n-1;2} & v_{41}H_{n-1;1} & v_{42}H_{n-1;2} \\ v_{33}H_{n-1;3} & v_{34}H_{n-1;4} & v_{43}H_{n-1;3} & v_{44}H_{n-1;4} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} H_{n;1} & H_{n;2} \\ H_{n;3} & H_{n;4} \end{bmatrix}$$
 (2.5)

同理, $\mathbb{Z}_{n \times 2}$ 的 n 階花樣矩陣 \mathbf{V}_n 也有類似的遞迴 公式。

當給定拼圖規則(\mathbf{B})後,可唯一決定 \mathbf{A}_2 。所 對應的 n 階水平轉移矩陣 \mathbf{A}_n 及垂直轉移矩陣 \mathbf{B}_n 也有相同公式[1]。作法簡述如下:把(2.1)的 H_2 改成 \mathbf{A}_2 , h_{ii} 寫成 a_{ii} , (2.2)的 \mathbf{V}_2 改成 \mathbf{B}_2 , v_{ii} 寫成 b_{ij} 。此時 a_{ij} 及 b_{ij} 不是 0 就是 $1 \circ \mathbf{A}_2 \times \mathbf{B}_2$ 及 \mathbf{A}_n 的 公式就如同(2.3)~(2.5)。

以例 1 來說明 n 階轉移矩陣 A_n 及 B_n 的遞迴 生成方式:可容易證

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
 (2.6)

當 $n \ge 2$, 若令

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} A_{n;1} & A_{n;2} \\ A_{n;3} & A_{n;4} \end{bmatrix}$$

則

$$\mathbf{A}_{n+1} = \begin{bmatrix} A_{n;1} & A_{n;2} & A_{n;1} & 0 \\ A_{n;3} & 0 & A_{n;3} & 0 \\ A_{n;1} & A_{n;2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
 (2.7)

至於空間熵 $h = h(A_2)$ 的計算,可利用 Perron-Frobenius 定理獲得:

$$h = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \log \left| \mathbf{A}_n^{m-1} \right| \tag{2.8}$$

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \left(\lim_{n \to \infty} \frac{\log \left| \mathbf{A}_n^{m-1} \right|}{n} \right) \tag{2.9}$$

$$=\lim_{n\to\infty}\frac{\log\rho(\mathbf{A}_n)}{n}\tag{2.10}$$

$$(=\lim_{n\to\infty}\frac{\log\rho(\mathbf{B}_n)}{n}), \qquad (2.11)$$

在此, $\rho(\mathbf{A}_n)$ 爲 \mathbf{A}_n 的最大固有值;而 An 爲 $2^n \times 2^n$ 的矩陣。

一般而言,用電腦硬算,n可跑到15 左右。 在一些特別的情況,可以找到 $\rho(A_n)$ 的遞迴公 式,且

$$\rho_* = \lim_{n \to \infty} \rho(\mathbf{A}_n)^{\frac{1}{n}} \tag{2.12}$$

是某多項式的最大根[1]。

因此,很自然地要問:

問題 2.

- (i) 是否有 $\rho(\mathbf{A}_n)$ 對 n 的遞迴公式?
- (ii) 是否有 ρ_* 的極限方程式?若有,則此方程式 爲多項式抑或級數?換句話說, ρ_* 是代數數 或是超越數?

除了上述較深的基本數學問題外,也可以先 問:

問題 3. 給定 A_2 ,如何判斷 $h(A_2)$ 是否為正?

A₂ 總共有 2¹⁶ 種可能性,要全面回答問題 3, 是個具挑戰性的問題。這問題就由新來的博士生 林吟衡小姐來主答[2]。

三、聯繫算子及足跡算子

由拼圖的次和性(subadditive)可證明

$$h = \inf_{n \ge 2} \frac{\log \rho(\mathbf{A}_n)}{n} \left(= \inf_{n \ge 2} \frac{\log \rho(\mathbf{B}_n)}{n}\right) \quad \circ \tag{3.1}$$

所以, $\frac{1}{n}\log \rho(\mathbf{A}_n)$ 皆爲 h 的上界,但下界呢?

若想以公式(2.10)去判斷 h 是否為正是當相棘手的問題。一般而言,很難估出 $\rho(\mathbf{A}_n)$ 的下界來。後來我們發現,(2.8)中的雙極限,順序若調換一下,不經(2.9),會得到下面這個公式:

$$h = \lim_{m \to \infty} \frac{1}{m} \left(\lim_{m \to \infty} \frac{\log \left| \mathbf{A}_n^{m-1} \right|}{n} \right)$$
 (3.2)

問題是

$$\lim_{m \to \infty} \frac{\log \left| \mathbf{A}_n^{m-1} \right|}{n} \tag{3.3}$$

如何計算?其中基本問題是:若固定 $m \geq 2$, \mathbf{A}_n^{m-1} 對 n 的遞迴公式爲何?以花樣而論, \mathbf{H}_n^{m-1} 可看成 S_2 在 $\mathbb{Z}_{m \times n}$ 所有花樣 $\Sigma_{m \times n}$ 的一種有序排列的花樣 矩陣;而 \mathbf{A}_n^{m-1} 爲給定排列規則 \mathbf{A}_2 後,其對應的 在 $\mathbb{Z}_{m \times n}$ 所有可容許的花樣所造成的矩陣。

在 m=2 時,我們透過花樣矩陣 \mathbf{H}_n 對 n 的 遞迴公式(2.5)找到 \mathbf{A}_n 對 n 的遞迴公式。因此需要對 $m \geq 3$, $n \geq 2$ 把所有 S_2 在 $\mathbb{Z}_{m \times n}$ 的花樣 $\Sigma_{m \times n}$ 全部有序的排出來。但仔細看 \mathbf{A}_n^{m-1} 或 \mathbf{H}_n^{m-1} 就會發現,許多花樣都擠在一起;因而需要把 \mathbf{H}_n^{m-1} 擠在一起的花樣全拉開來。爲此,我們引進了聯繫算子(connecting operator) \mathbb{C}_m 。 \mathbb{C}_m 是把 $\Sigma_{m \times 2}$ 的所有花樣有序的排出來。對數字矩陣而言, \mathbb{C}_m 可表示成

$$\mathbb{C}_{m} = \begin{bmatrix}
C_{m;11} & C_{m;12} & C_{m;13} & C_{m;14} \\
C_{m;21} & C_{m;22} & C_{m;23} & C_{m;24} \\
C_{m;31} & C_{m;32} & C_{m;33} & C_{m;34} \\
C_{m;41} & C_{m;42} & C_{m;43} & C_{m;44}
\end{bmatrix}$$
(3.4)

$$=\begin{bmatrix} S_{m;11} & S_{m;12} & S_{m;13} & S_{m;14} \\ S_{m;21} & S_{m;22} & S_{m;23} & S_{m;24} \\ S_{m;31} & S_{m;32} & S_{m;33} & S_{m;34} \\ S_{m:41} & S_{m:42} & S_{m:43} & S_{m:44} \end{bmatrix}$$
(3.5)

其中

$$Cm; ij = \left(\begin{bmatrix} a_{i1} & a_{i2} \\ a_{i3} & a_{i4} \end{bmatrix}\right) \circ \left(\hat{\otimes} \begin{bmatrix} B_{2;1} & B_{2;2} \\ B_{2;3} & B_{2;4} \end{bmatrix}^{m-2}\right)_{2 \times 2} \sum_{2^{m-1} \times 2^{m-1}}^{m-1}$$

$$\circ \left(E_{2^{m-1} \times 2^{m-1}} \otimes \begin{bmatrix} a_{1j} & a_{2j} \\ a_{3j} & a_{4j} \end{bmatrix} \right)_{p^{m-1} \times 2^{m-1}} \circ (3.6)$$

在此, \otimes 爲 tensor product, \circ 爲 Hadamard product, $\hat{\otimes}$ 爲特定遞迴公式的 product,與 tensor 及 Hadamard product 有關,E爲 entry 皆爲 1 的 全矩陣[2]。

所有首為 i 、尾為 j 的花樣 $a_{i_1i_2}a_{i_2i_3}\cdots a_{i_mi_{m+1}}$ ($i_1=i,i_{m+1}=j$)全部有條不紊的出現在 $C_{m;ij}$ 裡。 \mathbb{C}_m 的 好處是可以拿來把 \mathbf{A}_n^m 對 n 降階。詳情如下:令

$$An = \begin{bmatrix} A_{n;11} & A_{n;12} \\ A_{n;21} & A_{n;22} \end{bmatrix} \not \nabla A_n^m = \begin{bmatrix} A_{m,n;1} & A_{m,n;2} \\ A_{mn;3} & A_{m,n;4} \end{bmatrix}$$

可驗證

$$A_{m,n;\alpha} = \sum_{k=1}^{2^{m-1}} A_{m,n;\alpha}^{(k)} \not \Sigma$$

$$A_{m,n;\alpha}^{(k)} = A_{m;j_1j_2} A_{n;j_2j_3} \cdots A_{n;j_mj_{m+1}},$$

在此,

$$k = 1 + \sum_{i=2}^{m} 2^{m-i} (j_i - 1) \not \triangleright \alpha = 2(j_1 - 1) + j_{m+1}$$

降階公式為

$$A_{m,n+1;\alpha}^{(k)} = \begin{bmatrix} \sum_{\ell=1}^{2^{m-1}} (S_{m;\alpha 1})_{k\ell} A_{m,n;1}^{(\ell)} & \sum_{\ell=1}^{2^{m-1}} (S_{m;\alpha 2})_{k\ell} A_{m,n;2}^{(\ell)} \\ \sum_{\ell=1}^{2^{m-1}} (S_{m;\alpha 3})_{k\ell} A_{m,n;3}^{(\ell)} & \sum_{\ell=1}^{2^{m-1}} (S_{m;\alpha 4})_{k\ell} A_{m,n;4}^{(\ell)} \end{bmatrix} \circ$$

$$(3.7)$$

利用此公式可證明:對任意 $k \ge 1$, $m \ge 2$, 若 $\beta_i \in \{1,4\}$, $1 \le j \le k$, 則

$$h(\mathbf{A}_2) \ge \frac{1}{mk} \log \rho(S_{m;\beta_1\beta_2} S_{m;\beta_2\beta_3} \cdots S_{m;\beta_k\beta_1}) \qquad (3.8)$$

特別地,若 $\rho(S_{m;\beta_1\beta_2}S_{m;\beta_2\beta_3}\cdots S_{m;\beta_k\beta_1})>1$,則 $h(\mathbf{A}_2)>0$ 。

(3.8)是 h 下界的一個好估計,拿來判斷 h 是 否爲正很有效。以例 1 來說,可證明

$$C_{m-1} = A_{m-1} \circ$$
 (3.9)

再利用(3.1),對 m≥2,可得

$$\frac{1}{m}\log\rho(\mathbf{A}_{m-1}) \le h(\mathbf{A}_2) \le \frac{1}{m}\log\rho(\mathbf{A}_m) \tag{3.10}$$

在此 $A1=\begin{bmatrix}1&1\\1&0\end{bmatrix}$,(3.10)可給例 1 不錯的估計。

此外,對任意 $m \ge 2$,可定義足跡算子(trace operator)

$$\mathbb{T}_m = \begin{bmatrix} C_{m;11} & C_{m;22} \\ C_{m;33} & C_{m;44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{m;11} & S_{m;22} \\ S_{m;33} & S_{m;44} \end{bmatrix}$$

當 A_2 爲對稱時,可驗證高階 A_n 也會對稱;此時

可證明

$$h(\mathbf{A}_2) \le \frac{1}{2m} \log \rho(\mathbb{T}_{2m}) \quad \circ \tag{3.11}$$

再仔細檢查會發現,在對稱 \mathbf{A}_2 時,公式(3.11)比(3.1)好,因爲有 $\mathbb{T}_m \leq \mathbf{B}_m$ 之故。

四、相變與數論

在研究花樣生成問題時,已略知與統計物裡的相變問題有關。直到 2004 年 6 月在理論科學研究中心舉辦的動態系統國際研討會,與會的數學物理學家 Gallavotti 教授聽完我的演講,建議我們去算一些相變問題裡有 exactsolutions 的問題。如 Isingmodels 及 ice problems。相關問題,早年楊振寧先生,Lieb 及 Baxter 等人都算過。用我們的辦法,算近似值效果不錯,但欠缺臨門一腳,即 ρ *的公式尚未找到。另一方面,有些統計物理學家利用數論的 modular functions 可算出某些 ρ *(\mathbf{A}_2)所滿足的多項式方程式。但以例 1 而言,目前似乎只有近似值,尚未找到 ρ *的方程式。相變與數論是未來我們需要下功夫學習的課題,期望將來的研究會更加深刻及寬廣。

參考資料

- [1] J.C. Ban and S.S. Lin, *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, **13**, 637 (2005).
- [2] J.C. Ban, S.S. Lin and Y.H. Lin, Patterns generation and spatial entropy in two-dimensional lattice models (2005) (submitted).
- [3] R.J. Baxter, *Exactlysolvedmodels in statisti*calmechanics, Academic Press (1982).
- [4] B. Grunbaum and G.C. Shephard, *Tiling and patterns*, W.H. Freeman and Company (1987).
- [5] J. Juang, S.S. Lin, W.W. Lin and S.F. Shieh, *International J. of Bifurcation and Chaos*, **10**, 2845 (2000).
- [6] S.S. Lin and T.S. Yang, *International J. of Bifurcation and Chaos*, **12**, 115 (2002)