Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М.-М. Деза, М. И. Штогрин, Вложение химических графов в гиперкубы, *Матем. заметки*, 2000, том 68, выпуск 3, 339–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm951>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.166.219.16

26 апреля 2023 г., 15:28:58

УДК 519.17

ВЛОЖЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ГРАФОВ В ГИПЕРКУБЫ

М. Деза, М. И. Штогрин

Рассматриваются реализованные на плоскости планарные графы, применяемые в химии: степени вершин 3 и 2, все внутренние грани r -гоны, за исключением одной или двух других внутренних граней, а занимаемая внутренними гранями область плоскости односвязна. Для широких классов таких графов решается вопрос о вложении графической метрики их вершин в многомерные кубы или кубические решетки с сохранением или же удвоением всех расстояний. Попутно дается полная классификация некоторых интересных семейств таких графов.

Библиография: 22 названия.

Мы рассматриваем здесь односвязные полигональные системы. Это плоские графы, состоящие из контуров многоугольников (впредь называемых внутренними гранями), заполняющих связную односвязную область, причем любые два многоугольника либо вовсе не пересекаются, либо пересекаются по ребру. Значит, степень каждой вершины графа, расположенной внутри области, равна 3, а каждой вершине на границе области – 2 или 3. Эти графы рассматриваются в органической, физической и математической химии, где они представляют полициклические сопряженные углеводороды или полициклические ароматические углеводороды. Потребовав односвязности области, мы запретили в ней дыры (исключая таким образом, например, корonoиды), т.е. рассматриваем (в химических терминах) полностью конденсированные полициклические ароматические углеводороды $C_n H_m$, где n – число всех вершин (атомов углерода C), а m – число вершин степени 2 (атомов водорода H). В зависимости от того, имеет ли граф вершины, являющиеся внутренними точками области, или нет, в химических терминах он называется пери- или ката-конденсированным. Случай конечного 3-связного химического графа $C_n H_0$ по теореме Штейница всегда соответствует реберному остову многогранника. Но мы в основном концентрируемся на случае, когда имеются вершины степени 2, т.е. когда число атомов водорода не равно нулю.

Назовем химический граф, взятый вместе со всеми внутренними гранями, *полициклом*, а точнее *поли- r -циклом*, если контуры всех внутренних граней являются комбинаторными r -угольниками. В случае полицикла, как установлено в [1], по заданному графу однозначно определяются его r -циклы как все минимальные циклы графа. Назовем граф *моно- q - r -циклом*, если контуры всех внутренних граней, за исключением одного q -угольника, являются r -угольниками. Наконец, *ди- q - r -цикл* означает, что два

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 99-01-00010, и Фонда поддержки ведущих научных школ, грант № 00-15-96011.

q -угольника и r -угольники являются всеми внутренними гранями. Эти три класса покрывают большую часть химических графов, рассматриваемых в химической литературе (см., например, [2]–[5] и многочисленные ссылки оттуда, из которых мы взяли химическую терминологию).

Примеры химических графов – прототипов соответствующих серий – даны на рис. 1.

Рис. 1. Примеры химических графов: бензол C_6H_6 , нафталин $C_{10}H_8$, азулен $C_{10}H_8$, индацен $C_{12}H_8$, терфенилоид C_9H_5 , флуорантен $C_{16}H_{10}$, пентален C_8H_6 , бифенилин $C_{12}H_8$

Задача, которую мы здесь рассматриваем, состоит в том, чтобы в данном классе химических графов найти все *вложимые* в гиперкуб $\mathbb{H}_d$ или полукуб $\frac{1}{2}\mathbb{H}_d$, $d \leq \infty$. А именно, мы ищем, можно ли адресовать вершины графа двоичными последовательностями длины d так, чтобы расстояние Хэмминга между двумя вершинами равнялось расстоянию между этими вершинами в графе или же этому удвоенному расстоянию (т.е. всегда с одной и той же шкалой – 1 или 2, см. [6]). Полиномиальный алгоритм, проверяющий возможность такого вложения, дан в [7]. Методы нахождения таких вложений для планарных графов указаны в [6] и [8].

В математических терминах вложимость графов в гиперкубы (с какой-то шкалой на все расстояния) равносильно изометрическому вложению графа в пространство l_1^k . Такие вложения рассматривались в математической химии только для бензеноидов [9]; в теореме 3 мы дадим широкое обобщение этого результата, включающее все поли-6-циклы. В [9] указывается также почему такие вложения представляют интерес для химиков: для вычисления параметров, основанных на расстояниях (число Винера, т.е. сумма всех попарных расстояний в графе, и т.д.), и в целях номенклатуры.

Односвязный поли-6-цикл имеет еще два названия: *фузен* и *полигекс*. Он также называется соответственно *бензеноидом* или *гелиценом* в зависимости от того, является ли он подграфом гексагонального разбиения (6^3) плоскости или нет. По аналогии назовем *r -гелиценом* для $r = 3, 4, 5, r \geq 7$ тот поли- r -цикл, который не является частичным подграфом реберного остова соответственно тетраэдра, куба, додекаэдра или разбиения плоскости Лобачевского на r -угольники со схождениями по 3 в каждой вершине, т.е. разбиения (r^3). Всякий r -гелицен допускает непрерывное локально гомеоморфное клеточное отображение в (r^3) (см. [1]).

Назовем поли- r -цикл *собственным*, если он не r -гелицен, т.е. является частичным подграфом регулярного разбиения (r^3) сферы при $r = 3, 4, 5$, евклидовой плоскости при $r = 6$, плоскости Лобачевского при $r \geq 7$. Все несобственные поли- r -циклы являются r -гелиценами. Собственные поли- r -циклы могут быть изометрическими подграфами разбиения (r^3) или нет. В первом случае они вложимы. В последнем случае они подразбиваются на вложимые или нет. Например, есть ровно $1 + 1 + 3 + 7 + 23$ поли-6-циклов

с $p_6 = 1, 2, 3, 4, 5$. Все они собственные; первый гелицен появляется при $p_6 = 6$. Среди этих 35 поли-6-циклов ровно 8 не изометричны подграфам в (6^3) : см. рис. 2а, шесть его расширений по ребрам c, f, g, h или по паре ребер $(a, b), (d, e)$, и рис. 2б. Заметим, что все конечные вложимые поли- r -циклы вложимы в $\mathbb{H}_d/2$, если r четно, или в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_d$, если r нечетно (где при отсутствии замкнутых зон, состоящих из внутренних ребер, d – периметр заполняемой ими области, т.е. длина границы внешней грани).

Рис. 2. Все неизометрические подграфы (6^3) с $p_6 \leq 5$

Перед началом доказательств введем необходимые технические обозначения и понятия. $G \rightarrow \mathbb{H}_d, G \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_d, G \rightarrow \mathbb{Z}_d, G \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{Z}_d, d \leq \infty$, будет означать, что граф G со шкалой $\lambda = 1$ или $\lambda = 2$ вкладывается в гиперкуб $\mathbb{H}_d$ или (если он бесконечен) в кубическую решетку $\mathbb{Z}_d$; коэффициент $\frac{1}{2}$ означает, что при вложении графа все расстояния в нем удваиваются. Далее, $G - e, G - v$ означает граф, полученный выбрасыванием из G одного ребра или вершины; $P_n, P_{\mathbb{N}}, P_{\mathbb{Z}}$ означает реберный путь с вершинами $\{1, 2, \dots, n\}$, или $\mathbb{N}$ (натуральные числа), или $\mathbb{Z}$ (все целые числа) соответственно; $G \times G'$ означает прямое (декартово) произведение графов G и G' ; через $\alpha_3, \beta_3, \gamma_3, \text{Do}$ и Ico мы обозначаем соответственно тетраэдр, октаэдр, куб, додекаэдр и икосаэдр (и, говоря о графах, их одномерные остовы).

Важным необходимым условием вложимости графа является его 5-гональность [10]: для любых пяти его вершин x, y, a, b, c справедливо следующее 5-гональное неравенство:

$$\rho_{xy} + (\rho_{ab} + \rho_{ac} + \rho_{bc}) \leq (\rho_{xa} + \rho_{xb} + \rho_{xc}) + (\rho_{ya} + \rho_{yb} + \rho_{yc}). \quad (*)$$

Все примеры невложимости в нашей работе получены указанием в графе 5 точек, нарушающих это неравенство. На рисунках вершины a, b, c отмечены кружочками, a, x, y – квадратиками.

Рис. 3. Запрещенные изометрические подграфы вложимых моно-3- и моно-4-фузенов

Графы, которые мы здесь рассматриваем, в некотором смысле противоположны классу тех планарных графов, у которых степени всех внутренних вершин больше 3 и которые не содержат треугольников; в [11] доказана вложимость таких графов. Заметим, что граф, состоящий из сходящихся в одной тройной вершине 3-угольника, m -угольника и

Рис. 4. Фуллерен $F_{26} \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{12}$. Центральный подграф $\Gamma_{1,1}$ не 5-гонален и неизометричен

n -угольника, вложим тогда и только тогда, когда m и n одновременно нечетны [12]; нарушение 5-гонального неравенства (*) при $m = n = 6$ иллюстрирует рис. 3а.

Примерами односвязных полигональных систем являются униформные разбиения евклидовой плоскости $(6^3) \rightarrow \mathbb{Z}_3$, $(4.8^2) \rightarrow \mathbb{Z}_4$, $(4.6.12) \rightarrow \mathbb{Z}_6$, не 5-гональное (3.12^2) , а также униформные разбиения гиперболической плоскости $(r^3) \rightarrow \mathbb{Z}_\infty$ при четном r и $(r^3) \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{Z}_\infty$ при нечетном r . Конечно, под определение подходят также взятые без одной грани многогранники $\alpha_3 \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_4$, $\gamma_3 \rightarrow \mathbb{H}_3$, До $\rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{10}$, усеченный октаэдр вложим в $\mathbb{H}_6$, а также не 5-гональные усеченные многогранники α_3 , γ_3 , До и Исо. В качестве примера см. на рис. 4 вложимый в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_{12}$ граф фуллерена F_{26} (многогранника с вершинами степени 3, с 12 пятиугольными и 3 шестиугольными гранями). Этот пример интересен также следующими особенностями: наличием неальтернированных зон (см. определение перед теоремой 2) и тем, что не 5-гональный подграф $\Gamma_{1,1} = C_{14}H_8$, введенный в замечании 4(ii) и данный на рис. 5b, является здесь неизометрическим подграфом вложимого фуллерена на рис. 4.

Рис. 5. Запрещенные изометрические подграфы вложимых ди-5-фузенов

Основным параметром рассматриваемых плоских графов, как и в случае многоугольников, будет их p -вектор $p = (p_3, p_4, \dots)$, где p_i означает число комбинаторных i -циклов, т.е. i -угольников среди всех внутренних граней.

В настоящей статье рассматриваются следующие девять случаев (напомним, что p_i обозначает число внутренних i -граней):

- 1) поли-3-циклы: p_3 любое, остальные $p_i = 0$;
- 2) поли-4-циклы: p_4 любое, остальные $p_i = 0$;
- 3) поли-5-циклы: они введены в [2];
- 4) $p_3 = p_4 = 0$, $p_5 \leq 1$, остальные p_i любые;
- 5) моно-3-6-циклы: $p = (p_3 = 1, p_6)$;
- 6) бифениленоиды: $p = (p_4 = 1, p_6)$;
- 7) ди-3-6-циклы: $p = (p_3 = 2, p_6)$;
- 8) терфениленоиды: $p = (p_4 = 2, p_6)$;
- 9) индансеноиды: $p = (p_5 = 2, p_6)$.

В теореме 1 случаи 1) и 2) будут полностью исследованы. В теореме 2 дан список всех запрещенных изометрических подграфов вложимого поли-5-цикла, т.е. случай 3). В теореме 3 доказывается вложимость для широкого класса химических графов, данных в случае 4). Этот случай включает, например, поли-6-циклы и азуленоиды $p = (p_5 = 1, p_7)$. Вложимость бензеноидов, т.е. фузенов, являющихся изометричными подграфами в (6^3) , в гиперкубы была доказана в [9]. Теорема 4 характеризует все вложимые моно- q -фузены ($q = 3, 4, 5$), т.е. случаи 5) и 6), а также ди-3-фузены, т.е. случай 7). В теореме 5 даны некоторые необходимые условия вложимости ди- q -фузенов с $q = 4, 5$, точнее, в случаях 8) и 9) приводится список запрещенных изометрических подграфов (их бесконечно много). Высказывается предположение, что условия теоремы 5 не только необходимы, но и достаточны для вложимости терфениленоидов и индансеноидов. Наконец, в теореме 6 указаны все моноэдральные полипентагоны.

Все планарные графы без внутренних вершин (т.е. ката-конденсированные) вложимы (см. [6, предложение 3]). Более того, характеристика вложимых поли-5-циклов и ди-5-фузенов запрещенными подграфами показывает, что любой такой граф вложим, если имеет ровно одну внутреннюю вершину. Каждый поли-5-цикл, в котором все внутренние вершины изолированы друг от друга (т.е. любые две вершины не могут быть соединены реберным путем, состоящим только из внутренних точек), вложим; и вложим в $\frac{1}{2}\mathbb{Z}_\infty$, если число изолированных внутренних вершин бесконечно (см. бесконечный граф на рис. 6а). С другой стороны, существуют не вложимые ди-3-фузены (т.е. ди-3-6-циклы) с единственной внутренней вершиной (см. рис. 6б).

Рис. 6. Примеры пери-конденсированных графов:
а) $\rightarrow \mathbb{Z}_\infty$; б) не 5-гонален

Для доказательства вложимости графов мы ниже используем достаточные условия вложимости планарного графа, данные в [6, предложение 2]. А именно, пусть граф таков, что множество его ребер разложимо на зоны (последовательности противоположных ребер граней, альтернирующие направления в случае нечетных граней), так что каждая зона соответствует одному из измерений куба, в который вкладывается граф. Зоны дают маркировку ребер (одним или двумя измерениями в зависимости от того, является ли граф двудольным или нет). Затем, приняв одну из вершин за начало, можно маркировать каждую другую вершину симметрической разностью маркированных ребер на каком-либо кратчайшем пути от выбранного начала. В силу предполагаемой односвязности области, заполняемой внутренними гранями графа, такая маркировка не зависит от выбора пути, связывающего маркируемую точку с заданным началом. При этом для изометричности такого отображения требуется выпуклость *разреза*, соответствующего любой альтернированной зоне (см. [6]).

ТЕОРЕМА 1. (i) Все поли-3-циклы: $\alpha_3, (\alpha_3 - e) \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_4$ (неизометричный подграф тетраэдра α_3), $(\alpha_3 - v) = \alpha_2$.

(ii) Все поли-4-циклы: $\gamma_3, (\gamma_3 - e)$ (не 5-гонален), $(\gamma_3 - v) \rightarrow \mathbb{H}_3, (P_2 \times P_n) \rightarrow \mathbb{H}_n, (P_2 \times P_{\mathbb{N}}) \rightarrow \mathbb{Z}_2, (P_2 \times P_{\mathbb{Z}}) \rightarrow \mathbb{Z}_2$. Подграфы куба: $\gamma_3, (\gamma_3 - v), (P_2 \times P_n)$ при $n = 2, 3, 4$; изометрические среди них: $\gamma_3, (\gamma_3 - v), (P_2 \times P_2) = \gamma_2, (P_2 \times P_3)$.

Доказательство осуществляется простой проверкой.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Есть $1 + 1 + 2 + 4 + 7 + 18$ поли-5-циклов с $p_5 = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Среди этих 33 поли-5-гонов можно выделить следующие.

(i) 5-гелиценом (т.е. полипентагоном, который не является подграфом додекаэдра) является один с $p_5 = 5$ и семь с $p_5 = 6$; а именно, граф на рис. 7а, четыре его расширения по ребрам e, f или паре ребер $(a, b), (c, d)$ и 3 остальные на рис. 7б, 7с, 7д (все они вложимы).

Рис. 7. 5-гелицены с $p_5 \leq 6$

(ii) Ровно 5 графов из этих 33 являются изометрическими подграфами додекаэдра: G_1 – реберный остов одного 5-угольника (т.е. цикл C_5), G_2 – реберный остов двух 5-угольников, смежных по ребру, G_3 – реберный остов трех 5-угольников додекаэдра, сходящихся в одной вершине, G_4 – реберный остов четырех 5-угольников додекаэдра, инцидентных с одним его ребром, G_5 – реберный остов шести 5-угольников додекаэдра, пять из которых инцидентны с шестым. Иными словами, подграф додекаэдра изометричен тогда и только тогда, когда он не содержит граничного ребра, инцидентного трем 5-угольникам. Более того, эти 5 графов исчерпывают все нетривиальные изометрические подграфы додекаэдра; конечно, все они вложимы.

(iii) Ровно 2 из этих 33 графов не вложимы (не 5-гональные конфигурации указаны на рис. 8).

Рис. 8. Запрещенные подграфы вложимых поли-5-циклов

(iv) Все поли-5-циклы, являющиеся подграфами додекаэдра, даны в [2, рис. 3–5]. Среди четырнадцати оставшихся подграфов додекаэдра, т.е. случаев $7 \leq p_5$, 5-гональны (более того, вложимы) ровно четыре из них [2, рис. 5]: три неизометричных подграфа додекаэдра $C_{20}H_8 \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{17}$, $C_{20}H_8 \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{17}$, $C_{19}H_7 \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{15}$, см. рис. 9, и реберный остов самого D_0 .

(v) Реберный остов D_0 имеет два особых (неизометрических и невложимых) подграфа $D_0 - v \subset D_0 - e \subset D_0$, расширяемых только согласно указанным здесь включениям, и сам он не является подграфом никакого другого полицикла.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. (i) Пример поли-5-цикла, вложимого только в $\frac{1}{2}\mathbb{Z}_{\infty}$ – бесконечная сильносвязная цепочка пятиугольников, которая служит универсальной накрывающей

Рис. 9. Все вложимые неизометрические подграфы додекаэдра с $p_5 \geq 7$

конечной замкнутой цепочки, состоящей из пяти пятиугольников, окружающих фиксированный пятиугольник; этот граф, как и граф, изображенный на рис. 6а, содержит дерево с бесконечным числом ветвей.

(ii) Любой отличный от додекаэдра односвязный поли-5-цикл с не более чем одной точкой степени 2 является бесконечным.

(iii) Если поли- r -цикл при $r \geq 6$ имеет не более $r - 1$ вершин степени 2, то он бесконечен. При $r = 3, 4, 5$ конечные поли- r -циклы $\alpha_3 - e$, $\gamma_3 - e$, $\text{До} - e$ имеют по две вершины степени 2, а $\alpha_3 - v$, $\gamma_3 - v$, $\text{До} - v$ имеют по три вершины степени 2. При $r \geq 5$ существуют бесконечные поли- r -циклы, количество вершин степени 2 которых равно любому наперед заданному натуральному числу.

Ниже нам понадобятся еще два определения.

Полипентагон, т.е. поли-5-цикл, соответствующий графу G , мы обозначаем через $\Pi(G)$. (По сути, $\Pi(G)$ есть клеточное разбиение диска, обладающее реберным остовом G . Как оказалось (см. [1], [13] и [14]), абстрактное устройство полипентагона $\Pi(G)$ однозначно определяется абстрактным устройством графа G . Поэтому довольно часто мы называем полициклом сам граф G .) Соединим любой пентагон из $\Pi(G)$ с любым другим его пентагоном некоторой цепочкой пентагонов, в которой оба они являются первым и последним, причем любые два следующие друг за другом пентагона цепочки смежны по общей стороне. Назовем k -окрестностью данного пентагона совокупность всех тех пентагонов из $\Pi(G)$, для каждого из которых кратчайшая цепочка, соединяющая его с данным пентагоном, содержит не более $k + 1$ пентагонов. Тогда в 0-окрестность пентагона входит только он сам, в 1-окрестность пентагона входит он сам и его соседи по сторонам, в 2-окрестность входит он сам, его соседи по сторонам и соседи соседей. В частности, если какой-то пентагон имеет в $\Pi(G)$ ровно пять соседей, то его 1-окрестность представляет собою $\Pi(G_5)$ (см. замечание 1(ii)).

У любого ребра n -угольника на плоскости есть одно противоположное ребро, если n четно, и два (левое и правое) противоположные ребра, если n нечетно. Назовем *зоной* разбиения плоскости последовательность ребер (возможно, замкнутую) такую, что каждое последующее ребро является противоположным предыдущему. Назовем *зону альтернирующей*, если в соответствующей последовательности выборов (между левым и правым ребром) выбор меняется каждый раз.

ТЕОРЕМА 2. *Не совпадающий с До поли-5-цикл G вложим в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_d$ (где d – периметр) тогда и только тогда, когда он не содержит подграфов, приведенных на рис. 8, не всегда изометрических.*

Невложимость графов из рис. 8 дана указанием на каждом из них 5 вершин, нарушающих 5-гональное неравенство. Такое нарушение имеет место для всякого изометрического, но не для всякого неизометрического подграфа. В последнем случае нарушение

5-гонального неравенства может оказаться при другой расстановке 5 вершин, а не той, которая указана на рис. 8.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 2. Граф G_5 , введенный в замечании 1(ii), удовлетворяет условиям теоремы 2, он вложим в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_{10}$.

Пусть, далее, $G \neq G_5$, но у полипентагона $\Pi(G)$ есть пентагон, у которого 1-окрестность имеет вид $\Pi(G_5)$. Тогда 2-окрестность этого пентагона может быть только одной из следующих семи (в каждой из них содержится подграф из рис. 8): $\Pi(\text{Do} - v_1 - v_2 - v_3)$, $\Pi(\text{Do} - v_1 - v_2)$, $\Pi(\text{Do} - v - e)$, $\Pi(\text{Do} - e_1 - e_2)$, $\Pi(\text{Do} - v)$, $\Pi(\text{Do} - e)$, $\Pi(\text{Do})$. Три последние 2-окрестности встречаются только у трех индивидуальных полипентагонов $\Pi(\text{Do} - v)$, $\Pi(\text{Do} - e)$, $\Pi(\text{Do})$, из которых только $\Pi(\text{Do})$ вложим. В любом другом полипентагоне $\Pi(G)$ у тех пентагонов, чья 1-окрестность имеет вид $\Pi(G_5)$, 2-окрестность может быть только одного из оставшихся четырех видов. Но каждый из соответствующих четырех графов не 5-гонален и поэтому не вложим. Докажем изометричность каждого из них. В 2-окрестности имеется не более трех соседей второго порядка. Число соседей третьего порядка может быть равно только 1 или 2. Расширив 2-окрестность до 3-окрестности, в каждом конкретном случае легко убедиться, что реберный граф 2-окрестности является изометрическим подграфом реберного графа 3-окрестности, что следует из отсутствия у $\Pi(G)$ некоторых соседей второго порядка окружаемого пентагона и из односвязности $\Pi(G)$. Более того, по этим же причинам реберный граф 2-окрестности остается изометрическим подграфом во всем G . Следовательно, любой граф $G \neq G_5$ с условиями $G_5 \subset G \neq \text{Do}$ не вложим.

Покажем, что при условиях теоремы 2 альтернирующая зона не может быть замкнутой. В самом деле, предположим обратное, пусть полипентагон $\Pi(G)$ имеет замкнутую альтернирующую реберную зону. Тогда она охватывает в $\Pi(G)$ подграф G_3 — три сходящиеся в одной вершине пентагона (см. замечание 1(ii)). Каждый из них имеет 1-окрестность вида $\Pi(G_5)$. Такой полипентагон всегда совпадает с одним из трех полипентагонов $\text{Do} - v$, $\text{Do} - e$, Do , содержащих подграфы из рис. 8. А для них условия теоремы 2 не выполнены.

Покажем теперь, что при условиях теоремы 2 любой разрез, альтернирующий все ребра зоны в $\Pi(G)$, является выпуклым.

Пусть k — число пентагонов альтернирующей зоны. Если $k \geq 5$, то примыкающий к зоне пентагон (если такой имеется) обязан быть смежным с концевым (левым или правым — ведь зона не замкнута) ее пентагоном, так как в противном случае имелся бы запретный граф из рис. 8a (из отсутствия запретного графа из рис. 8a следует, что вдали от концов зоны ее край одновременно является краем самого полицикла $\Pi(G)$; сказанное относится к обоим краям зоны). Пентагон, смежный с концевым, может иметь одно из трех не запрещенных положений, в которых он может быть смежным с тремя, двумя или только одним пентагоном зоны (в последнем случае он смежен не по ребру зоны, иначе ее длина стала бы $k + 1$).

Если $k \geq 6$, то все три способа соседства пентагона с данной зоной при каждом ее конце допустимы, причем даже все одновременно: см. рис. 10a при $k = 6$ и рис. 10b при $k = 7$.

Если k четно, то оба края зоны имеют одну и ту же длину. При наличии смежного по трем сторонам зоны пентагона (при четном k для любого края зоны имеется лишь один такой пентагон), заменив эти три стороны на две другие стороны пентагона, укоротим ломаную между концами края, с которым инцидентен пентагон, на 1 по сравнению с

Рис. 10. Зоны длины $k = 6$ и $k = 7$ со всевозможными соседними пентагонами

длиной края. Так как вблизи середины зоны оба конца ее края принадлежат краю $\Pi(G)$, а полипентагон $\Pi(G)$ односвязен, то более короткой ломаной между концами края зоны быть не может. Следовательно, при наличии пентагона, смежного по трем сторонам зоны, кратчайшее расстояние между концами зоны на 1 меньше длины края зоны. В силу сказанного при четном k возможно одно из трех:

- оба края зоны геодезические;
- один край геодезический, а другой нет, причем кратчайшая между концами другого края на 1 ребро короче его длины и лежит в своей области разреза;
- оба края не геодезические; кратчайшее расстояние между концами одного края равно кратчайшему расстоянию между концами другого края (так как оно на 1 короче длины самого края, а длины краев равны), и каждая кратчайшая лежит в своей области разреза.

Во всех трех случаях разрез рассматриваемого графа по ребрам зоны является выпуклым.

Если k нечетно, то один край зоны всегда геодезический и он на 1 короче другого края, который в свою очередь может быть:

- геодезическим;
- не геодезическим, а кратчайшая между его концами на 1 короче края и лежит в своей области разреза;
- не геодезическим, а кратчайшая между его концами на 2 ребра (так как имеется два пентагона, смежные с зоной по трем сторонам из этого края) короче длины края, причем лежит в своей области разреза.

И в этом случае разрез является выпуклым. В самом деле, даже в случае с) если прибавить два ребра к кратчайшей между концами края, чтобы мысленно перевести концы через зону в другую область разреза, то получим путь, длина которого равна длине этого края. Но длина второго (геодезического) края на 1 короче длины этого пути. Следовательно, перевести концы в другую область разреза и получить между новыми концами более короткое расстояние невозможно.

Аналогично поступаем в случаях $1 \leq k \leq 5$. Так, например, при $k = 5$ из двух вакансий на смежные по трем сторонам с зоной ввиду запрета рис. 8b допустим только один пентагон. Поэтому следует рассмотреть два случая: есть один пентагон, смежный с зоной по трем сторонам, или ни одного. Все остальные вакансии допустимы, причем даже одновременно. В каждом случае разрез по ребрам зоны является выпуклым. При $k = 4$ из двух вакансий на смежных по трем сторонам пентагонов допустим только один из них, а при наличии такового из двух других смежных с ним вакансий опять допустима лишь одна. Все остальные вакансии допустимы. В каждом случае разрез является выпуклым. Так же и в оставшихся случаях $k = 3, 2, 1$.

Итак, на каждое ребро пентагона приходится по две зоны. Каждый разрез выпуклый. Каждой зоне поставим в соответствие свою координатную ось. В итоге получим отображение полипентагона в гиперкуб со шкалой $\lambda = 2$. Теорема 2 доказана.

ТЕОРЕМА 3. *Односвязный химический граф без треугольников, без четырехугольников и не более чем с одним пятиугольником вложим. В частности, при $r \geq 6$ все поли- r -циклы вложимы.*

Доказательство теоремы 3 основано на методах работы [6], а именно, все разрезы графа, соответствующие альтернирующим зонам, как легко это проверить при условиях теоремы 3, являются выпуклыми.

ТЕОРЕМА 4. (i) *Моно-3-фузены (один треугольник, остальные шестиугольники) вложимы (в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_d$, где d – периметр) тогда и только тогда, когда одна из вершин треугольника имеет степень 2. Другими словами, эти графы вложимы тогда и только тогда, когда они не содержат изометрического подграфа, данного на рис. 3а.*

(ii) *Ди-3-фузен (два треугольника, остальные 6-угольники) вкладывается тогда и только тогда, когда каждый треугольник имеет вершину степени 2.*

(iii) *Моно-5-фузены (флуореноиды) всегда вложимы (в силу теоремы 3).*

(iv) *Моно-4-фузены (бифениленоиды) вложимы тогда и только тогда, когда они не содержат изометрического подграфа, данного на рис. 3б.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 4. Если в случаях (i), (ii) имеется треугольник, степень каждой вершины которого равна 3, то граф не может быть вложен ввиду наличия запретного подграфа, данного на рис. 3а. Если же треугольник имеет вершину степени 2, то после удаления каждого из таких треугольников мы окажемся в условиях теоремы 3 и получим вложимый подграф. Восстановление треугольника с вершиной степени 2 (одного или двух) никак не может нарушить вложимость графа.

Подчеркнем, что два шестиугольника, не смежные с 4-угольником (рис. 3б), инцидентны двум *противоположным* висячим ребрам из вершин 4-угольника.

Если в случае (iv) какая-то зона была бы не выпуклой, то в такую зону входили бы только шестиугольники, причем кратчайшее расстояние между двумя вершинами какого-то ее края проходило бы по ломаной, которая заходит в другую область разреза, которая не примыкает к данному краю. Замкнем ломаную, прибавив к ней ребра края. Полученная замкнутая ломаная окружает 4-угольник. Не нарушая общности, можно считать, что рассматриваемая зона касается 4-угольника. Однако исходная кратчайшая не может касаться 4-угольника, так как в противном случае кратчайшей была бы ломаная, идущая по самому краю зоны. Следовательно, 4-угольник с одной стороны примыкает к краю зоны, а с другой стороны его окружают еще два 6-угольника, а в таком случае мы имеем запретный подграф, изображенный на рис. 3б. Теорема 4 доказана.

ТЕОРЕМА 5. (i) *Для вложимости ди-5-фузена (индансеноида) необходимо, чтобы он не содержал зависящих от двух параметров $s, t \in \mathbb{N}$ запрещенных изометрических подграфов $\Gamma_{s,t}$ (см. рис. 5а, соответствующий параметрам $s = 3$ и $t = 2$, и рис. 5б, соответствующий параметрам $s = t = 1$) и зависящего от одного параметра $u \in \mathbb{N}$ запрещенного изометрического подграфа Γ_u (см. рис. 5с, соответствующий параметру $u = 3$).*

(ii) Для вложимости ди-4-фузена (терфениленоида) необходимо, чтобы он не содержал зависящих от двух параметров $s, t \in \mathbb{N}$ запрещенных изометрических подграфов $\Gamma'_{s,t}$ (см. рис. 11a, соответствующий параметрам $s = 3$ и $t = 2$, и рис. 11b, соответствующий параметрам $s = t = 1$), зависящий от одного параметра $u \in \mathbb{N}$ запрещенный изометрический подграф Γ'_u (см. рис. 11c, соответствующий параметру $u = 4$, и рис. 11d, соответствующий параметру $u = 1$) и запрещенный подграф, изображенный на рис. 3b.

Рис. 11. Запрещенные изометрические подграфы вложимых ди-4-фузенов

Необходимость условий теоремы 5 очевидна, так как все изометрические подграфы, запрещенные в формулировке теоремы, не 5-гональны (на рисунках указаны пять точек, нарушающих условие 5-гональности).

Мы полагаем, что для вложимости ди-4-фузена (терфениленоида) и ди-5-фузена (индансеноида) условия теоремы 5 не только необходимы, но и достаточны.

ЗАМЕЧАНИЕ 3. Было бы интересно охарактеризовать *плоские фуллерены*, т.е. разбиения плоскости на комбинаторные пентагоны и гексагоны, так что каждая вершина имела бы степень 3. Ясно, что в таком разбиении число гексагонов всегда бесконечно и что для числа пентагонов $p_5 = 0$ и $p_5 = 1$ такой плоский фуллерен единственен, а для $p_5 = 2$ их бесконечно много (см. рис. 5). Нас интересует также, какой диск, состоящий из гексагонов и не более чем 6 пентагонов, дополняется гексагонами до разбиения всей плоскости (со всеми вершинами степени 3). Полипентагоны $\Pi(\text{Do})$, $\Pi(\text{Do} - e)$, $\Pi(\text{Do} - v)$, например, а также гелицены не могут быть дополнены гексагонами до разбиения всей плоскости (со всеми вершинами степени 3). Из теоремы А. Д. Александрова [15] следует, что плоский фуллерен с p_5 пентагонами существует тогда и только тогда, когда $p_5 \leq 6$. Аналогично, разбиение плоскости на 3-угольники (4-угольники) и гексагоны с вершинами степени 3 существует тогда и только тогда, когда $p_3 \leq 2$ (соответственно $p_4 \leq 3$). Это следует из того, что любому такому разбиению плоскости можно поставить в соответствие изоморфный двумерный полиэдр, составленный из правильных евклидовых многоугольников. Кривизна полиэдра с данной метрикой не отрицательна (она строго положительна лишь в некоторых вершинах полиэдра). Такой полиэдр по теореме Александрова допускает вложение в трехмерное пространство в виде выпуклой поверхности. Полная кривизна выпуклой поверхности, гомеоморфной плоскости, не превышает 2π . Доля k -угольника в кривизне равна $(6 - k)\pi/3$. Для поверхности из 6- и k -угольников имеем $p_k(6 - k)\pi/3 \leq 2\pi$, т.е. $p_k \leq 6/(6 - k)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 4. (i) Среди множества молекулярных графов, данных в справочнике [16], только следующие не вложимы (более того, не 5-гональны): № 43, рис. 3.1, № 43, 44, 46, 48–50, 105–112, 132–136, 168–176, 194–201 (примеры, содержащие треугольник с вершинами степени 3, см. его рис. 3.2). Даже небольшие запрещенные индансеноиды, данные нами на рис. 5, не встретились в справочнике [16]. Как пример вложений

для остальных молекул из [16] заметим, что *коранулен* $C_{20}H_{10} \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{15}$, *декасилен* $C_{36}H_{18} \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{H}_{33}$; т.е. только *кекулен* $C_{48}H_{24}$ не 5-гонален.

(ii) Одним из возможных направлений является характеристизация вложимых графов $C_m H_n$ в данном классе, например, индансеноидов с $p = (p_5 = 2, p_6)$. Примеры синтезированных индансеноидов: *циркофульвален* (называемый также полу-бакминстерфуллереном) $C_{30}H_{12}$, см. рис. 12а, $C_{30}H_{14}$, $C_{26}H_{12}$. В [16] даны все 45 индансеноидов $C_{30}H_{12}$. Например, все четыре индансеноида $C_{15}H_9$, данных в [4, табл. 1], вложимы в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_{15}$. Но данный на рис. 5b граф $C_{14}H_8$ не 5-гонален. А среди четырех индансеноидов $C_{30}H_{12}$ с симметрией D_{2h} , указанных в той же таблице, три, включая полу-бакминстерфуллерен, не 5-гональны (см. рис. 12а, 12b, 12с). Четвертый, представленный на рис. 12d, вложим в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_{20}$. Кстати, дуальный граф циркуфульвалена (т.е. дуальный граф внутренних граней) вкладывается в $\frac{1}{2}\mathbb{H}_8$.

Рис. 12. Четыре индансеноида $C_{30}H_{12}$ с симметрией D_{2h}

Графы, изображенные на рис. 12а и рис. 12b, содержат запрещенный изометрический подграф $\Gamma_{2,1}$ из рис. 5а. Граф, изображенный на рис. 12с, содержит запрещенный изометрический подграф $\Gamma_{1,1}$ из рис. 5b.

(iii) Многогранники с вершинами степени 3, с $p = (p_5, p_6, p_7)$ и $12 + p_7 = p_5$ называются *фуллероидами*. Оба минимальных икосаэдральных фуллероида на 260 вершинах (см. [17]) не 5-гональны.

ЗАМЕЧАНИЕ 5. Вложенный в плоскость граф G однозначно задает в ней все внутренние грани, которые вместе составляют некоторую замкнутую область $\Omega(G)$. Если область $\Omega(G)$ односвязна, все внутренние грани суть r -угольники, причем любые две из них либо не пересекаются, либо имеют одно общее ребро, то разбиение области $\Omega(G)$ внутренними гранями, которое мы обозначили через $\Pi(G)$, представляет собою поли- r -цикл. Это значит, что в каждой вершине графа G , являющейся внутренней точкой области $\Omega(G)$, сходится ровно три r -угольника.

Сейчас мы рассмотрим примеры графов другого типа.

(i) Степень вершины равна 4. Рассмотрим следующее моно- q -4-гональное разбиение плоскости. Каждому ребру правильного q -угольника приставим бесконечную цепочку квадратов и каждый из возникших углов заполним ромбами. Граф этого разбиения вложим в $\mathbb{Z}_{q/2}$ при четном q и в $\frac{1}{2}\mathbb{Z}_q$ при нечетном q .

(ii) Степень вершины равна 4, 3, 5. На рис. 13 дается пример двух вложимых бесконечных поли-4-циклов. Один (см. рис. 13а) не является проекцией никакого изометрического подграфа из $\mathbb{Z}_d$, $d < \infty$, но это зоноэдральное разбиение, комбинаторно эквивалентное $\mathbb{Z}_2$. Другой (см. рис. 13b) вкладывается в $\mathbb{Z}_d$ только при $d = \infty$.

ЗАМЕЧАНИЕ 6. Назовем *гексагональным тором* (или *торическим бензеноидом*) нормальное разбиение поверхности тора на 6-угольники; степень каждой вершины равна 3. Такие торы рассматриваются, например, в [18]. Обозначим через T_i такие разбиения тора на i шестиугольников; ясно, что они имеют по $2i$ вершин. T_i многогранно (т.е.

Рис. 13. Примеры необычных бесконечных поли-4-циклов: а) $\rightarrow \mathbb{Z}_2$; б) $\rightarrow \mathbb{Z}_\infty$

все грани суть выпуклые полигоны, составляющие замкнутое связное 2-многообразие) только при $i \geq 7$. Единственная 7-вершинная триангуляция тора (Császár torus) имеет остов K_7 и является в $\mathbb{R}^3$ минимальным многогранником рода 1 [19].

Примеры: бензол-тор $T_3 = K_{3,3}$, граф Хивуда T_7 , пирен-тор T_8 , коронен-тор T_{12} . (T_7 реализует минимальную раскраску тора на 7 красок.) Все они не 5-гональны, но куб γ_3 может быть реализован как T_4 . Кстати, все неприводимые (в смысле [20]) квадрангуляции тора (разбиения тора на 4-угольники) имеют реберные графы K_5 , $K_6 - 3K_2$, $K_{4,4}$, $K_{3,6}$, $K_{4,5} - P_3$, $K_{5,5} - 5K_2$, $K_7 - C_7$ (см. [20]). Первые два графа вложимы (как остовы α_4 и β_3), а остальные не 5-гональны. Среди 10 неприводимых квадрангуляций бутылки Клейна (см. [21]) две вложимы (точнее, Q^6 и Q^7 имеют соответственно такие же остовы, как вложимые β_3 и α_3 с пирамидами над двумя гранями), а остовы восьми остальных не 5-гональны. (Неприводимые квадрангуляции сферы суть C_4 , а проективной плоскости — K_4 , $K_{3,4}$; из них только последний невложим.)

ЗАМЕЧАНИЕ 7. Графы в замечании 6 (а также кекулен из замечания 4(i)) являются примерами *неодносвязных* поли-6-циклов. Шесть неодносвязных поли-6-циклов даны [22, рис. 2] в качестве возможных гидрокарбонов; все они не 5-гональны.

ТЕОРЕМА 6. *Существует ровно 8 моноэдральных полипентагонов. Из них три конечных: G_1, G_2, G_3 (см. замечание 1(ii)), и пять бесконечных: бесконечная в обе стороны альтернирующая зона, бесконечная в обе стороны нигде не альтернирующая зона, бесконечная в обе стороны зона со строгим чередованием альтернирования и неальтернирования, склеенные вместе две неальтернирующие зоны, а также полипентагон из рис. 6а.*

Доказательство теоремы 6 получается перебором всех 1-окрестностей и соответствующим дополнением их до моноэдральных полипентагонов. Лишь в этих случаях 1-окрестности всех пентагонов в полипентагоне одинаковы. Напомним, что поли- r -цикл называется *моноэдральным*, если его группа симметрии транзитивна на r -циклах.

В заключение приведем пример серии с растущей шкалой вложимых графов, предел которых невложим. Возьмем i точек A_j с натуральной координатой j на оси, $1 \leq j \leq i$. Две соседние точки A_{j-1} и A_j примем за пару антиподальных вершин гипероктаэдра β_{n_j} размерности $n_j = 2^j$, дополнительно привлекая еще 2^{j-1} новых пар антиподов (чтобы пересекались только гипероктаэдры с антиподами в смежных парах (A_{j-1}, A_j) и (A_j, A_{j+1}) , имея лишь одну общую вершину A_j). Все эти гипероктаэдры вместе составляют *гирлянду* W_i . Гипероктаэдр β_{n_i} , достроенный на последней паре (A_{i-1}, A_i) ,

со шкалой $\lambda_i = 2^{i-1}$ вложим в $\mathbb{Z}_{m_i}$, где $m_i = 2^i$. В ту же решетку и с той же шкалой вложима вся гирлянда W_i . Предел W_i при $i \rightarrow \infty$ обозначим через W_∞ . Однако $\lambda_i \rightarrow \infty$ при $i \rightarrow \infty$; следовательно, вложение предельной гирлянды W_∞ с конечной шкалой невозможно даже в $\mathbb{Z}_\infty$.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Deza M., Shtogrin M. Polycycles // Voronoi Conference on Analytic Number Theory and Space Tilings (Kiev, September 7–14, 1998). Abstracts. Kiev, 1998. P. 19–23.
- [2] Cyvin S. J., Cyvin B. N., Brunvoll J., Brendsdal E., Zhang Fuji, Guo Xiofeng, Totic R. Theory of polypentagons // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1993. V. 33. P. 466–474.
- [3] Cyvin S. J., Cyvin B. N., Brunvoll J. General formulations for some polycyclic hydrocarbons: di- q -polyhexes // Chemical Physics Letters. 1995. V. 240. P. 601–604.
- [4] Dias J. R. Indacenoid isomers of semibuckminsterfullerene (Buckybowl) and their topological characteristics // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1995. V. 35. P. 148–151.
- [5] Brunvoll J., Cyvin S. J., Cyvin B. N. Azulenoids // MATCH. 1996. V. 34. P. 91–108.
- [6] Chepoi V., Deza M., Grishukhin V. Clin d'oeil on L_1 -embeddable planar graphs // Discrete Appl. Math. 1997. V. 80. P. 3–19.
- [7] Deza M., Shpectorov S. Recognition of l_1 -graphs with complexity $O(nm)$, or football in a hypercube // Europ. J. Combinatorics. 1996. V. 17. P. 279–289.
- [8] Деца М., Штогрин М. И. Изометрические вложения полуправильных многогранников, разбиений и им дуальных в гиперкубы и кубические решетки // УМН. 1996. Т. 51. № 6. С. 199–200.
- [9] Klavzar S., Gutman I., Mohar B. Labelling of bensenoid systems which reflects the vertex-distance relations // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1995. V. 35. P. 590–593.
- [10] Тылкин М. Е. О геометрии Хэмминга единичных кубов // Докл. АН СССР. 1960. Т. 134. № 5. С. 1037–1040.
- [11] Присакарь К. Ф., Солтан П. С., Чепой В. Д. О вложимости планарных графов в гиперкубы // Изв. АН МССР. Сер. матем. 1990. № 1. С. 43–50.
- [12] Deza M., Tuma J. A note on l_1 -rigid planar graphs // Europ. J. Combinatorics. 1996. V. 17. № 2, 3. P. 157–160.
- [13] Деца М., Штогрин М. И. Примитивные полициклы и гелицены // УМН. 1999. Т. 54. № 6. С. 159–160.
- [14] Штогрин М. И. Примитивные полициклы: критерий // УМН. 1999. Т. 54. № 6. С. 177–178.
- [15] Александров А. Д. Выпуклые многогранники. М.–Л.: Гостехиздат, 1950.
- [16] Dias J. R. Handbook of Polycyclic Hydrocarbons. Part B: Polycyclic Isomers and Heteroatom Analogs of Bensenoid Hydrocarbons: Elsevier, 1988.
- [17] Dress A., Brinkmann G. Phantasmagorical fulleroids // MATCH. 1996. V. 33. P. 87–100.
- [18] Hosoya H., Okuma Y., Tsukano Y., Nakada K. Multilayered cyclic fence graphs: novel cubic graphs related to the graphite network // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1995. V. 35. P. 351–356.
- [19] Császár A. A polyhedron without diagonals // Acta Sci. Math. 1949. V. 13. P. 140–142.
- [20] Nakamoto A. Irreducible quadrangulations of the torus // J. Combin. Theory. Ser. B. 1996. V. 67. P. 183–201.
- [21] Nakamoto A. Irreducible quadrangulations of the Klein bottle // Yokohama Math. J. 1995. V. 43. P. 125–139.
- [22] Balaban A. T. Chemical graphs: Looking back and glimpsing ahead // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1995. V. 35. № 3. P. 345.