МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАТИКИ
(Вычислительные системы)
1989 год Выпуск 130

УДК 519.1

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ЦИКЛОВ МАКСИМАЛЬНОЙ ДЛИНЫ В ГРАФАХ, СООТВЕТСТВУЮЩИХ СТРУКТУРНЫМ ФОРМУЛАМ ОДНОГО ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ КАРКАСНОГО ТИПА

М.Х.Клин, О.В.Лебедев, Т.С.Пивина

В работе решается задача перечисления циклов максимальной длины в графах, принадлежащих одной бесконечной серии. Графы P_n, $n \geq 2$, из этой серии имеют $6n$ вершин и представляют собой упрощенные структурные формулы полициклических соединений каркасного типа. Интерес к перечислению циклов максимальной длины мотивируется проблемами анализа применимости номенклатурных правил ИЮПАК.

На химическом уровне постановка рассматриваемой задачи возникла в ходе исследования, проведенного авторами статьи совместно с Л.В.Епишиной, Л.И.Суворовой, Т.Б.Марковой. В общих чертах эта постановка обсуждается в §1, более подробное изложение результатов проведенного исследования готовится к печати. В ходе этого исследования, в частности, на эвристическом уровне были описаны все максимальнозвенные циклы в первых членах серии и высказана гипотеза о том, как выглядят такие циклы для произвольного члена серии. Строгое математическое обоснование этой гипотезы и составляет основное содержание статьи. В § 2,3 приводятся необходимые сведения о графах и группах подстановок, дается математическая постановка задачи, рассматриваются простейшие свойства графов P_n. В §4 содержится описание всех циклов максимальной длины в P_n. В §5 изучается действие группы автоморфизмов графа P_n на множестве всех циклов максимальной длины и с помощью леммы Бернсайда подсчитывается количество таких попарно неизоморфных циклов.

Полученные результаты представляют, на наш взгляд, самостоятельный интерес в теории графов, они могут быть использованы при тестировании алгоритмов поиска циклов в графах, вычисления групп автоморфизмов графов и их орбит.

§1. Гомологический ряд полициклических соединений

В математической химии сложилась традиция изучения классов графов, включающих в себя графы, соответствующие структурным формулам синтезированных органических соединений. Укажем два примерз таких классов - полимино [1] и кубические графы [2] (количество ссылок может быть значительно большим). Эти исследования находят применения в химической информатике,в установлении связей "структура - свойство", они позволяют лучше очертить круг "химических графов", служат стимулом к поискам путей синтеза новых соединений.

В настоящей работе авторы обращают внимание на новую бесконечную однопараметрическую серию графов P_n, $n \geq 2$. Интерес к этим графам возник в связи с анализом применимости правил ИЮПАК для однозначной нумерации некоторых мостиковых полициклических соединений, а также в ходе рассмотрения хиральных объектов, при конфигурационном описании которых возникают те или иные сложности. Авторы обратили внимание на гомологический ряд структур, построенных из стопок бензольных колец,соединенных друг с другом в мета-положениях одинаковой длины полиметиленовыми цепочками (рис.1). Первые два члена данного ряда для нескольких значений m описаны (см., например [3]).

При наличии одного, и притом одного и того же заместителя "А", в каждом из двух "концевых" бензольных циклов и таком их

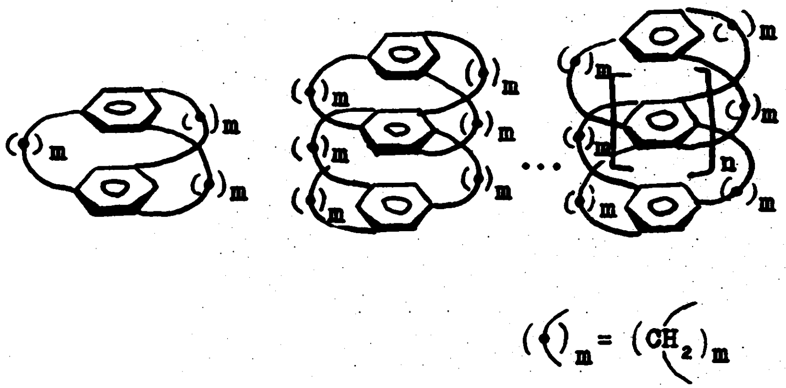


Рис. 1

расположении относительно друг друга, которое исключает появление в молекулах плоскостей симметрии, с ростом номера члена гомологического ряда (все они относятся к точечной группе симметрии C_2) существенно возрастает сложность конфигурационного описания энантиомеров по процедуре Кана-Ингольда-Прелога [4]. А именно, процедура послойного сравнения старшинства двух претендентов на роль пилотных атомов даже у второго члена ряда уже чрезмерно сложна. У последующих членов ряда она становится настолько громоздкой, что делает конфигурационное описание этих структур по системе [4] нецелесообразным.

В связи с этим представлялось рациональным попытаться воспользоваться для конфигурационного описания рассматриваемых энантиомеров альтернативной процедурой (см. [5]), для которой вообще не нужны пилотные атомы. При этом, однако, в более широком контексте возникает вопрос: возможна или нет по правилам ИЮПАК нумерационная однозначность в незамещенных гомологах данного ряда, построенных по принципу последовательного наращивания новых бензольных колец, как это отражено на рис.1.

Для однозначного названия мостиковых полициклических соединений вообще и, в частности, каркасного типа по номенклатурным правилам ИЮПАК [6] на первом этапе в них необходимо найти такой цикл, звенность которого (т.е. длина цикла - число входящих в него атомов) была бы максимальной. Когда число бензольных циклов в полициклической молекуле относительно невелико, эта задача решается на эвристическом уровне не слишком сложно - простым перебором всех возможных комбинаций. Если же это число n велико, то сложность задачи возрастает.

Для более строгой постановки этой задачи необходимо прежде всего представить изображения членов гомологического ряда в виде диаграмм плоского графа. Такие диаграммы могут быть легко получены при проектировании пространственных моделей гомологов в направлении оси, соединяющей центры всех входящих в систему бензольных колец, по правилам центральной прямой линейной перспективы [7]. Тогда первые четыре члена гомологического ряда приобретут вид, показанный на

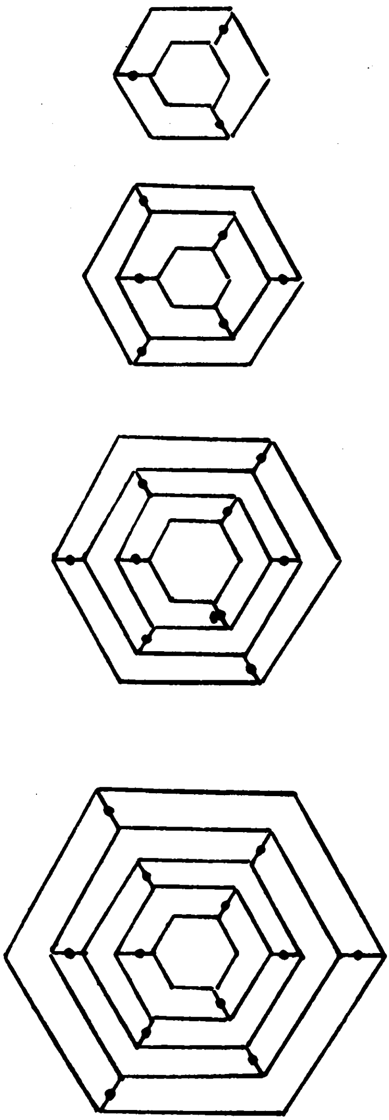


Рис. 2

рис. 2. Эти графы и являются первыми членами рассматриваемой далее серии (причем полиметиленовые цепочки ниже будут заменены на ребра, т.е. применена операция стягивания графов). Такое стягивание не влияет на структуру решений (см. замечание в конце §3), но зато упрощает постановку задачи.

Обращаем внимание читателя на то, что начало и конец доказательства математических утверждений обозначены знаками ◀ и ▶ соответственно.

§2. Предварительные сведения о графах и группах

Ниже свободно используется терминология и простейшие сведения из теории графов и теории групп. Для знакомства с используемым аппаратом читатель может обратиться к монографиям [8-10]. Здесь мы остановимся лишь на нескольких моментах, имеющих принципиальное значение.

Гамельтоновым циклом в графе называется простой цикл графа, включающий все его вершины. Если в графе с v вершинами не имеется гамильтонова цикла, но имеется цикл длины $v-1$, то такой цикл обычно называется гипогамильтоновым. Рассматриваемые графы имеют четное число вершин и являются двудольными. Хорошо известно (см., например, [8]), что любой цикл в двудольном графе имеет четную длину. Поэтому если рассматриваемый граф не содержит гамильтонова цикла, то он может содержать только простой цикл длины $v-2$ - такой цикл, если он существует, мы также будем называть гипогамильтоновым.

Группа подстановок в соответствии с [10] трактуется как пара (G,N) , где G - группа, N - множество и G действует на множестве N . Действие подстановки $g \in G$ на элемент $x \in N$ обозначается через x^g. Будет использована лемма Бернсайда (правильнее ее называть леммой Коши-Фробениуса-Бернсайда, см. [11-12]), которая утверждает, что количество $o(G)$ орбит группы (G, N) на множестве N может быть вычислено по формуле

$$o(G) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(g),$$

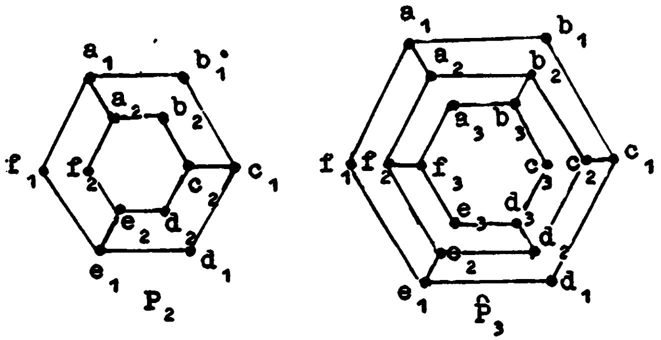
где $\chi(g)$ - характер подстановки g, т.е. количество элементов N, фиксируемых (оставляемых на месте) подстановкой g.

На самом деле лемма Бернсайда будет применена не к исходной группе (в нашем случае группе $S_3 \times S_2$), а к новой индуцированной группе подстановок, полученной в два этапа: сначала рассматривается элемент λ из абстрактной группы диэдра, затем - действие на множестве вершин одного из графов и, наконец, на множестве гипогамильтоновых циклов исследуемого графа. В этих случаях индуцированные подстановки отличаются от исходного элемента с помощью индекса и знака $\sim$. Используемая нами схема применения леммы Бернсайда подробно изложена в [12], где также можно найти элементарные сведения о группах подстановок и группах автоморфизмов графов.

Наконец, отметим, что два цикла одинаковой длины в графе Γ мы называем изоморфными,если один цикл может быть переведен в другой с помощью подстановки, являющейся автоморфизмом графа Γ. В противном случае циклы называются неизоморфными.Таким образом, в данном контексте термин "изоморфизм" означает одинаковое расположение циклов в графе (циклы одинаковой длины,взятые сами по себе, вне Γ, конечно, всегда изоморфны как графы).

§3. Графы P_n и некоторые их свойства

Введем в рассмотрение семейство графов, которые мы будем называть n-слойными стопками и обозначать символом P_n. Граф P_n имеет $6n$ вершин, эти вершины расположены в n слоях (этажах), нумерованных числами $1, 2, \ldots, n$. Вершины из каждого слоя порождают цикл длины 6. В каждом из таких циклов имеется две тройки вершин, образующих пустые подграфы, будем называть их пустыми тройками. Кроме ребер, входящих в циклы на каждом слое, имеются еще по три ребра между соседними слоями. Эти ребра соединяют вершины из пустой тройки i-го слоя с соответствующими вершинами одной из пустых троек $i+1$-го слоя, причем если с $(i-1)$-м слоем соединена одна из пустых троек i-го слоя, то с $(i+1)$-м слоем соединена другая пустая тройка. В итоге все вершины из 2-го, 3-го,..., $(n-1)$-го слоев, а также по 3 вершины из 1-го и n-го слоя имеют валентность 3, остальные 6 вершин (из 1-го и n-го слоя) имеют валентность 2. Наконец, соответствие между вершинами i-го и $(i+1)$-го слоя выбирается так, чтобы весь граф был инвариантен относительно симметрической группы S_3 по-



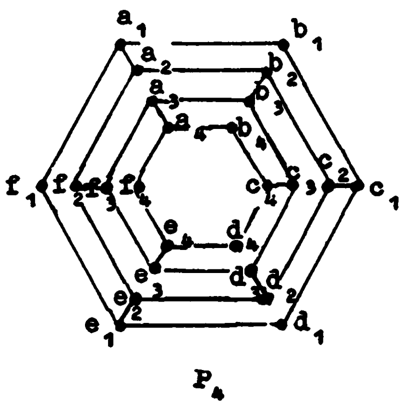


Рис. 3

рядка 6, перемещающей вершины внутри каждой пустой тройки. Диаграммы графов P_2, P_3, P_4 приведены на рис. 3.

Приведенное описание графов P_n в содержательных терминах весьма громоздко, поэтому мы приведем также формальное описание этих графов.

Пусть $L = \{a,b,c,d,e,f\}$, $N = N(n) = \{1,2,\ldots,n\}$, тогда положим $P_n = (V(P_n), E(P_n))$, здесь

$$V(P_n) = L \times N,$$

$$E(P_n) = (\bigcup_{i=1}^{n} R_i) \cup (\bigcup_{i=1}^{n-1} Q_i) ,$$

где

$$R_i = \{[a_i,b_i],[b_i,c_i],[c_i,d_i],[d_i,e_i],$$
$$[e_i,f_i],[f_i,a_i]\},$$

$$Q_i = \begin{cases} \{[a_i,a_{i+1}],[c_i,c_{i+1}],[e_i,e_{i+1}]\}, \\ \qquad\qquad \text{если} \quad i = 2k-1; \\ \{[b_i,b_{i+1}],[d_i,d_{i+1}],[f_i,f_{i+1}]\}, \\ \qquad\qquad \text{если} \quad i = 2k. \end{cases}$$

Для простоты обозначим (x,i) через x_i, кроме того, будем использовать обозначение $L_i = L \times \{i\}$, так что $L_i = \{a_i,b_i,c_i,d_i,e_i,f_i\}$. Ребра из множества Q_i далее будем называть перегородками.

Опишем прежде всего симметрию графов P_n. Удобно будет отождествлять 6-вершинный цикл с графом P_1 - первым членом серии P_n. Очевидно, $Aut(P_1) = D_6$, где D_6 - группа диэдра порядка 12. Напомним, что $D_6 \cong S_3 \times S_2$.

ЛЕММА 1. *При* $n \geq 1$

$$\mathrm{Aut}(P_n) \geq S_3 \times S_2 .$$

◀ При $n=1$ лемма верна, пусть $n \geq 2$.

Введем в рассмотрение три подстановки на множестве $V(P_n)$:

$$g_n = \begin{pmatrix} a_1 b_1 c_1 d_1 e_1 f_1 a_2 b_2 c_2 d_2 e_2 f_2 \ldots \\ c_1 d_1 e_1 f_1 a_1 b_1 c_2 d_2 e_2 f_2 a_2 b_2 \ldots \end{pmatrix},$$

$$h_n = \begin{pmatrix} a_1 b_1 c_1 d_1 e_1 f_1 a_2 b_2 c_2 d_2 e_2 f_2 \ldots \\ a_1 f_1 e_1 d_1 c_1 b_1 a_2 f_2 e_2 d_2 c_2 b_2 \ldots \end{pmatrix},$$

$$\tau_n = \begin{pmatrix} a_1 b_1 c_1 d_1 e_1 f_1 a_2 \; b_2 \; c_2 \; d_2 \; e_2 \; f_2 \ldots \\ \ldots a_n b_n c_n d_n e_n f_n \\ a_n b_n c_n d_n e_n f_n a_{n-1} b_{n-1} c_{n-1} d_{n-1} e_{n-1} f_{n-1} \ldots \\ \ldots a_1 b_1 c_1 d_1 e_1 f_1 \end{pmatrix},$$

если $n = 2k$,

$$\tau_n = \begin{pmatrix} a_1 b_1 c_1 d_1 e_1 f_1 a_2 \; b_2 \; c_2 \; d_2 \; e_2 \; f_2 \ldots \\ \ldots a_n b_n c_n d_n e_n f_n \\ d_n e_n f_n a_n b_n c_n d_{n-1} e_{n-1} f_{n-1} a_{n-1} b_{n-1} c_{n-1} \ldots \\ \ldots d_1 e_1 f_1 a_1 b_1 c_1 \end{pmatrix},$$

если $n = 2k+1$.

Используя приведенное выше формальное описание графов P_n , нетрудно убедиться в том, что g_n, h_n, τ_n являются автоморфизмами графа P_n . Поскольку, очевидно, $\langle g_n, h_n \rangle \cong S_3$, а τ_n перестановочна с g_n и h_n , имеем $\langle g_n\ h_n ,\ \tau_n \rangle \cong S_3 \times S_2$, так что $\mathrm{Aut}(P_n) \geq S_3 \times S_2$. ▶

Теперь для описания симметрий графов P_n осталось доказать, что никаких других автоморфизмов, кроме подстановок из группы $S_3 \times S_2$, действующей на $V(P_n)$, графы P_n не имеют.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *При* $n \geq 1$

$$Aut(P_n) \cong S_3 \times S_2 .$$

◀ Доказательство проведем методом математической индукции. При этом будем использовать лемму 1. В качестве базы индукции рассмотрим $n = 1$ и $n = 2$.

При $n = 1$ предложение верно. При $n = 2$ доказательство нетрудно провести, используя, например, граф P_2^*, двойственный к плоскому графу P_2. Пять вершин графа P_2^* соответствуют 6-вершинным циклам графа P_2 - граням его плоского изображения (см.рис. 3). Легко видеть, что $Aut(P_2^*) = S_3 \times S_2$. Затем показываем, что $Aut(P_2^*) \cong Aut(P_2)$.

Теперь проведем индукционный шаг. Пусть для P_{n-1}, $n \geq 2$, доказано, что $Aut(P_{n-1}) \cong S_3 \times S_2$. Рассмотрим граф P_{n+1}. В этом графе только 6 вершин имеют валентность 2. Прямая проверка показывает, что эти 6 вершин образуют одну орбиту группы $G = S_3 \times S_2$ - подгруппы $Aut(P_{n+1})$. Шесть вершин валентности 3 из первого и последнего слоя характеризуются следующим свойством. Они имеют по 2 соседних вершины валентности 2; эти 6 вершин также образуют орбиту группы G. Отбросив указанные выше 12 вершин и смежные им ребра, мы получим граф P_{n-1}, причем каждый изоморфизм графа P_{n+1} определяет и автоморфизм графа P_{n-1}. Значит, $Aut(P_{n-1}) \cong$ $\cong K\leftthreetimes(S_3 \times S_2)$, где K - подгруппа группы $Aut(P_{n-1})$, оставляющая на месте каждую вершину первого и последнего слоя. Подгруппа K одновременно является и подгруппой группы $Aut(P_{n-1})$, где P_{n-1} получен отбрасыванием первого и последнего слоя. По предположению индукции, $Aut(P_{n-1}) \cong$ $\cong S_3 \times S_2$, причем $Aut(P_{n-1})$ действует диагонально на множестве вершин графа P_{n-1} и множестве вершин $L_1 \cup L_{n-1}$. Поэтому диагонально действует на этих множествах и подгруппа

K группы $Aut(P_{n-1})$. По определению, K действует на $L_1 \cup L_{n+1}$ как единичная группа, значит, $K = \{\varepsilon\}$, так что $Aut(P_{n+1}) \cong S_3 \times S_2$. ▶

Для характеризации циклов в P_n полезно использовать следующее простое

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. *Граф* P_n *двудольный.*

◀ Представим $V(P_n)$ в виде $V' \cup V''$, где

$$V' = \{a_1, c_1, e_1, b_2, d_2, f_2, a_3, c_3, e_3, \ldots\},$$

$$V'' = \{b_1, d_1, f_1, a_2, c_2, e_2, b_3, d_3, f_3, \ldots\}.$$

Из описания графа следует, что любое ребро графа соединяет некоторую вершину из V' с некоторой вершиной из V''. Теперь двудольность следует из того, что $V' \cap V'' = \emptyset$. ▶

СЛЕДСТВИЕ. *Всякий цикл графа* P_n *имеет четную длину.*

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 3. *При* $n \geq 2$ *граф* P_n *не является гамильтоновым.*

◀ Допустим от противного, что в графе P_n существует гамильтонов цикл Z. Тогда этот цикл проходит через все 6 вершин слоя L_1, в частности, через вершины b_1, d_1, f_1; поскольку эти вершины имеют валентность 2, цикл Z проходит через все ребра слоя L_1. Пришли к противоречию, так как получили, что простой цикл Z содержит простой подцикл длины 6 (подграф, натянутый на слой L_1). ▶

Учитывая двудольность графа P_n, получаем

СЛЕДСТВИЕ. *Всякий цикл в* P_n *имеет длину не более* $6n - 2$.

Напомним, что мы условились называть циклы длины $m-2$ в m-вершинном двудольном графе (m — четное) гипогамильтоновыми.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4. *Пусть* Z *- гипогамильтонов цикл в* P_n *, тогда* Z *один раз проходит через 4 ребра слоев* L_1, L_n *и по два раза через ребра слоев* $L_2, \ldots$ $\ldots, L_{n-1}$*: один раз через одно ребро, а другой раз - через 3 ребра.*

◄ Из доказательства предложения 3 следует, что Z не проходит через одну вершину слоя L_1 и через одну вершину слоя L_n . Значит, Z проходит через все вершины слоев $L_2, \ldots, L_{n-1}$. Причем Z - это замкнутый маршрут, который проходит через $6n-2$ ребер графа P_n , часть этих ребер соединяет вершины из одного и того же слоя, а часть является перегородками. Поскольку два соседних слоя соединены только тремя перегородками, Z проходит через две таких перегородки, а в совокупности через $2(n-1)$ перегородок. Зафиксируем одну из вершин цикла Z и объявим ее первой. Пусть это будет вершина слоя L_1 , соединенная перегородкой со слоем L_2 . Тогда цикл Z делает нечетное число шагов по слою L_2 , проходит через перегородку между слоями L_2 и L_3 и т.д., доходит до слоя L_n , делает по нему 4 шага, проходит через перегородку между L_n и L_{n-1} , делает нечетное число шагов по L_{n-1} и т.д., возвращается в слой L_1 . Итак, цикл Z проходит по 4 ребрам слоев L_1 и L_n и дважды по нечетному числу ребер в слоях $L_2, \ldots, L_{n-1}$. Значит, в итоге Z проходит через четное число ребер в слоях $L_2, \ldots, L_{n-1}$, причем суммарно через $4(n-2)$ ребер. Учитывая, что ни через один слой цикл не проходит по 6 ребрам, получаем, что цикл проходит через 4 ребра каждого из слоев $L_2, \ldots, L_{n-1}$. ►

ЗАМЕЧАНИЕ. Если каждую перегородку графа P_n заменить на цепь одной и той же длины k , то, как следует из доказательства предложения 4, структура циклов максимальной длины не изменится. Поэтому для реализации поставленных в §1 целей достаточно описать все гипогамильтоновы циклы в P_n .

§4. Описание гипогамильтоновых циклов в P_n

В предыдущем параграфе были найдены необходимые условия, которым должен удовлетворять произвольный гипогамильтонов цикл в P_n (если такие циклы вообще существуют). Здесь будет доказано, что гипогамильтоновы циклы действительно существуют, все они будут полностью описаны.

Введем сначала удобную для дальнейших исследований систему кодирования циклов. Будем считать, что у нас задано плоское изображение графа P_n в виде диаграммы графа. Слоям $L_1, \ldots$ $\ldots, L_n$ на такой диаграмме соответствует система концентрических шестиугольников, причем вершины $x_1, x_2, \ldots, x_n$, где $x \in \{a, b, c, d, e, f\}$, расположены на одном и том же "радиусе". Слой L_1 является внешним, а слой L_n – внутренним шестиугольниками в диаграмме. Примеры таких диаграмм для $n = 2$, 3,4 были приведены ранее на рис. 3. Когда плоская диаграмма графа P_n задана, мы можем различать два направления движения - положительное и отрицательное по каждому из подграфов L_i, $1 \le i \le n$. Договоримся, например, что плюс соответствует движению по часовой стрелке, а минус - движению против часовой стрелки.

Сделаем одно важное замечание, которое будет позднее использоваться в наших рассмотрениях. Определенные в пункте 3 подстановки g_n, h_n, τ_n на множестве $V(P_n)$ обладают следующим свойством: для каждого слоя L_i, $1 \le i \le n$, ориентация цикла, порожденного слоем L_i, сохраняется при действии подстановок g_n, τ_n (т.е. совпадает с ориентацией образа этого цикла) и меняется на противоположную при действии подстановок h_n.

Пусть теперь Z - некоторый гипогамильтонов цикл в P_n. Этот цикл проходит через две внешних и две внутренних вершины, соединенных перегородками с вершинами следующих слоев, далее будем показывать их крайними, пусть x – одна из таких вершин. Тогда движение по циклу Z, начиная с крайней вершины x, может быть осуществлено (согласно предложению 4) таким способом: по перегородке из x переходим в следующий слой, делаем p_2 шагов по этому слою, затем по перегородке переходим в следующий слой, по которому делаем p_3 шагов и т.д., делаем p_n шагов по последнему слою, затем по перегородке возвращаемся в предпоследний слой, по которому делаем q_{n-1} шагов, и т.д. пока не возвращаемся в исходный цикл, по которому делаем q_1 шагов и приходим опять в крайнюю вершину x .

В итоге получаем, что цикл Z можно закодировать следующим вектором $C_x(Z) = (p_2, p_3, \ldots, p_{n-1}, p_n; q_{n-1}, q_{n-2}, \ldots$ $\ldots, q_2, q_1)$. При этом цикл Z однозначно восстанавливается по значению x и самому коду. Отметим сразу же, что все составляющие кода - целые числа, причем $|p_n| = |q_1| = 4$, $|p_i|, |q_i| \in \{1,3\}, |p_i| + |q_i| = 4$ для $2 \le i \le n-1$. В дальнейшем, для большей наглядности, мы будем иногда пользоваться следующим изображением кода:

$$\begin{array}{cccccc} p_2, & p_3, & \ldots, & p_{n-1}, & p_n & \\ | & & & & | & \\ q_1, & q_2, & q_3, & \ldots, & q_{n-1}, & \end{array}$$

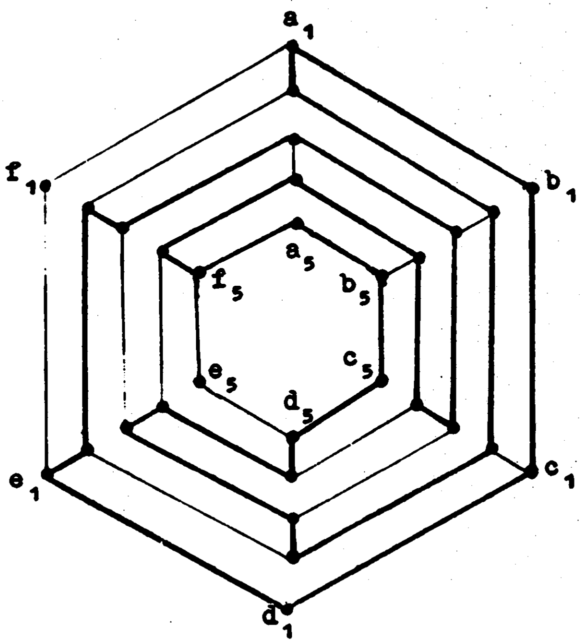
чтобы подчеркнуть его циклический характер.

ПРИМЕР. На рис.4 изображены граф P_5 , цикл Z на этом графе, а также его код $C_{a_1}(Z)$.

Отметим сразу же, что изображенный на рис.4 гипогамильтонов цикл может быть закодирован еще тремя другими способами, а именно относительно вершин e_1, f_5 и d_5 . Все эти вершины также лежат на рассматриваемом цикле Z , принадлежат либо внешнему, либо внутреннему слою, из них идет перегородка в следующий за данным слой (т.е. являются крайними). Приведем соответствующие значения кодов:

$$C_{e_1}(Z) = (+1, +3, -3, +4; +1, -1, -3, +4),$$

$$C_{f_5}(Z) = (+3,\ -3,\ -1,\ -4;\ +3,\ +1,\ -1,\ -4),$$
$$C_{d_5}(Z) = (+1,\ -1,\ -3,\ +4;\ +1,\ +3,\ -3,\ +4).$$



$$\begin{array}{l} \quad\quad\quad\quad\ \ +3,+1,-1,-4 \\ C_{a_1}(Z)=-4,-1,-3,+3 \end{array}$$

Рис. 4

Подмеченная на рассмотренном примере закономерность легко обобщается на случай произвольного числа слоев. Пусть x - крайняя вершина внешнего слоя, u, v - крайние вершины внутреннего слоя, причем путь по Z из x сразу же через перегородку к внутреннему слою проходит сначала через вершину u, а затем через вершину $\mathbf{v}$. Тогда крайние вершины $\mathbf{x}$ и $\mathbf{v}$ будем называть оппозиционными вершинами цикла.

ЗАМЕЧАНИЕ. Оппозиционные вершины не обязательно являются диаметрально противоположными вершинами цикла, это не внутренняя характеристика вершин в цикле, а характеристика расположения вершин цикла в графе. Однако в некоторых рассматриваемых ниже ситуациях, когда цикл инвариантен относительно определенных подстановок, эти два понятия совпадают.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 5. *Пусть* $\mathbf{Z}$ - *гипогамильтонов цикл в графе* $\mathbf{P}_n$, $\mathbf{x},\mathbf{y}$ - *крайние вершины в* $\mathbf{Z}$ *из внешнего слоя,* $\mathbf{u},\mathbf{v}$ - *крайние вершины из внутреннего слоя, причем* $\mathbf{x},\mathbf{v}$ - *оппозиционные вершины. Пусть* $C_x(Z) = (p_2,p_3,\ldots,p_n;\ q_{n-1},\ldots,q_2,q_1)$, *тогда*

$$C_v(Z) = (q_{n-1},q_{n-2},\ldots,q_2,q_1;p_2,p_3,\ldots,p_{n-1},p_n),$$

$$C_u(Z) = (-p_{n-1},-p_{n-2},\ldots,-p_3,-p_2,-q_1;-q_2,\ldots \\ \ldots,-q_{n-1},-p_n),$$

$$C_y(Z) = (-q_2,-q_3,\ldots,-q_{n-2},-q_{n-1},-p_n;-p_{n-1},\ldots \\ \ldots,-p_3,-p_2,-q_1).$$

◀ Представим код $C_x(Z)$ в циклическом виде и обозначим на нем позиции, соответствующие крайним точкам:

$$\begin{array}{l} \quad \mathbf{x}\rightarrow \qquad\qquad\quad \leftarrow\mathbf{u} \\ \quad p_2,\ p_3,\ldots,\ p_{n-1},\ p_n \\ \ \ / \qquad\qquad\qquad\qquad / \\ q_1,\ q_2,\ldots,\ q_{n-2},\ q_{n-1} \\ \quad \mathbf{y}\rightarrow \qquad\qquad\quad \leftarrow\mathbf{v} \end{array}$$

Эти позиции обозначены символом самой крайней точки и стрелкой. Стрелка показывает направление движения по циклу в случае, когда код цикла строится по данной крайней точке. Теперь для обоснования искомых формул достаточно учесть, что при изменении направления обхода цикла знак чисел p_i, q_i меняется на противоположный. ▶

Перейдем теперь к доказательству существования гипогамильтоновых циклов в графах P_n. Последовательность $(p_2, p_3, \ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1)$ целых чисел назовем реализуемой, если в P_n существуют такой цикл Z и такая крайняя вершина x этого цикла, что

$$C_x(Z) = (p_2, p_3, \ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1).$$

ЛЕММА 2. *Пусть* $(p_2, p_3, \ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1)$ – *реализуемая последовательность, тогда она удовлетворяет следующим условия:*

α) $p_i, q_i \in \{\pm1, \pm3\}$

при $2 \le i \le n-1$, $p_n, q_1 \in \{-4, 4\}$;

β) $|p_i| = |p_{i+1}| \Leftrightarrow \operatorname{sgn}(p_i) = -\operatorname{sgn}(p_{i+1})$

при $2 \le i \le n-2$;

γ) $q_i = -\operatorname{sgn}(p_i)(4 - |p_i|)$ при $2 \le i \le n-1$;

δ)
$$p_n = \begin{cases} -4, & \text{если } p_{n-1} \in \{-1, +3\}; \\ +4, & \text{если } p_{n-1} \in \{+1, -3\}; \end{cases}$$

$$q_1 = \begin{cases} -4, & \text{если } q_2 \in \{-1, +3\}; \\ +4, & \text{если } q_2 \in \{+1, -3\}. \end{cases}$$

◄ Условие "α" содержится в предложении 4. Там же показано, что $|q_i| = 4 - |p_i|$ при $2 \le i \le n-1$.

Докажем полностью условие "γ". Пусть, например, $p_i = 3$, тогда фрагмент цикла Z, реализующего последовательность, выглядит так, как это показано на рис.5 (стрелка указывает выбранное направление движения по циклу). Тогда при возвращении назад мы можем попасть из слоя L_{i+1} в слой L_i только по одной вполне определенной перегородке (она обозначена штрихами), после чего движение по слою L_i возможно только на один

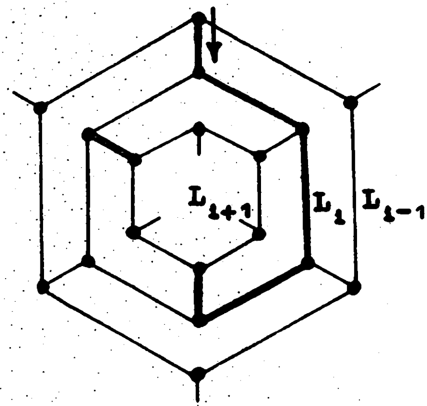


Рис. 5

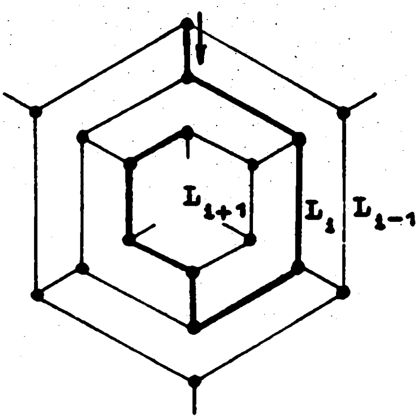


Рис. 6

шаг против часовой стрелки, так что $q_i = -1$. Аналогично рассматриваются три других возможных значения p_i .

Перейдем к доказательству условия "β". Пусть сначала $|p_i| = |p_{i+1}| = 3$. Не ограничивая общности, предположим, что $p_i = 3$. Допустим от противного, что $p_{i+1} = 3$, тогда имеет место ситуация, изображенная на рис. 6. Теперь при движении назад мы должны возвратиться из слоя L_{i+1} в слой L_i ; однако для этого нельзя использовать ни одну из двух непройденных перегородок между этими слоями. Значит, $p_{i+1} = 3$ невозможно, так что $p_{i+1} = -3$. Пусть теперь $|p_i| = |p_{i+1}| = 1$, тогда, используя условие "γ", получаем, что $|q_i| = |q_{i+1}| = 3$, отсюда $sgn(q_i) = -sgn(q_{i+1})$, отсюда, опять используя условие "γ", получаем $sgn(p_i) = -sgn(p_{i+1})$. Итак, импликация "слева → направо" в условии "β" полностью доказана. Пусть теперь $|p_i| \neq |p_{i+1}|$ и пусть сначала $|p_i| = 3$. Вновь, не ограничивая общности, полагаем $p_i = 3$. Теперь надо исключить случай $p_{i+1} = -1$. Для этого рассмотрим рис. 7. Здесь мы можем возвратиться из слоя L_{i+1} в слой L_i только по перегородке, связанной с вершиной, помеченной знаком ■. Однако тогда остается не пройденной в цикле Z одна из двух вершин слоя L_{i+1},

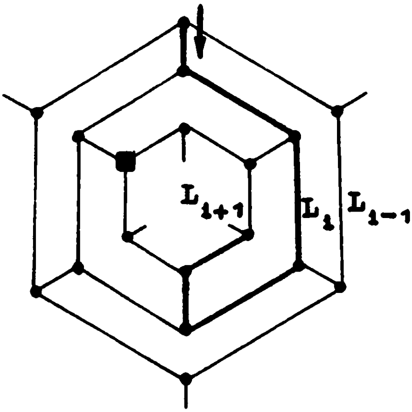


Рис. 7

связанных с этой вершиной. Значит, в этом случае $p_{i+1} = 1$. Случай $|p_i| = 1$ рассматривается аналогично с использованием условия "γ", таким образом, условие "β" полностью доказано.

Первая часть условия "δ" в случае, когда $p_{n-1} = 3$, легко усматривается на рис. 8. В самом деле, если $p_n = 4$,

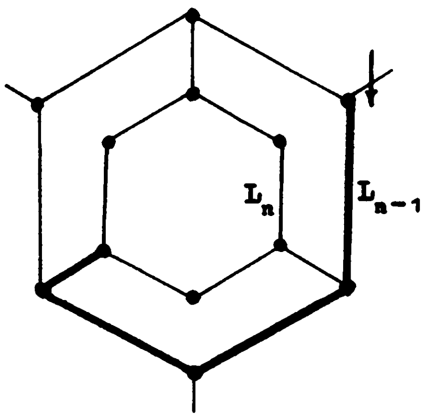


Рис.8

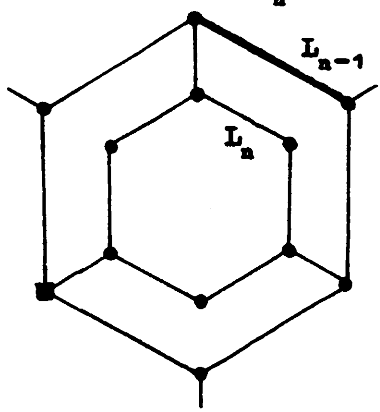


Рис.9

мы не сможем вернуться из слоя L_n в слой L_{n-1} . Пусть теперь $p_{n-1} = -1$, тогда обратимся к рис. 9. Здесь, предполагая, что $p_n = 4$, мы возвращаемся из слоя L_n в слой L_{n-1} через перегородку в вершине, помеченной ■, а затем неизбежно оставляем незатронутыми циклом две вершины из слоя L_{n-1} . Вторая часть условия "δ" также доказывается с использованием условия "γ". ▶

Таким образом, нами доказаны необходимые условия существования гипогамильтонова цикла в P_n . Оказывается, эти условия являются и достаточными.

ЛЕММА 3. *Пусть последовательность* $(p_2, p_3, \ldots$ $\ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1)$ *удовлетворяет условиям* "α"-"δ", *приведенным в формулировке леммы 2, тогда она реализуема как код некоторого гипогамильтонова цикла* Z *в графе* P_n .

◀ Зафиксируем какую-либо вершину на внешнем цикле в качестве крайней и начнем строить цикл Z в соответствии с составляющими кода. Условия "α" гарантируют, что никаких препятствий на прямом участке пути (от внешнего к внутреннему циклу) не возникнет. Рассматривая рисунки, аналогичные рисункам 5-9, нетрудно убедиться, что выполнение условий "β"-"δ" при конкретном значении i гарантирует каждый раз возможность продолжения гипогамильтонова цикла по i-у слою при движении на обратном пути. Поэтому в конечном счете будет построен искомый цикл из $6n-2$ вершин. ▶

ТЕОРЕМА 1. *При* $n \geq 2$ *в графе* P_n *содержится в точности* $3 \cdot 2^{n-2}$ *различных гипогамильтоновых циклов.*

◀ Подсчитаем количество последовательностей, удовлетворяющих условиям "α"-"δ". Из условий "γ", "δ" следует, что каждая такая последовательность полностью определяется значениями $p_2, p_3, \ldots, p_{n-1}$. Из условия "$\alpha$" следует, что значение

P_2 может быть выбрано 4 способами. Из условий "β" следует, что значение p_i, $2 \le i \le n-1$, после того, как выбрано значение p_{i-1}, может быть выбрано 2 способами. Всего получаем, таким образом, $4 \cdot 2^{n-3}$ последовательностей, удовлетворяющих условиям "α"–"δ". Эти и только эти последовательности являются реализуемыми, согласно леммам 2 и 3. При этом каждая реализуемая последовательность может быть реализована, начиная с одной из 6 вершин валентности 3, лежащих на внешнем и внутреннем слоях. Наконец, каждый гипогамильтонов цикл может быть, согласно предложению 5, закодирован четырьмя способами, в зависимости от выбора крайней вершины. Поэтому всего имеется $6 \cdot 4 \cdot 2^{n-3}/4 = 3 \cdot 2^{n-2}$ различных гипогамильтоновых циклов в графе P_n. ▶

Таким образом, мы показали, что в P_n при $n \ge 2$ имеются гипогамильтоновы циклы, причем их количество растет экспоненциально с увеличением n. Осталось теперь научиться подсчитывать количество попарно неизоморфных циклов, т.е. циклов, по-разному расположенных в P_n.

§5. Подсчет количества неизоморфных гипогамильтоновых циклов

Обозначим через Ω_n множество всех гипогамильтоновых циклов в графе P_n. Выше было доказано, что $|\Omega_n| = 3 \cdot 2^{n-2}$. Пусть $G = \mathrm{Aut}(P_n)$. Каждый автоморфизм графа P_n переводит любой гипогамильтонов цикл в какой-то другой гипогамильтонов цикл. Поэтому корректно определено индуцированное действие $(\tilde{G}, \Omega_n)$ группы G на множестве Ω_n. Для подсчета количества попарно неизоморфных гипогамильтоновых циклов следует применить лемму Бернсайда к группе подстановок $(\tilde{G}, \Omega_n)$. Мы будем применять лемму Бернсайда по следующей схеме: перечислим все элементы группы G и для каждого элемента вычислим характер его индуцированного действия на Ω_n. При этом учтем, что элементы из одного и того же класса сопряженных элементов имеют одно и то же значение характера при любом индуцировании. Кроме того, учтем, что подстановка $\lambda \in G$ тогда и только тогда переводит цикл Z из Ω_n в себя, когда λ_n есть автоморфизм Z. Напомним (см.§3), что $G \cong S_3 \times S_2$. В группе S_3 – три класса сопряженных элементов: единичная подстановка, три подстановки порядка 2 и две подстановки порядка 3. Пусть ε_n - единичная подстановка, действующая на P_n, g_n, h_n - подстановки порядка 3 и 2 соответственно, определенные в пункте 3. Пусть, наконец, τ_n - подстановка порядка 2, там же определенная. Тогда сведения о всех классах сопряженных элементов в группе G, их представителях и мощности приведены соответственно в первом, втором и третьем столбцах таблицы.

Т а б л и ц а

№ пп	Представитель класса	Мощность класса	Характер индуцированного действия при		
			$n = 2$	$n = 2k$	$n=2k+1$
1	ε_n	1	3	$3\cdot 2^{2k-2}$	$3\cdot 2^{2k-1}$
2	g_n	2	0	0	0
3	h_n	3	1	0	0
4	τ_n	1	3	$3\cdot 2^{k-1}$	0
5	$g_n \cdot \tau_n$	2	0	0	0
6	$h_n \cdot \tau_n$	3	1	2^{k-1}	2^k

Рассмотрим сначала случай $n = 2$. Здесь имеется три цикла:

$$Z_{2,1} = (a_1, b_1, c_1, d_1, e_1, e_2, d_2, c_2, b_2, a_2),$$
$$Z_{2,2} = (e_1, f_1, a_1, b_1, c_1, c_2, b_2, a_2, f_2, e_2),$$
$$Z_{2,3} = (c_1, d_1, e_1, f_1, a_1, a_2, f_2, e_2, d_2, c_2).$$

Единичная подстановка ε_2 , очевидно, переводит каждый из трех циклов в себя, так что $\chi(\tilde{\varepsilon}_2) = 3$. Поскольку подстановка g_2 имеет порядок 3, она не может являться автоморфизмом цикла длины 10, так что $\chi(\tilde{g}_2) = 0$. Подстановка h_2 оставляет на месте вершины d_1 и d_2 , отсюда нетрудно заметить, что $\tilde{h}_2$ переводит цикл $Z_{2,2}$ в себя и переводит циклы $Z_{2,1}$ и $Z_{2,3}$ друг в друга, так что $\chi(\tilde{h}_2) = 1$.Подстановка τ_2 меняет местами все соответствующие вершины внешнего и внутреннего слоев. По этой причине $\tilde{\tau}_2$ переводит в себя каждый из трех циклов, т.е. $\chi(\tilde{\tau}_2) = 3$. По этой же причине $\chi(\tilde{g}_2)= \chi(\tilde{g}_2 \cdot \tilde{\tau}_2)$ и $\chi(\tilde{h}_2) = \chi(\tilde{h}_2 \cdot \tilde{\tau}_2)$.Тем самым полностью обоснованы все числовые значения, приведенные в четвертом столбце таблицы. Теперь можно непосредственно применять лемму Бернсайда для подсчета количества $\sigma(2)$ попарно неизоморфных гипогамильтоновых циклов:

$$\sigma(2) = \frac{1}{12}(\chi(\tilde{\varepsilon}_2) + 2\chi(\tilde{g}_2) + 3\chi(\tilde{h}_2) + \chi(\tilde{\tau}_2) +$$

$$+ 2\chi(\tilde{g}_2 \cdot \tilde{\tau}_2) + 3\chi(\tilde{h}_2 \cdot \tilde{\tau}_2) =$$

$$= \frac{1}{12}(3+0+3+3+0+3) = \frac{12}{12} = 1 .$$

Таким образом, мы строго обосновали тот изначально очевидный факт, что все три цикла изоморфно вложены в граф P_2 , т.е. находятся в одной орбите индуцированного действия группы $\mathrm{Aut}(P_2)$. Так что приведенные вычисления можно рассматривать как первоначальную иллюстрацию леммы Бернсайда.

В случае произвольного n реализовать приведенную выше схему в полном объеме не удастся, так как мощность множества Ω_n резко возрастает при увеличении n . Поэтому мы используем введенную в §4 кодировку элементов Ω_n и для вычисления значений характеров индуцированных подстановок из G =

$= \mathrm{Aut}(P_n)$. Вычисления будем проводить отдельно для четных и нечетных значений n , так как вид τ_n зависит от четности числа n .

ЛЕММА 4. *Пусть* $n = 2k, k > 1$, *тогда* $\chi(\tilde{\varepsilon}_n) = 3\cdot 2^{2k-2}$, $\chi(\tilde{\tau}_n) = 3\cdot 2^{k-1}$, $\chi(\tilde{h}_n\cdot\tilde{\tau}_n) = 2^{k-1}$, $\chi(\tilde{g}_n) = \chi(\tilde{h}_n) = \chi(\tilde{g}_n\cdot\tilde{\tau}_n) = 0$.

◀ Формулы для $\chi(\tilde{\varepsilon}_n)$ следуют немедленно из теоремы 1. Так как g_n имеет порядок 3, она не может являться автоморфизмом цикла длины $6n-2$, так что $\chi(\tilde{g}_n) = 0$. Аналогичные рассуждения показывают, что $\chi(\tilde{g}_n\cdot\tilde{\tau}_n) = 0$. Пусть теперь $\lambda \in S_3 \times S_2$, $\lambda \neq \varepsilon$ и $\chi(\tilde{\lambda}_n) \neq 0$. Это означает, что существует хотя бы один такой цикл $Z \in \Omega_n$, что подстановка λ_n порождает автоморфизм графа Z (если граф Z рассматривать сам по себе). Кроме того, действие λ_n сохраняет любые особенности расположения графа Z в P_n (с точностью до ориентации графа на плоскости), поскольку одновременно $\lambda_n \in \mathrm{Aut}(P_n)$. В частности, λ_n должна переводить множество $\{x, y, u, v\}$ из четырех крайних вершин цикла Z в себя. Если при этом две вершины из множества $\{x, y, u, v\}$ находятся в одной орбите подстановки λ_n , то коды цикла Z , построенные по этим вершинам, либо совпадают, либо получаются друг из друга умножением на -1 (в зависимости от того, сохраняет подстановка λ_n ориентацию слоев L_i графа P_n или меняет ее на противоположную). Далее мы считаем, что обозначения для вершин x, y, u, v выбрана так же, как это сделано в §4. Рассмотрим оставшиеся три принципиально различные возможности для λ_n .

Пусть $\lambda = h$. Тогда $x^{h_n} = y$, $y^{h_n} = x$, $u^{h_n} = v$, $v^{h_n} = u$. Поскольку h_n переводит цикл Z в себя, имеем

$C_{x^{h_n}}(Z^{h_n}) = C_x(Z)$. С другой стороны, поскольку $x^{h_n} = y$ и ориентация слоев L_i изменяема, то получаем $C_{x^{h_n}}(Z^{h_n}) = -C_y(Z)$. Используя выражения для кодов произвольного цикла, приведенные в формулировке предложения 5, получаем из равенства $C_x(Z) = -C_y(Z)$, что

$$(p_2,p_3,\ldots,p_n;\ q_{n-1},\ldots,q_2,q_1) =$$
$$= (q_2,q_3,\ldots,q_{n-2},q_{n-1},p_n;\ p_{n-1},\ldots,p_3,p_2,p_1).$$

В частности, для любого $2 \le i \le n-1$ получаем равенство $p_i = q_i$, противоречащее условию "γ". Полученное противоречие с условием "γ" показывает, что наше предположение о существовании цикла Z, инвариантного относительно h_n, неверно, так что $\chi(\tilde{h}_n) = 0$.

Пусть $\lambda = \tau$. Нетрудно видеть, что тогда $x^{\tau_n} = u$, $u^{\tau_n} = x$, $y^{\tau_n} = v$, $v^{\tau_n} = y$. Поскольку τ_n не меняет ориентацию слоев, получаем $C_{x^{\tau_n}}(Z^{\tau_n}) = C_x(Z)$ и $C_{x^{\tau_n}}(Z^{\tau_n}) = C_u(Z)$, так что $(p_2,p_3,\ldots,p_{n-1},p_n;\ q_{n-1},\ldots,q_2,q_1) = (-p_{n-1},-p_{n-2},\ldots,-p_3,-p_2;-q_1,-q_2,\ldots,-q_{n-2},-q_{n-1})$. Таким образом, получаем, что для $2 \le i \le k$

$$p_{2k-i+1} = -p_i \tag{1}$$

и $q_1 = -p_n$, причем выполнение этих условий необходимо и достаточно для того, чтобы цикл Z был инвариантен относительно τ_n. Отметим, что равенство $q_1 = -p_n$ следует из условия $p_{n-1} = -p_2$ и условий "α"–"δ", приведенных в формулировке леммы 2. Подсчитаем теперь количество всех циклов из Ω_n, инвариантных относительно λ_n. Параметр p_2 выберем произвольно одним из четырех способов, тогда для выбора каждого из параметров $p_3, \ldots, p_k$ имеем по два способа, а параметры $p_{k+1}, \ldots, p_n$ определяются из (1) однозначно. Вершину x можно выбрать шестью способами. Значит, $\chi(\tilde{\tau}_n) = 6 \cdot 4 \cdot 2^{k-2}/4 = 3 \cdot 2^{k-1}$.

Пусть, наконец, $\lambda = \tau \cdot h$. Учтем, что $\tau_n \cdot h_n$ меняет ориентацию всех слоев на противоположную. Рассуждая аналогично, получаем:

$$x^{\tau_n \cdot h_n} = v, v^{\tau_n \cdot h_n} = x, y^{\tau_n \cdot h_n} = u, u^{\tau_n \cdot h_n} = y,$$

$$c_{x^{\tau_n \cdot h_n}}(z^{\tau_n \cdot h_n}) = c_x(z),$$

$$c_{x^{\tau_n \cdot h_n}}(z^{\tau_n \cdot h_n}) = -c_v(z),$$

$$c_x(z) = -c_v(z),$$

так что

$$(p_2, p_3, \ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1) =$$

$$=(-q_{n-1}, -q_{n-2}, \ldots, -q_2, -q_1; -p_2, -p_3, \ldots, -p_{n-1}, -p_n), \quad (2)$$

$$q_{n-i+1} = -p_i, \quad 2 \le i \le n-1.$$

Рассматривая условия (2) совместно с условиями "α"–"δ", получаем,что параметр p_2 может быть выбран 4 способами, каждый из параметров $p_3, \ldots, p_k$ - двумя способами, после чего код цикла определен однозначно. В качестве вершины x может быть выбрана любая из двух вершин валентности 3, лежащих на внешнем или внутреннем слое и фиксируемых подстановкой τ_n.

В итоге получаем $\chi(\tilde{\tau}_n \cdot \tilde{h}_n) = 2 \cdot 4 \cdot 2^{k-2}/4 = 2^{k-1}$. ►

ЛЕММА 5. *Пусть* $n = 2k+1, k \geq 1$, *тогда* $\chi(\tilde{\varepsilon}_n) = 3 \cdot 2^{2k-1}$, $\chi(\tilde{h}_n \cdot \tilde{\tau}_n) = 2^k$, $\chi(\tilde{g}_n) = \chi(\tilde{h}_n) = \chi(\tilde{\tau}_n) = \chi(\tilde{g}_n \cdot \tilde{\tau}_n) = 0$.

◄ Доказательство проводится аналогично доказательству предыдущей леммы. Точно так же показываем, что $\chi(\tilde{\varepsilon}_n) = 3 \cdot 2^{2k-1}$, $\chi(\tilde{g}_n) = \chi(\tilde{h}_n) = \chi(\tilde{g}_n \cdot \tilde{\tau}_n) = 0$.

В случае $\lambda = \tau$ слой L_{k+1} инвариантен относительно действия подстановки τ_n, причем τ_n меняет местами диаметрально противоположные вершины цикла длины 6, порожденного слоем L_{k+1}. Однако подграф из четырех ребер этого слоя, входящих в некоторый гипогамильтонов цикл $Z \in \Omega_n$ (см. рис. 10), не инвариантен относительно действия τ_n на L_{k+1}. Отсюда $\chi(\tilde{\tau}_n) = 0$. В случае $\lambda = \tau . h$ подстановка $\tau_n \cdot h_n$ переводит "одинокое" ребро, изображенное

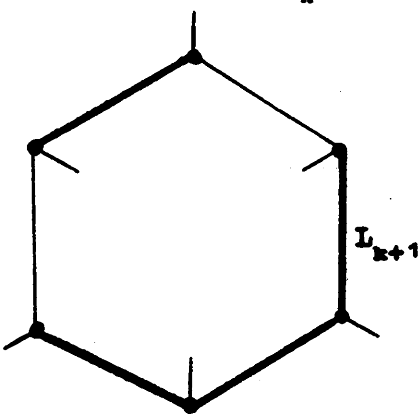


Рис. 10

на рис. 10, в себя. Отсюда заключаем, что $x^{\tau_n \cdot h_n} = u$ и $u^{\tau_n \cdot h_n} = x$, $y^{\tau_n \cdot h_n} = v$, $v^{\tau_n \cdot h_n} = y$. Теперь, учитывая, что $\tau_n \cdot h_n$ меняет ориентацию слоев, получаем $C_x(Z) = -C_y(Z)$, так что

$$(p_2, p_3, \ldots, p_n; q_{n-1}, \ldots, q_2, q_1) =$$

$$= (p_{n-1}, p_{n-2}, \ldots, p_3, p_2, q_1; q_2, \ldots, q_{n-2}, q_{n-1}).$$

Приходим к соотношениям (для $2 \le i \le k$):

$$p_{2k-i+2} = p_i . \qquad (3)$$

Условия (3) не накладывают никаких ограничений на пара - метр p_{k+1}. Условимся о следующем. Начинаем построение кода инвариантного цикла с p_{k+1}; выбираем $|p_{k+1}| = 1$, отождествляем вершину, соединенную перегородкой со слоем L_k, с какой-то одной из двух вершин этого слоя, лежащих на неподвижных относительно $\tau_n \cdot h_n$ ребрах. После этого каждое из значений $p_2, \ldots, p_k$ может быть выбрано двумя способами, а все остальные значения кода определяются равенствами (3) и условиями "α"-"δ". Имеем окончательно (учитывая, что только для двух кодов $|p_{k+1}| = 1$) $\chi(\tilde{\tau}_n \cdot \tilde{h}_n) = 2 \cdot 2 \cdot 2^{k-1}/2 = 2^k$. ▶

Теперь мы можем применить лемму Бернсайда и подсчитать количество попарно неизоморфных циклов.

ТЕОРЕМА 2. *Пусть* $\sigma(n)$, $n \ge 3$, *- количество гипогамильтоновых циклов графа* P_n, *неизоморфных относительно действия группы* $\mathrm{Aut}(P_n)$. *Тогда*

$$\sigma(n) = \begin{cases} 2^{k-2}(2^{k-2}+1), & \text{если} \quad n = 2k; \\ 2^{k-2}(2^{k-1}+1), & \text{если} \quad n = 2k+1. \end{cases}$$

◀ Пусть $n = 2k$, $k > 1$. Тогда

$$\sigma(n) = \frac{1}{12}(3 \cdot 2^{2k-2} + 3 \cdot 2^{k-1} + 3 \cdot 2^{k-1}) =$$

$$= \frac{1}{12} 3 \cdot 2^{k-1}(2^{k-1} + 1 + 1) = 2^{k-2}(2^{k-2}+1).$$

Пусть $n = 2k+1$, $k \ge 1$. Тогда

$$\sigma(n) = \frac{1}{12}(3 \cdot 2^{2k-1} + 3 \cdot 2^k) =$$

$$= \frac{1}{12} 3 \cdot 2^k (2^{k-1} + 1) = 2^{k-2}(2^{k-1}+1). \ ▶$$

Авторы выражают признательность Н.С.Зефирову и С.С.Трачу за внимание,проявленное к работе, способствовавшее преодолению "языкового барьера" между математиками и химиками, а также И.А.Фараджеву за полезные советы и замечания по тексту.

Литература

1. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Применение теории графов в химии полициклических бензеноидных углеводородов.-Новосибирск, 1987. - 34 с. - (Препринт/АН СССР. Сиб. отделение. Ин-т математики, № 35).

2.RANDIC M. A graph theoretical basis for structural chemistry. I. Structures based on trivalent graphs with 10 vertices //Acta Grystallogr.-1978.-Vol. A34,part 2. -P.275-282.

3. HUBERT A.J. Multimacrocyclic Compounds. Part Ш.Attempts to prepare benzenoid cage compounds from novel polyacetylenes //J.Chem. Soc. C.,- 1967.-N. 1. - P. 13-14.

4. CAHN R.C., INGOLD C., PRELOG V. Specification der molekularen Chiralität //Ahgew.Chem. - 1966. - Bd. 78. -S.413-417.

5. LEMIERE G.L., ALDERWEIRELDT F.C. Proposition for a new definition of the chiral plane and its consequences for the specification of planar chirality //J.Org. Chem. - 1980. -Vol. 45, N. 21. - P. 3160-3170.

6. Номенклатурные правила по химии. Органическая химия.Полутом I. - М.: ВИНИТИ, 1979. - 507 с.

7. РАУШЕНБАХ Б.В. Пространственные построения в живописи. - М.: Наука,1980. - 287 с.

8. ХАРАРИ Ф. Теория графов. - М.: Мир, 1973. - 300 с.

9. ХОЛЛ М. Теория групп. - М.: Изд. ин.лит., 1962.- 468 с.

10. WIELANDT H. Finite permutation groups. - N.-Y.:Academic Press, 1964. - 198 p.

11. NEUMANN P. A lemma that is not Burnside's //Math. Scientist. - 1979. - Vol. 4. - P. 133-141.

12. KLIN M.Ch., PÖSCHEL R., ROSENBAUM K. Angewandte Algebra. Einführung in gruppentheoretisch-kombinatorische Methoden. -Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1988.-208 S.

Поступила в ред.-изд.отд.
9 ноября 1988 года