

УДК 519.17

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ПОДКЛАССОВ ГРАФОВ
НЕРАЗВЕТВЛЕННЫХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

А. А. Добрынин

В в е д е н и е

Классическая математическая проблема роста шестиугольных "животных" (шестиугольных монстров) или подсчет шестиугольных полимино родственны задаче перечисления молекулярных графов полициклических ароматических (бензоидных) углеводородов в органической химии [1-3]. Бензоидные углеводороды находят широкое применение, что обусловило интенсивные исследования молекулярных графов этих соединений в области их конструктивного перечисления. Как правило, при перечислении рассматриваются более широкие классы гексагональных систем, включающие в себя молекулярные графы полибензолов. Результаты и библиографию по перечислению различных типов графов гексагональных систем можно найти в [3-9].

В работе рассматривается множество графов, каждый из которых представляет собой замкнутую неразветвленную ленту из шестиугольников. Молекулярные графы такого строения принадлежат классу соединений, называемых короноидами. Короноиды представляют значительный интерес для химии, так как они образуют новый класс полициклических ароматических углеводородов. К настоящему времени синтезированы химически чистые короноиды и ведется работа над созданием новых [9]. Для короноидов опреде -

ляется операция разрыва (разрезания) связи между двумя кольцами, что приводит к появлению графов другого известного класса - графов неразветвленных гексагональных систем. В работе перечисляются графы неразветвленных гексагональных систем, получаемые разрезанием графов некоторых подклассов короноидов.

§1. Основные понятия и определения

Графы гексагональных систем состоят из соединенных друг с другом правильных шестиугольных граней на плоскости. Две произвольные грани графа либо являются смежными, т.е. имеют единственное общее ребро, либо не имеют общих вершин. Поставив в соответствие каждой грани новую вершину и соединив эти вершины, если соответствующие грани являются смежными, получим характеристический граф исходной гексагональной системы. Грань графа вместе с ее граничными ребрами и вершинами будем называть шестиугольным кольцом, или просто кольцом графа. Обозначим через U_h класс графов, каждый из которых состоит из h колец и имеет характеристический граф, изоморфный простой цепи. Два концевых кольца графа из U_h смежны с единственным кольцом, а все остальные кольца смежны с двумя кольцами. Таким образом, такой граф представляет собой незамкнутую ленту из шестиугольных колец на плоскости. Графы G_1, G_2 и G_3 на рис.1 принадлежат классу U_h . Графы U_h называются графами неразветвленных гексагональных систем. Класс U_h содержит в себе подмножество графов, соответствующих полициклическим ароматическим углеводородам (ката-конденсированным бензоидным углеводородам) в органической химии [3-5,9]. Пусть C_h есть класс графов из h колец с характеристическим графом, изоморфным простому циклу. Будем считать, что в C_h содержатся только такие графы, которые можно расположить на плоскости без пересечений их ребер. Графы G_4, G_5 и G_6 на рис.1 принадлежат классу C_h . Граф из этого класса можно представить в виде замкнутой ленты из шестиугольных колец

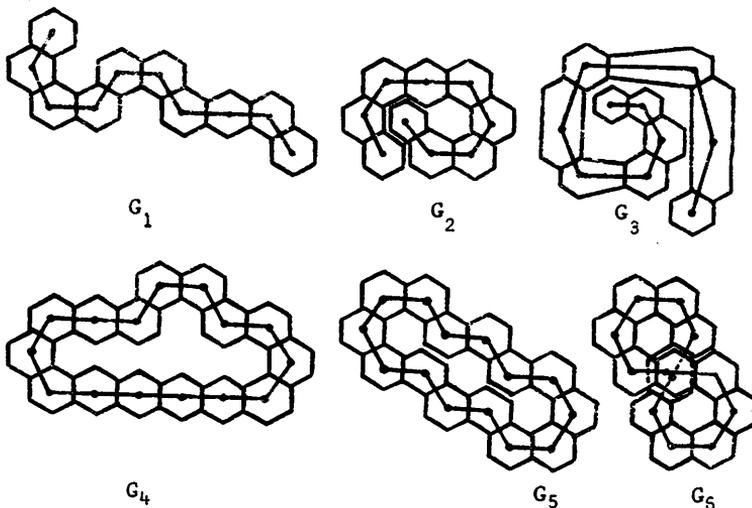


Рис. 1

на плоскости. Класс C_h включает в себя множество графов, соответствующих примитивным короноидам (короно-конденсированным полибензолам, циркуленам, циклоаренам, короногексам, коронофенам) [4,5,7,9]. Графы класса C_h будем далее называть обобщенными примитивными короноидами, или для краткости короноидами. Число вершин произвольного графа из U_h равно $4h+2$, а в графах из C_h число вершин равно учетверенному числу колец - $4h$. Графы из обоих классов имеют степени 2 или 3. Структура короноида обеспечивает существование его внутренней области (hole) - части плоскости, ограниченной шестиугольными кольцами. Внешняя область короноида совпадает с бесконечной гранью на плоскости. Соответственно внешний и внутренний периметры короноида определяются как множества вершин и/или ребер, смежных с его внешней или внутренней областями. Ребро короноида называется стягивающим, если оно не принадлежит ни внешнему, ни внутреннему периметру, т.е. инцидентные вершины стягивающего ребра лежат на разных периметрах короноида.

§2. Проекция графов в решетку

Графы классов U_h и C_h являются планарными, т.е. всегда могут быть расположены на плоскости без пересечения ребер (и шестиугольных колец). Определим понятие проекции графов при их вложении в бесконечную правильную гексагональную решетку на плоскости. Под вложением графа в решетку понимается такое расположение графа в решетке, при котором происходит отождествление вершин, ребер и колец графа с узлами, ребрами и гранями решетки. Пусть все кольца графа имеют размеры, совпадающие с размерами гексагональных граней решетки, и вершины характеристического графа находятся в центре колец. В качестве начального кольца в графе из класса U_h выберем любое концевое кольцо, а в графе из C_h выберем произвольное кольцо. Далее обходим характеристический граф в одном направлении, накладывая кольца графа на соответствующие грани решетки. Получившийся в результате вложения подграф гексагональной решетки назовем проекцией исходного графа. На рис.2 приводятся примеры графов и их проекций в гексагональную решетку. Для возможности восстановления последовательности присоединения колец исходного графа в проекции будем указывать его характеристический граф.

Разобьем каждое множество графов U_h и C_h на три подмножества по типу проекций графов.

1. При построении проекции графа не происходило наложения колец или ребер графа на уже размещенные ранее в решетке другие кольца или ребра графа. Подмножества таких графов обозначим $U_1 \subseteq U_h$ и $C_1 \subseteq C_h$. Графы на рис.2а принадлежат классам U_1 и C_1 .

2. При построении проекции графа не происходило наложения колец графа на уже размещенные ранее в решетке другие кольца графа, наложение же ребер является допустимым. Подмножества таких графов обозначим $U_2 \subseteq U_h$ и $C_2 \subseteq C_h$. Графы на рис.2б принадлежат классам U_2 и C_2 .

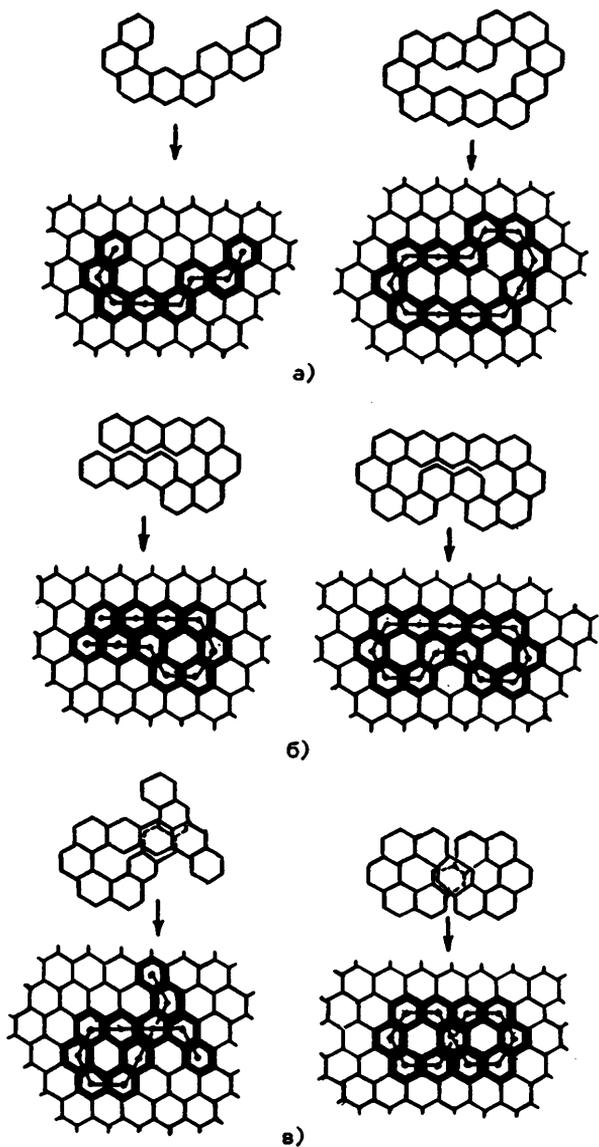


Рис. 2. Проекция графов в решетку

3. При построении проекции графа допустимы наложения колец или ребер графа на уже размещенные ранее в решетке кольца или ребра графа. Соответствующие графы показаны на рис.2в. Множества графов с такими проекциями совпадают с U_h и C_h . Для подсчета общего количества графов класса U_h и графов из U_h , обладающих симметриями, известны аналитические выражения [10]. Так, класс U_{16} содержит 1196836 графов.

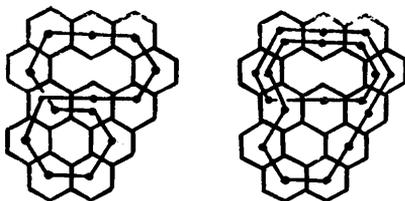


Рис. 3

Графы классов U_1 и C_1 называются вложимыми в правильную гексагональную решетку на плоскости. В этом случае проекция графа изоморфна исходному графу и идентификация графа по его проекции тривиальна. Из оп-

ределений следует, что для классов графов выполняются соотношения $U_1 \subseteq U_2 \subseteq U_h$ и $C_1 \subseteq C_2 \subseteq C_h$. Графы классов $U_h \setminus U_1$ и $C_h \setminus C_1$ называются невложимыми в правильную гексагональную решетку на плоскости. Для восстановления невложимых в решетку графов по их проекциям необходимо указание характеристических графов. Например, в графах на рис.3 возможно неоднозначное проведение характеристического графа.

§3. Разрезание короноидов

Рассмотрим операцию преобразования графа из класса C_h в граф класса U_h . Пусть некоторый короноид представлен в виде бумажной модели. Тогда, разрезав его по любому стягивающему ребру, получим граф класса U_h , так как характеристический граф превращается при этом из цикла в простую цепь. Разрезание короноида соответствует разрыву химических связей между шестигонными кольцами молекулярного графа. Из одного короноида разрезанием стягивающих ребер можно получить несколько попарно

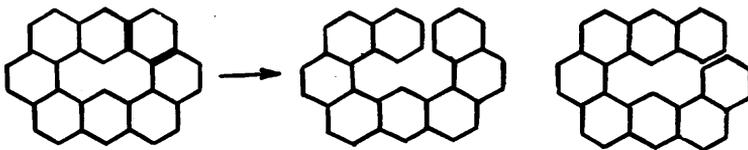


Рис.4

неизоморфных графов класса U_h . Так, из единственного короноида из 8 колец получается пара неизоморфных графов (рис.4). Далее будут подсчитываться количества графов из U_h , получаемых разрезанием короноедов. Формально операцию разрезания можно определить как отображение $f: C_h \rightarrow M$, где множество M образовано всеми подмножествами U_h мощности не более h . Для короноида из h колец $G \in C_h$ результат его разрезания есть множество графов $f(G) = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$, $G_i \in U_h$ и $G_i \not\cong G_j$ для всех $i, j = 1, 2, \dots, n$ при $i \neq j$. Ясно, что для пары неизоморфных графов $G_1, G_2 \in C_h$ выполняется $f(G_1) \cap f(G_2) = \emptyset$, так как в противном случае следует изоморфность исходных короноедов. Для подмножества графов $S \subseteq C_h$ разрезание определим как $f(S) = \bigcup_{G \in S} f(G)$.

этих терминах задача перечисления графов формулируется как перечисление элементов множеств $f(C_1) \subseteq U_2$, $f(C_2) \subseteq U_2$ и $f(C_h) \subseteq U_h$. Множество $f(C_1)$ содержит графы, соответствующие молекулярным графам гелиценов [3,5]. Заметим, что для указанных множеств графов неразветвленных гексагональных систем выполняется $f(C_1) \subseteq f(C_2) \subseteq f(C_h)$.

Количество неизоморфных графов из U_h , получаемых разрезанием короноида, определяется его симметрией. Рассмотрим семейство короноедов из 12 колец на рис.5. Число рядом с каждым короноедом есть количество получаемых при его разрезании попарно неизоморфных графов из U_{12} . Короноеды G_2 и G_{11} имеют одинаковую группу симметрии [11,12], но порождают разное количество

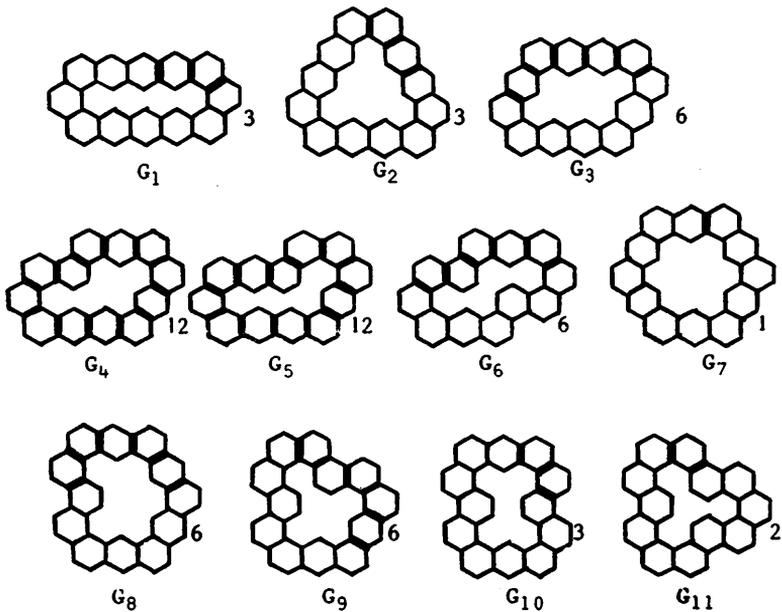


Рис. 5

графов. Количество неизоморфных графов при разрезании короноида равно числу орбит при действии группы автоморфизмов короноида на множестве его стягивающих ребер. Разрезание одного ребра из каждой орбиты множества стягивающих ребер в $G \in C_h$ определяет множество $f(G)$. Максимальное количество графов из U_h порождается асимметричным короноеидом и равно, очевидно, числу его стягивающих ребер (числу колец).

§4. Результаты перечисления

В табл.1 приводятся количества короноеидов класса C_1 с числом колец $3 \leq h \leq 16$ [4] с указанием симметричных (все типы симметрий) и асимметричных короноеидов (вторая - четвертая колонки). Далее приводятся количества графов класса $f(C_1)$ с вы-

Т а б л и ц а 1

Количество коронидов в C_1 и графов в $f(C_1)$

h	$ C_1 $	Корониоды с симметрией	Асимметричные корониоды	Число графов	Симметричные графы	Асимметричные графы
8	1	1	0	2	0	2
9	1	1	0	2	1	1
10	3	3	0	11	2	9
11	2	1	1	17	1	16
12	11	9	2	60	2	58
13	12	4	8	132	4	128
14	40	23	17	383	10	373
15	68	10	58	934	8	926
16	192	63	129	2549	18	2531

Т а б л и ц а 2

Количество графов класса $f(C_2)$

Число колец	Число графов	Число симметричных графов	Число асимметричных графов
8	2	0	2
9	2	1	1
10	14	3	11
11	17	1	16
12	78	2	76
13	146	6	140
14	515	15	500
15	1122	9	1113
16	3474	20	3454

делением числа симметричных графов. Изображения симметричных графов из $f(C_1)$ находятся в приложении. Диаграммы всех графов даны в правильной гексагональной решетке на плоскости вместе с их характеристическими графами. Заметим, что в классе C_1 существуют как зеркально-симметричные, так и центрально-симметричные короноиды, в то время как среди графов множества $f(C_1)$ центрально-симметричные отсутствуют. Для существования центрально-симметричного графа в $f(C_1)$ необходимо совпадение количества вершин на внешнем и внутреннем периметре соответствующего короноида, что, как нетрудно заметить, не выполняется для графов класса C_1 .

В табл.2 приводятся результаты перечисления графов класса $f(C_2)$, получаемых разрезанием короноидов, при вложении которых в гексагональную решетку допускается наложение ребер. Изображения симметричных графов из $f(C_2)$ даны в приложении. Первые примеры симметричных графов из $f(C_2) \setminus f(C_1)$ встречаются при $h = 10$ (единственный граф) и при $h = 13$ (два графа). Порождаемые разрезанием графы также не могут быть центрально-симметричными.

В табл.3 приводятся результаты перечисления графов из класса $f(C_h)$. Изображения симметричных графов этого класса даны в приложении. Заметим, что в множестве $f(C_h)$ содержатся и центрально-симметричные графы.

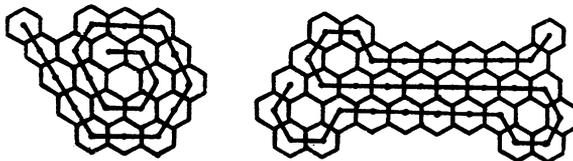


Рис. 6

Т а б л и ц а 3

Количество графов класса $f(C_h)$

Число колец h	Число графов	Зеркально-симметричные графы	Центрально-симметричные графы	Число асимметричных графов
8	2	0	0	2
9	2	1	0	1
10	14	3	0	11
11	17	1	0	16
12	86	4	1	81
13	159	6	0	153
14	622	18	1	603
15	1404	13	0	1391
16	4792	38	6	4748

Т а б л и ц а 4

Результаты перечисления

Число колец h	Число графов	Зеркально-симметричные графы	Центрально-симметричные графы	Число асимметричных графов
6	1	1	0	0
7	2	0	0	2
8	10	1	0	9
9	35	1	0	34
10	129	5	1	123
11	430	2	1	427
12	1446	11	4	1431
13	4701	12	4	4685
14	15153	39	18	15096
15	48055	36	18	48001
16	151188	107	65	151016

В заключение рассмотрим подкласс графов из U_h , при построении проекции которых в гексагональной решетке обязательно происходит наложение ребер графа, но не происходит наложения его колец. Графы этого класса могут быть "вырезаны" из правильной гексагональной решетки, нанесенной на лист бумаги. На рис. 6 приводятся примеры таких графов. Графы множеств $f(C_1)$ и $f(C_2)$ принадлежат указанному классу. В табл. 4 приводятся результаты перечисления с указанием симметричных графов.

З а к л ю ч е н и е

В работе перечислены графы из подклассов неразветвленных гексагональных систем, получаемые разрезанием составленных из шестиугольных колец замкнутых лент (кораноидов). Множества кораноидов классифицируются по свойствам их проекций в правильную гексагональную решетку на плоскости. Для симметричных графов, полученных разрезанием, построены их изображения. Подсчет графов осуществлялся алгоритмом конструктивного перечисления графов неразветвленных гексагональных систем из [13]. В заключение заметим, что определение класса C_h включало условие планарности графов кораноидов. Можно рассматривать задачу перечисления для аналогичных замкнутых лент из шестиугольников, но без условия планарности. Это могут быть, например, ленты, склеенные, как лист Мёбиуса, или образующие узлы. Нетрудно заметить, что новых графов неразветвленных гексагональных систем при разрезании таких лент мы не получим.

Л и т е р а т у р а

1. ГОЛОМБ С.В. Полимино. - М.: Мир, 1975. - 207 с.
2. ХАРАРИ Ф., ПАЛМЕР Э. Перечисление графов. - М.: Мир, 1977. - 324 с.
3. МЖЕЛЬСКАЯ Е.В., СКОРОБОГАТОВ В.А. Применение теории графов в химии полициклических бензоидных углеводородов. - Но-

Новосибирск, 1987. - 34 с. - (Препринт/АН СССР. Сиб.отд.неин-т математики, № 35).

4. BALABAN A.T., BRUNVOLL J., CIOSLOWSKI J. a.o. Enumeration of Benzenoid and Coronoid Hydrocarbons //Z. Naturforsch.-1987. - Vol. 42a. -P. 863-870.

5. KNOP J.V., MÜLLER W.R., SZYMANSKY K., TRINAJSTIĆ N. Computer generation of certain classes of molecules. - Zagreb: SKTIN/Kemija u industriji, 1985. - 166 p.

6. KNOP J.V., SZYMANSKY K., JERIČEVIĆ Ž., TRINAJSTIĆ N. On the total number of polyhexes //Comm. Math. Chem. (MATCH). - 1984. - N 16. -P. 119-134.

7. KNOP J.V., MÜLLER W.R., SZYMANSKY K., TRINAJSTIĆ N. A note of the number of circulenes //Comm. Math. Chem. (MATCH). - 1986.-N 20. -P. 197-208.

8. BRUNVOLL J., CYVIN B.N., CYVIN S.J. Enumeration and Classification of Coronoid Hydrocarbons //J.Chem. Inf. Comput. Sci. - 1987. - Vol. 27. - P. 14-21.

9. BRUNVOLL J., CYVIN B.N., CYVIN S.J., GUTMAN I., TOŠIĆ R., KOVAČEVIĆ M. Enumeration and classification of coronoid hydrocarbons. Part V. Primitive coronoids //J.Mol.Struct. (Theochem). - 1989. -Vol. 184. - P. 165-177.

10. BALABAN A.T., HARARY F. Chemical graphs. V. Enumeration and proposed nomenclature of benzenoid cata-condensed polycyclic aromatic hydrocarbons //Tetrahedron. - 1968. - Vol. 24.- P. 2505-2516.

11. КОКСЕТЕР Г.С.М., МОЗЕР У.О.Дж. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. -М.: Наука, 1980. - 240 с.

12. ХАРГИТТАИ И., ХАРГИТТАИ М. Симметрия глазами химика. - М.: Мир, 1989. - 494 с.

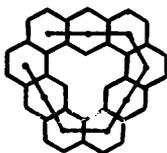
13. ДОБРЫНИН А.А. Эффективный алгоритм генерации графов неразветвленных гексагональных систем //Математические вопросы химической информатики. - Новосибирск, 1989. - Вып. 130: Вычислительные системы. -С. 3-38.

Поступила в ред.-изд.отд.

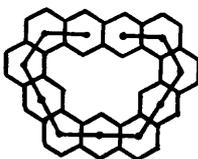
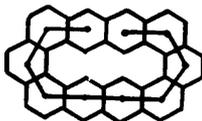
4 октября 1990 года

Симметричные графы класса $f(C_h)$

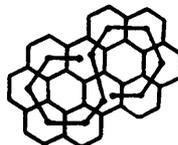
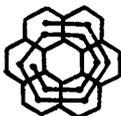
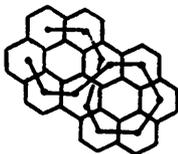
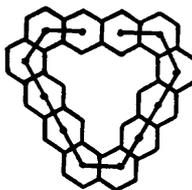
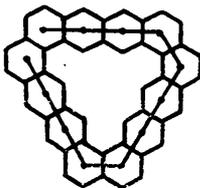
$h = 9, n = 1$



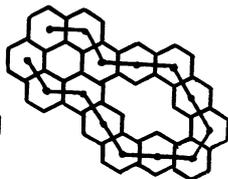
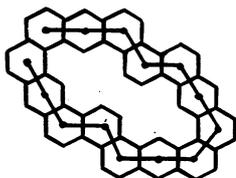
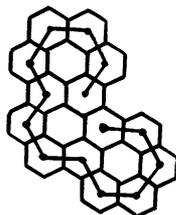
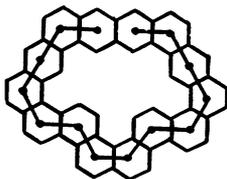
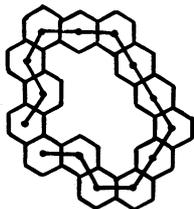
$h = 10, n = 3$



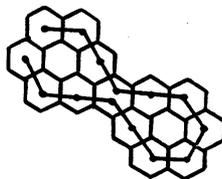
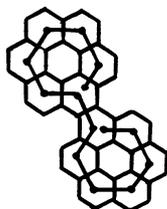
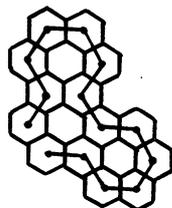
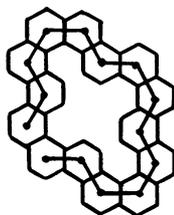
$h = 12, n = 5$

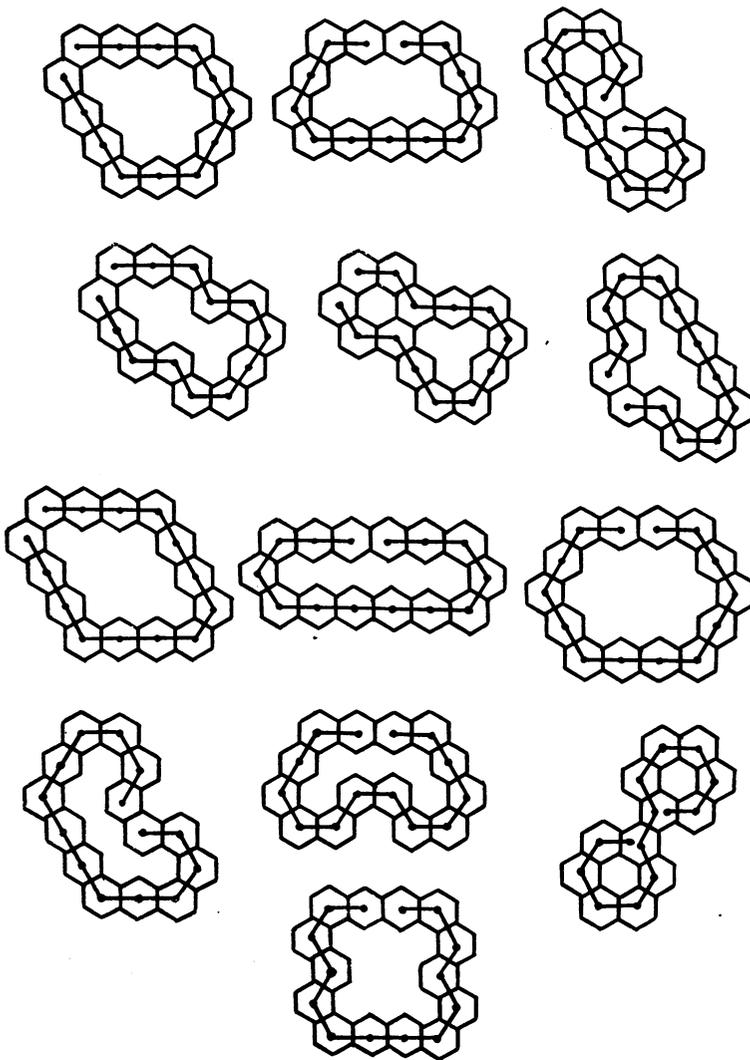


$h = 13, n = 6$

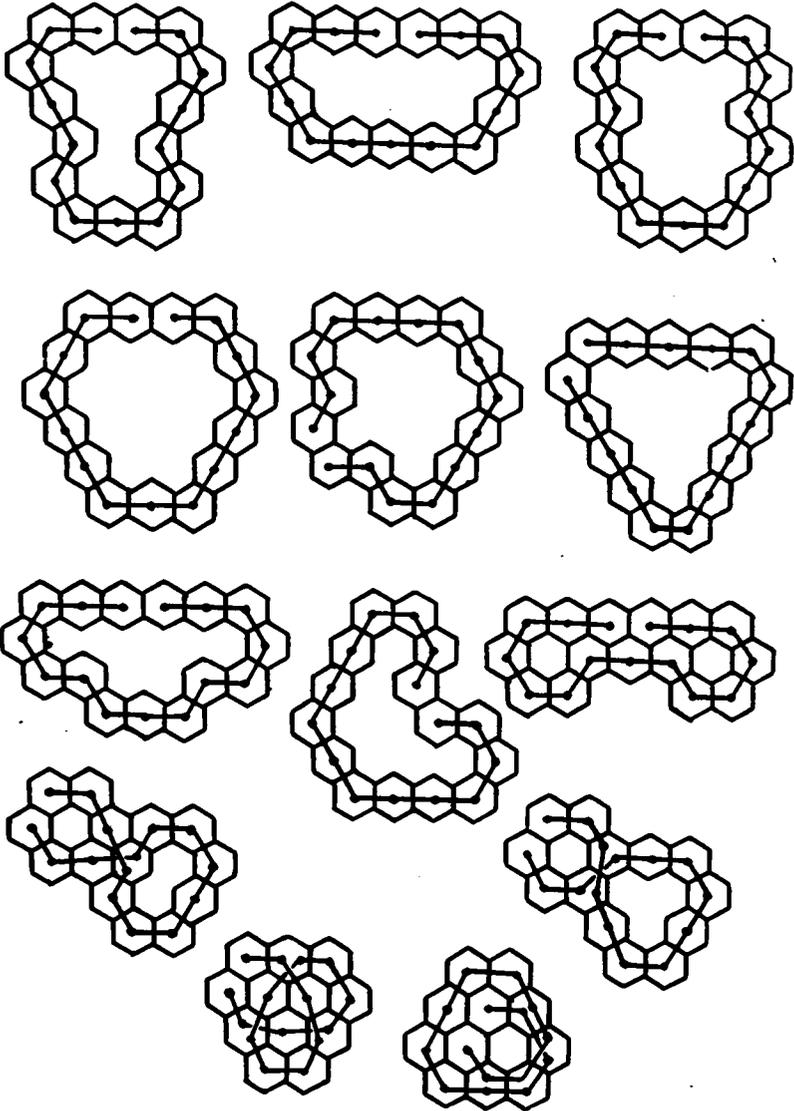


$h = 14, n = 19$





$h = 15, n = 13$



$h = 16, n = 44$

