POPOLNA PRIREJANJA PO PRAVILNIH POLIEDRIH

SIMON ČOPAR

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Ključne besede: popolno prirejanje, pravilni poliedri, teorija grafov, točkovne grupe

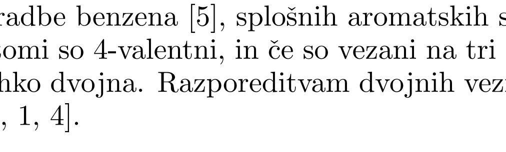
Popolno prirejanje oziroma 1-faktor grafa je razdelitev sosednjih vozlišč grafa v pare, tako da vsako vozlišče uporabimo natanko enkrat, če taka razdelitev sploh obstaja. Ogledali si bomo popolna prirejanja na pravilnih poliedrih ter raziskali število takih prirejanj in njihove simetrije.

PERFECT MATCHING ON REGULAR POLYHEDRA

A perfect matching, or a 1-factor of a graph, is a partitioning of neighbouring graph vertices into pairs, such that each vertex is only used once. We will look into perfect matching of vertices on regular polyhedra and investigate the number of such matchings and their symmetries.

Uvod

Za motivacijo si oglejmo dodekaedra s pobarvanimi robovi na sliki na naslovnici. Sta enaka, le drugače zasukana, ali sta mogoče različna? Na koliko načinov lahko pobarvamo robove, da vsako oglišče pripada natanko enemu pobarvanemu robu? Takšna vprašanja so si zastavljali kemiki pri raziskovanju zgradbe benzena [5], splošnih aromatskih spojin [7] in fulerenov. Ogljikovi atomi so 4-valentni, in če so vezani na tri druge atome, je le ena izmed vezi lahko dvojna. Razporeditvam dvojnih vezi pravimo Kekulejeve[1] strukture [2, 1, 4].


(a) (b) (c)

Slika 1. Trije nabori povezav istega grafa. Povezave (a) ne predstavljajo prirejanja, saj je rdeče vozlišče povezano dvakrat. Prirejanje (b) ni popolno, saj sivi vozlišči nista del povezave. Povezave (c) so primer popolnega prirejanja.

[1] Friedrich August Kekulé (1829–1896), nemški kemik

V kontekstu teorije grafov take strukture ustrezajo popolnim prirejanjem [6]. Prirejanje je vsaka razdelitev vozlišč grafa v povezane pare brez skupnih vozlišč. Prirejanje je popolno, če nobeno vozlišče ne ostane nepovezano (glej sliko 1). Na poliedru si iskanje popolnega prirejanja lahko nazorno predstavljamo z izbiranjem povezav med oglišči. V posplošenem smislu bomo iskali tudi popolna prirejanja grafa, ki sestoji iz robov poliedra ter diagonal njegovih ploskev, kar bomo imenovali *ploskovno popolno prirejanje*.

Poliedri niso abstraktni grafi, ki bi vsebovali le informacijo o povezanosti vozlišč, temveč so vpeti v tridimenzionalni prostor in nosijo različne rotacijske simetrije. S simetrijami se ukvarja teorija grup, ki nam daje orodja za opis simetrijskih lastnosti.

Preštevanje in klasifikacija vseh popolnih prirejanj grafa je zahtevno kombinatorično vprašanje. V nadaljevanju si bomo ogledali algoritem za sistematično številčenje in popis različnih popolnih prirejanj na platonskih telesih ter na prisekanem ikozaedru.

Algoritem za številčenje

Popolna prirejanja za izbrani polieder bomo iskali v dveh korakih. V prvem koraku bomo poiskali vsa veljavna popolna prirejanja poliedru prirejenega grafa, ne glede na simetrije. V drugem koraku bomo odstranili prirejanja, ki so podvojena, le različno zasukana.

Za opis prirejanj oglišča označimo s števili od 1 do n. Robovi poliedra so predstavljeni z neurejenimi pari števil, množica vseh robov pa določa graf poliedra. V prirejanju vrstni red parov ni pomemben, prav tako ni pomemben vrstni red oglišč v paru. Da prirejanj ne štejemo večkrat, jih označimo tako, da sta oznaki v vsakem paru urejeni po velikosti, pari med seboj pa po velikosti prve oznake v paru.

Za poln graf (graf, ki ima vsa vozlišča povezana med seboj) je torej prvo vozlišče prvega para vedno 1, drugo izbiramo med preostalimi $n-1$, tretje je spet enolično določeno kot najmanjše izmed preostalih, sledi izbira med $n-3$ ostalimi in tako naprej, kar nas privede do $(n-1)!!$ možnih prirejanj.

Z izjemo tetraedra poliedri niso polni grafi, zato ni vsaka na zgornji način izbrana povezava del grafa. Prirejanja gradimo s postopnim dodajanjem parov vozlišč obstoječim delnim prirejanjem, pri čemer za vsako dodano povezavo sproti preverimo, ali je del grafa. Za grafe poliedrov, ki imajo sorazmerno malo povezav, to močno zmanjša računsko zahtevnost v primerjavi s preverjanjem vseh $(n-1)!!$ množic parov vozlišč. Še vedno pa je delnih prirejanj, ki jih moramo preveriti v vmesnih korakih, več kot na koncu dobljenih popolnih prirejanj. Pri nekaterih delnih prirejanjih, šele ko poskusimo dodati zadnji par vozlišč, ugotovimo, da se ne izide. Maksimalno število delnih prirejanj je zaradi porabe spomina in časovne zahtevnosti ozko grlo algoritma.

Sledi minimalna koda v Pythonu, ki vrne seznam vseh popolnih prirejanj za poljuben graf, podan z množico povezav v obliki parov vozlišč. Oznake vozlišč za graf oktaedra, podan v kodi, so prikazane na sliki 2.

```
# vrača seznam prirejanj iz podanega prirejanja z dodanim parom
def dodaj_rob(prirejanje, n, robovi):
    # poiščemo vozlišča, ki jih še nismo uporabili
    ostali=[ i for i in range(1,n+1) if i not in prirejanje ]
    # dodamo par na vse možne načine,
    # ki so med dovoljenimi robovi
    return [ prirejanje + [ostali[0],i]
             for i in ostali[1:] if (ostali[0],i) in robovi ]

def poisci_prirejanja(n, robovi):
    # začnemo s seznamom enega praznega prirejanja
    prirejanja = [ [] ]
    # dodajamo pare postopoma, potrebujemo n/2 parov
    for _ in range(n//2):
        # p teče po starih prirejanjih
        # q teče po novih z dodanim enim parom
        prirejanja = [ q for p in prirejanja
                       for q in dodaj_rob(p, n, robovi) ]
    return prirejanja

# primer klica za oktaeder (oznake v sliki 2)
robovi={(1,2),(1,3),(1,4),(1,5),(2,3),(2,5),
        (2,6),(3,4),(3,6),(4,5),(4,6),(5,6)}
poisci_prirejanja(6,robovi)
```

Prirejanja, ki jih simetrijske operacije poliedra preslikajo drugo v drugega, štejemo v isti ekvivalenčni razred. Simetrijske preslikave pravilnih poliedrov sestavljajo točkovno grupo G_0, popolna prirejanja pa imajo praviloma nižjo simetrijo – eno izmed podgrup $G \subset G_0$ simetrijske grupe prvotnega poliedra. Enoličnost oštevilčenja zagotovimo tako, da na vsakem prirejanju uporabimo vse preslikave iz simetrijske grupe G_0 prvotnega poliedra, ter izberemo oštevilčenje z leksikografsko najnižjo vrednostjo. Hkrati zabeležimo vse preslikave, ki prirejanje preslikajo samo vase, s čimer dobimo simetrijsko grupo posameznega prirejanja G. Red podgrupe $|G|$ nam pove število nerazločljivih orientacij prirejanja, kvocient $|G_0|/|G|$ pa govori o številu *različnih* orientacij vsakega prirejanja.

Pomembna je tudi kiralnost oziroma simetričnost na neprave rotacije. Zrcaljenja ne moremo izvesti s fizično rotacijo v prostoru, zato prirejanja, ki niso ekvivalentna svoji zrcalni sliki, nastopajo v zrcalnih parih. Simetrijo tistih prirejanj, ki so ekvivalentna svoji zrcalni sliki, opisujejo grupe rotacij z zrcaljenji, ki imajo dvakrat večji red kot pripadajoča grupa pravih rotacij. Grupe z nepravimi rotacijami bomo označevali z G^*.

Ko ogliščem priredimo oznake, lahko simetrijske operacije, v tem primeru prave rotacije in rotacije z zrcaljenjem, predstavimo z bijektivnimi preslikavami med oznakami. Preslikava $\{1 \mapsto 3, 2 \mapsto 1, 3 \mapsto 2, 4 \mapsto 4\}$ na primer predstavlja rotacijo tetraedra za $120°$ okrog oglišča 4. Ročno generiranje preslikav bi bilo dolgotrajno, predvsem za grupo simetrij ikozaedra, ki ima 60 elementov. Dovolj je, da določimo preslikavi za generatorja grupe. Celotno grupo potem dobimo tako, da z generatorji delujemo na že znane elemente grupe, vse dokler postopek ne privede do nobenega novega elementa več.

Zaradi večje kompleksnosti implementacijo simetrijskega koraka prepustimo bralcu.

Tetraeder, oktaeder in ikozaeder

Najenostavnejši polieder v treh dimenzijah je simpleks – tetraeder. V dogovorjenem oštevilčenju obstajajo le tri različna popolna prirejanja,

$$(1,2)(3,4) \quad (1,3)(2,4) \quad (1,4)(2,3),$$

ki jih z rotacijami lahko preslikamo drug v drugega. Za tetraeder je enolično oštevilčenje edinega stanja $(1,2)(3,4)$, z diedrsko simetrijsko grupo D_{2d}, ki ima red 8 (4 brez zrcaljenj).

Za graf oktaedra, ki ima 6 vozlišč, dobimo 8 popolnih prirejanj. Rotacije iz simetrijske grupe oktaedra pokažejo, da imamo le dve različni stanji, $(1,2)(3,4)(5,6)$ ter $(1,2)(3,6)(4,5)$ (za oznake oglišč glej sliko 2), ki sestavljata zrcalni par. Stanji imata diedrsko simetrijo D_3 reda 6.

Zadnji izmed trikotniških platonskih poliedrov je ikozaeder, ki ima 12 oglišč. Opisani algoritem obišče maksimalno 273 delnih prirejanj, na koncu pa dobimo 125 veljavnih popolnih prirejanj, kar je občutno manj od $11!! = 10395$ »surovih« oštevilčenj, ki bi jih dobili s slepim pregledom vseh možnih množic parov oglišč.

Simetrijska grupa ikozaedra vsebuje 60 rotacij. Po eliminaciji simetrijsko identičnih prirejanj na ikozaedru jih ostane 8: trije zrcalni pari in dve prirejanji, ki sta sami po sebi zrcalno simetrični. V tabeli 1 so zbrana vsa popolna prirejanja skupaj s podatki o simetriji.

Nobeno izmed popolnih prirejanj ne ohrani polne ikozaedrične simetrije. Najbolj simetrično stanje, prvo v tabeli 1, ima simetrijo tetraedra in spomni na konstrukcijo ikozaedra iz treh medsebojno pravokotnih zlatih pravokotnikov.

Če moč grupe poliedra, v tem primeru je to grupa ikozaedra, delimo z močjo njene podgrupe, ki opisuje simetrijo posameznega prirejanja, dobimo

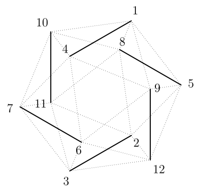
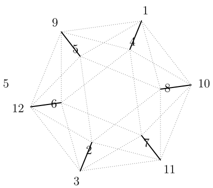
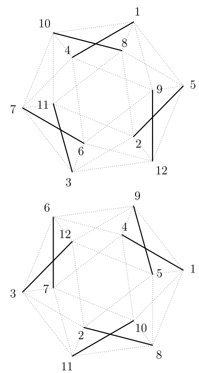
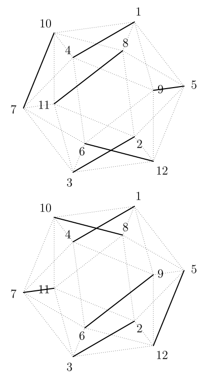
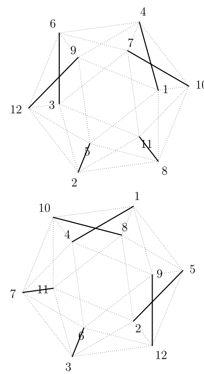
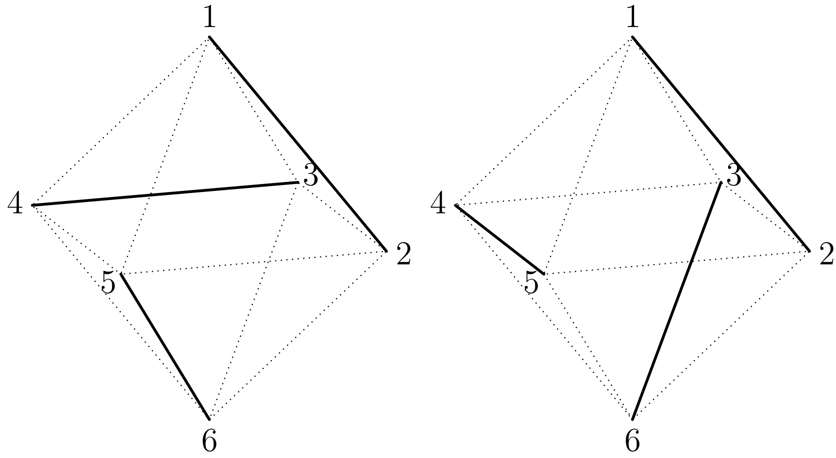
	Nekiralna prirejanja		Kiralna prirejanja		
					
G (G^*)	T (T_h)	D_3 (D_{3d})	D_3	D_2	C_2
$\|G\|$	12	6	6	4	2

Tabela 1. Popolna prirejanja na ikozaedru, razvrščena po padajoči simetriji. Dve stanji imata zrcalno simetrijo, preostala pa so kiralna in nastopajo v zrcalnih parih. Stanja so orientirana tako, da nazorno prikazujejo simetrijo. Navedene so grupe pravih rotacij G, z grupo posplošenih rotacij G^* navedeno v oklepaju v primerih nekiralnih prirejanj. Moči grup $|G|$ nam povedo število orientacij, v katerih prirejanja izgledajo enako. Moč grupe ikozaedra (60), deljena z močjo podgrupe pravih rotacij $|G|$, nam pove število *različnih* orientacij istega prirejanja.



Slika 2. Edini različni popolni prirejanji na oktaedru. Prirejanji sta zrcalni, v prikazani projekciji ravnino zrcaljenja napenjajo vozlišča $(1, 2, 6, 4)$.

število *različnih orientacij* tega prirejanja. Vseh 125 veljavnih prirejanj je torej razdeljeno na različno orientirane različice 8 različnih prirejanj iz tabele 1 na način $125 = 60/12 + 60/6 + 2 \times 60/6 + 2 \times 60/4 + 2 \times 60/2$.

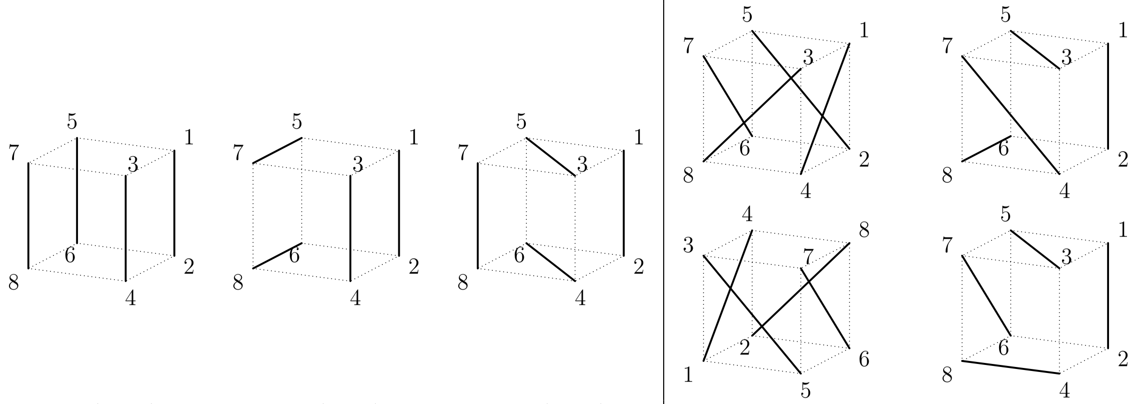
Kocka, dodekaeder in nogometna žoga

Osnovne ploskve tetraedra, oktaedra in ikozaedra so trikotniki, zato lahko njihova oglišča povežemo le z robovi samega poliedra ali pa skozi njegovo notranjost, ki nas zaradi težke predstavljivosti in računske zahtevnosti ne zanimajo. Za poliedre z drugačnimi osnovnimi ploskvami pa imamo na voljo tudi diagonale ploskev. Graf povezav v tem primeru ni planaren, ampak vsebuje vozlišča višje stopnje.

Zastavimo posplošen problem, pri katerem dovolimo robove ter ploskovne diagonale poliedra pod pogojem, da se povezave ne sekajo. Te rešitve bomo imenovali *ploskovna popolna prirejanja* in zahtevajo dodaten računski korak, ki odstrani prirejanja, pri katerih se povezave na površini poliedra sekajo.

S tem pogojem kljub neplanarnosti grafa ohranimo planarnost prirejanj, kar pomeni, da jih lahko vložimo na površino poliedra. Ploskovna popolna prirejanja torej lahko iščemo s flomastrom in papirnatimi poliedri.

Za kocko najdemo 45 veljavnih ploskovnih popolnih prirejanj, od tega 7 različnih (tabela 2), ko upoštevamo učinek vseh 24 simetrij kocke. Tri prirejanja so nekiralna, dve pa nastopata v kiralnih parih. Prvi dve prirejanji v tabeli 2 vsebujeta le povezave vzdolž robov kocke in sta torej tudi popolni



	Nekiralna prirejanja			Kiralna prirejanja	
G (G^*)	D_4 (D_{4h})	D_2 (D_{2d})	D_2 (D_{2h})	D_4	C_2
$\lvert G\rvert$	8	4	4	8	2

Tabela 2. Ploskovna popolna prirejanja na kocki. Prvi dve vsebujeta le robove kocke, preostala pa tudi diagonale. Za nekiralna prirejanja sta navedeni grupa pravih rotacij G in v oklepaju grupa rotacij z zrcaljenji.

prirejanji grafa kocke brez diagonal. Nobeno izmed prirejanj ne ohrani polne simetrije kocke, prav tako pa nobeno ne izgubi vseh simetrij – najnižjo simetrijo ima zadnje stanje v tabeli, ki ima zgolj eno dvoštevno os rotacije. Rešitve za kocko so med drugim relevantne tudi kot načini povezovanja defektov v tekočekristalnih koloidih [3].

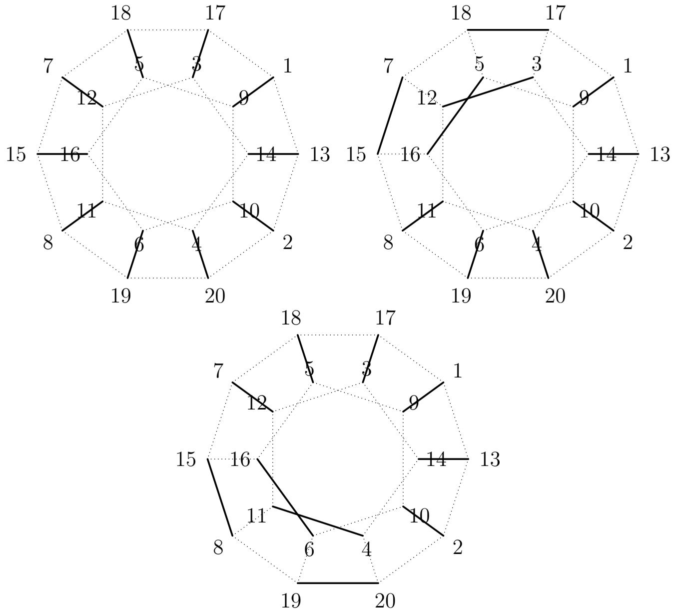
Ploskovna prirejanja dodekaedra predstavljajo občutno večji računski izziv. Skupaj s ploskovnimi diagonalami graf vsebuje 20 vozlišč, povezanih s 90 povezavami. Maksimalno število delnih prirejanj med izvajanjem algoritma je 406817, ki nato vrne 139083 dovoljenih popolnih prirejanj.

Končno število različnih popolnih prirejanj je bilo do sedaj razmeroma majhno. Pri dodekaedru, ki si deli simetrijsko grupo z ikozaedrom, pa tudi po upoštevanju simetrij ostane 2476 ploskovnih popolnih prirejanj, od tega 42 zrcalno simetričnih, preostala pa nastopajo v zrcalnih parih. Razvrstitev prirejanj po simetriji je navedena v tabeli 3. Le tri izmed njih (slika 3) vsebujejo samo robove dodekaedra in rešijo problem popolnih prirejanj za graf dodekaedra.

S podrobno primerjavo ugotovimo, da sta dodekaedra na sliki na naslovnici dejansko različna. Čeprav smo dobili seznam vseh različnih prirejanj, je naivna primerjava vzorčnega prirejanja s tem seznamom še vedno lahko zamudna, saj v principu zahteva rotacijo strukture v vseh 60 orientacij in primerjavo enakosti povezav v dani orientaciji. Da se temu izognemo, si pomagamo z enostavno določljivimi invariantami. Invariante so količine, neodvisne od orientacije – če imata dve konfiguraciji, v našem primeru dve prirejanji, različni invarianti, sta zagotovo različni, s čimer si lahko zelo zmanjšamo število potrebnih primerjav. Za popolna prirejanja na dodekaedru je ena izmed invariant število ploskev, ki nimajo nobenega roba v prirejanju. Levi dodekaeder na sliki na naslovnici ima dve taki ploskvi, desni pa nobene, kar dokaže, da sta različna.

V primeru kocke (tabela 2) sta prikladni invarianti število diagonal ter število različnih smeri povezav, ki zadostujeta za ločevanje vseh prirejanj, z izjemo razločevanja pripadnikov zrcalnih parov, za kar bi potrebovali še kiralno invarianto.

Za konec si oglejmo še rezultate za prisekani ikozaeder (tradicionalna nogometna žoga). Ta primer je tudi relevanten za Kekulejeve strukture buckminsterfulerena C_{60} [1]. Ta graf ima 60 vozlišč in 90 povezav, diagonal pa ne bomo upoštevali, saj groba ocena pokaže, da bi bilo število možnosti v tem primeru astronomskih razsežnosti. Algoritem vrne 12500 popolnih prirejanj, ob upoštevanju simetrije 260 različnih, klasificiranih v 16 različnih grup, kot kaže tabela 4. Med njimi je tudi eno popolno prirejanje s polno ikozaedrično simetrijo, o katerem lahko bralec razmisli sam.



Slika 3. Edina tri popolna prirejanja na dodekaedru brez diagonal. Prvo ima maksimalno simetrijo (5-števna diedrska simetrija z zrcaljenji, D_{5d}), preostali dve pa sta zrcalni par z minimalno simetrijo C_2.

Nekiralna prirejanja			Kiralna prirejanja		
$\lvert G\rvert$	G^*	število	$\lvert G\rvert$	G	število
10	D_{5d}	1	10	D_5	2×2
5	S_{10}	2	5	C_5	1×2
4	D_{2h}	1	4	D_2	6×2
2	C_{2h}	6	2	C_2	136×2
2	C_{2v}	3			
1	C_s	29	1	C_1	1072×2

Tabela 3. Ploskovna popolna prirejanja na dodekaedru lahko razvrstimo v 11 različnih simetrijskih grup, od najbolj simetričnih s petštevno simetrijo v prvi vrstici, do povsem nesimetričnih v spodnji. V levem stolpcu so prirejanja z zrcalno simetrijo, v desnem pa tista, ki nastopajo v dveh zrcalnih različicah. Pri nekiralnih prirejanjih je v stolpcu G^* navedena grupa z zrcaljenji vred, ker podaja več informacij o simetriji, v stolpcu $|G|$ pa so, podobno kot v prejšnjih tabelah, štete le prave rotacije, saj rotacij z zrcaljenjem ne moremo doseči s fizičnim obračanjem telesa.

Nekiralna prirejanja			Kiralna prirejanja		
$\lvert G\rvert$	G^*	število	$\lvert G\rvert$	G	število
60	I_h	1			
12	T_h	1	12	T	1×2
10	D_{5d}	2			
6	D_{3d}	3	6	D_3	2×2
5	C_{5v}	1	4	D_2	3×2
3	C_{3v}	3	3	C_3	7×2
3	S_6	1			
2	C_{2h}	4	2	C_2	19×2
2	C_{2v}	4			
1	C_s	36	1	C_1	70×2

Tabela 4. Ploskovna popolna prirejanja na nogometni žogi zajamejo 16 različnih simetrijskih grup.

Sklep

Svet okoli nas je poln zanimivosti, ki lahko zaživijo svoja življenja kot povsem samostojna matematična vprašanja. Naloga, ki se je v organski kemiji in fiziki kompleksnih materialov porodila iz nuje, lahko služi kot lekcija iz geometrije in teoretične obravnave simetrij. V tem prispevku smo si ogledali popolna prirejanja na grafih najenostavnejših poliedrov, nihče pa nam ne brani, da bi si ne izbrali grafov drugačnih simetrij in vprašanje popolnih prirejanj reševali kot programerski izziv ali konjiček za preživljanje prostega časa.

LITERATURA

[1] S. J. Austin, P. W. Fowler, P. Hansen, P. D. E. Monolopoulos in M. Zheng, Chemical Physics Letters **228** (1994) 478–484.

[2] D. Babić in N. Trinajstić, Fullerene Science and Technology **2** (1994), 343–356.

[3] S. Čopar, N. A. Clark, M. Ravnik in S. Žumer, *Soft Matter* **9** (2013), 8203–8209.

[4] T. Došlić, J. Math. Chem. **41** (2007), 183–192.

[5] A. Kekulé, *Über die Constitution des Benzols*, Berichte Der Deutschen Chemischen Gesellschaft **2** (1869), 362–365.

[6] L. Lovász in M. D. Plummer, *Matching theory*, North-Holland, 1986.

[7] M. Randić, *Journal of Chemical Information and Modeling* **44** (2004), 365–372.