Метод поиска выпуклых полиэдров с заданной точечной группой симметрии

Войтеховский Ю.Л. [1, 2], Степенщиков Д.Г. [2]

[1] *Санкт-Петербургский горный университет, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru*

[2] *Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru*

Аннотация. В предыдущих работах авторов перечислены и охарактеризованы точечными группами симметрии (т.г.с.) все выпуклые 4- … 12-эдры и простые 13- … 16-эдры (всего 27146775). Среди них найдены представители 24 кристаллографических (*1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3m, 4mm, mmm, -42m, -6m2, -3m, 6mm, 23, 4/mmm, 6/mmm, -43m, m-3m*) и 20 некристаллографических (*5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5m*) т.г.с. Неизвестны представители 8 кристаллографических т.г.с.: *422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432*. В этой статье дан метод поиска выпуклых полиэдров с заданными числом вершин (или граней) и т.г.с. Он основан на ограниченном переборе симметрических (0,1)-матриц специального вида, моделирующих матрицы смежности полиэдрических (3-связных планарных) графов.

Ключевые слова: выпуклый полиэдр, точечная группа симметрии, полиэдрический граф, матрица смежности.

A method to find convex polyhedra with a given symmetry point group

Voytekhovsky Y.L. [1, 2], Stepenshchikov D.G. [2]

[1] *Saint-Petersburg Mining University, voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru*

[2] *Geological Institute of KSC RAS, Apatity, stepen@geoksc.apatity.ru*

Abstract. All the convex 4- to 12-hedra and simple 13- to 16-hedra (27146775 in total) are enumerated and characterized by the symmetry point groups in the previous author's works. The representatives of 24 crystallographic (*1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3m, 4mm, mmm, -42m, -6m2, -3m, 6mm, 23, 4/mmm, 6/mmm, -43m, m-3m*) and 20 non-crystallographic (*5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5m*) symmetry point groups are among them. The representatives of 8 crystallographic symmetry point groups are unknown: *422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432*. A method to find convex polyhedra with a given number of vertices (or facets) and symmetry point group is given in the paper. It is based on the limited enumeration of the special symmetric (0,1)-matrices, which model the adjacency matrices of polyhedral (3-connected planar) graphs.

Key words: convex polyhedron, symmetry point group, polyhedral graph, adjacency matrix.

Введение

В предыдущих работах авторов (Войтеховский, Степенщиков, 2008 а, б) с помощью оригинальных алгоритмов и компьютерных программ впервые перечислены и охарактеризованы точечными группами симметрии (что адаптирует весьма рутинный результат к задачам кристалломорфологии) все выпуклые 4- … 12-эдры и простые 13- … 16-эдры (всего 27146775). Среди них есть представители 24 кристаллографических (*1, -1, 2, m, 3, 222, mm2, 4, -4, 2/m, 32, -6, 3m, 4mm, mmm, -42m, -6m2, -3m, 6mm, 23, 4/mmm, 6/mmm, -43m, m-3m*) и 20 некристаллографических (*5m, 7m, -8m2, 8mm, 9m, -10m2, -5m, 10mm, 11m, -12m2, -7m, -14m2, 8/mmm, -18m2, 10/mmm, -22m2, 12/mmm, -26m2, 14/mmm, -3-5m*) точечных групп симметрии (т.г.с.). Среди столь огромного многообразия выпуклых полиэдров не оказалось представителей 8 кристаллографических т.г.с.: *422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432*. Очевиден вопрос: как систематически найти выпуклые полиэдры с указанными т.г.с.? Интерес состоит именно в систематическом поиске, начиная с простейших (с минимальным числом граней или вершин, что эквивалентно в силу дуального перехода) полиэдров, поскольку примеры выпуклых полиэдров с любыми т.г.с. даны, например, в (Попов, Шафрановский, 1964, с. 336-357).

Метод

В статье (Voytekhovsky, 2016) предложен способ «именования» выпуклого полиэдра, позволяющий зафиксировать его комбинаторный тип (набор и способ соединения граней) в численном коде (имени). Последовательность операций следующая. (1) Нумеруем все вершины полиэдра числами от 1 до n. (2) Строим матрицу смежности n × n: на пересечении строки и столбца ставим 1, если соответствующие вершины соединены ребром (смежны) и 0 – в противном случае. (3) В силу симметричности матрицы она фиксируется верхним треугольником, который выписываем построчно. Полученная последовательность единиц и нулей представляет собой бинарный код (легко преобразуемый в десятичный). По имени-коду рёберный граф полиэдра восстанавливается однозначно. На рисунке 1 показана последовательность операций для тетраэдра, его бинарный код 111111, десятичный 63.

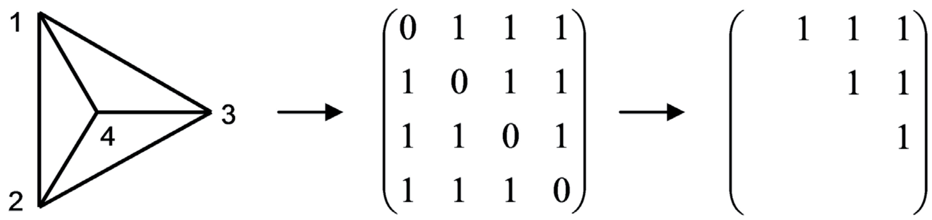

Рис. 1. Алгоритм нахождения имени (численного кода) выпуклого полиэдра через его рёберный граф и матрицу смежности вершин.

Fig. 1. Algorithm of finding the name (numerical code) of a convex polyhedron through its adjoint graph and adjacency matrix of vertices.

Легко показать, что для выпуклых полиэдров с числом вершин n > 4 при разной нумерации вершин будут получаться различные имена. Имеет место теорема: число имён выпуклого полиэдра равно n! / п.г.а., где п.г.а. – порядок группы автоморфизмов – численная характеристика т.г.с. Так, на рисунке 2 показаны все имена тетрагональной пирамиды (т.г.с. *4mm*, п.г.а. 8): 5! / 8 = 15.

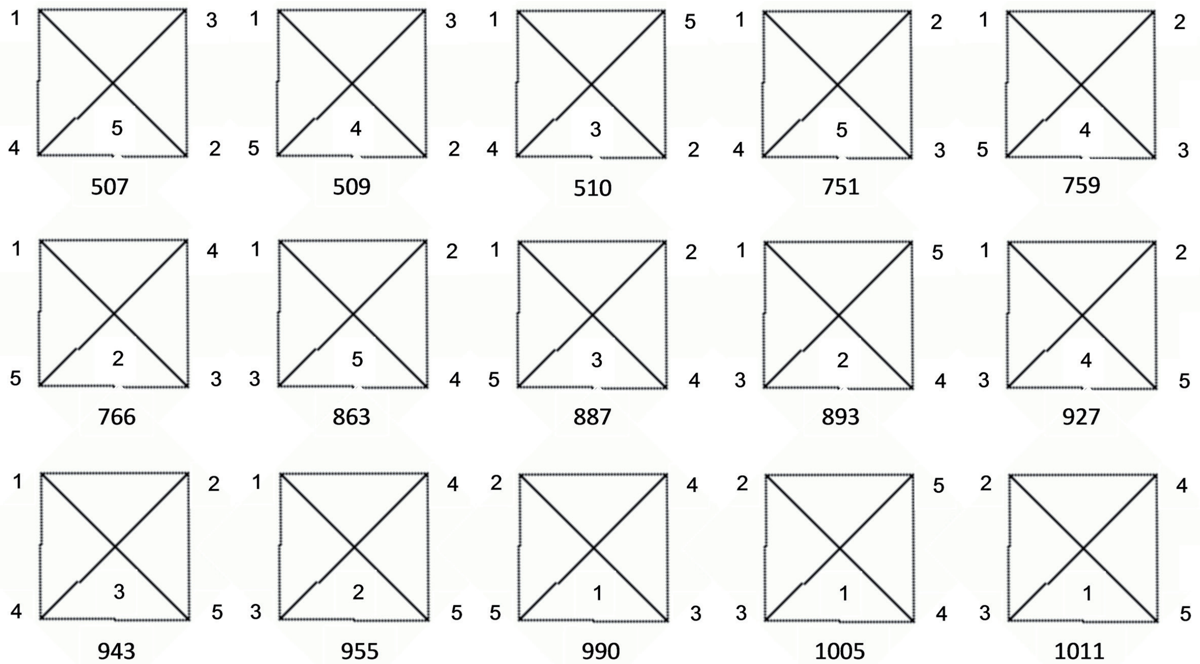

Рис. 2. Имена тетрагональной пирамиды, получаемые при различных нумерациях вершин.

Fig. 2. Names of a tetragonal pyramid obtained by different indexing of vertices.

https://doi.org/10.31241/FNS.2019.16.015

Из теоремы следует алгоритм поиска выпуклого полиэдра с заданной т.г.с. (1) Фиксируем класс n-вершинников, в котором будем искать выпуклый полиэдр с заданной т.г.с. и, следовательно, известным п.г.а. (2) Перечисляем бинарные имена-коды, соответствующие верхнему треугольнику матрицы смежности, с учётом теоремы, определяющей их точные нижнюю и верхнюю границы (Voytekhovsky, 2017). (3) Проверяем соответствующие рёберные графы на полиэдричность (3-связность и планарность). (4) Множество имён полиэдрических графов разбиваем на классы эквивалентности по признаку сводимости друг к другу симметричными перестановками строк и столбцов матриц смежности. Искомый полиэдр может находиться только в классе, содержащем n! / п.г.а. имён. (5) При наличии такового (таковых) убеждаемся в его (их) принадлежности к заданной т.г.с. Распознавание возможно по структуре группы перестановок строк и столбцов, сохраняющих матрицу смежности (Калужнин, Сущанский, 1979).

Заключение

Описанный алгоритм позволяет с ростом n рано или поздно найти выпуклый полиэдр с любой т.г.с. Единственный 4-вершинник – он же 4-гранник (тетраэдр) – имеет п.г.а. 24, т.г.с. *-43m*. Два 5-вершинника попадают в разные классы: п.г.а. 8, т.г.с. *4mm* и п.г.а. 12, т.г.с. *-6m2*. Из семи 6-вершинников три различимы уже по п.г.а.: п.г.а. 48, т.г.с. *m-3m*; п.г.а. 12, т.г.с. *-6m2*; п.г.а. 10, т.г.с. *5m*. Два 6-вершинника различимы лишь по т.г.с.: п.г.а. 2, т.г.с. *2* и *m*. Наконец, ещё два 6-вершинника неразличимы и по т.г.с.: п.г.а. 4, т.г.с. *mm2*. Таким образом, все стадии алгоритма нужны уже на ранней стадии поиска. Очередная задача – отыскание простейших выпуклых полиэдров с т.г.с. *422, 4/m, -3, 6, 622, 6/m, m-3, 432*, начиная с непростых 13-вершинников.

Литература

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. IV. Выпуклые полиэдры. Т. I. 4- … 12-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2008 а. 833 с.
2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. IV. Выпуклые полиэдры. Т. II. Простые 13- … 16-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2008 б. 828 с.
3. Калужнин Л.А., Сущанский В.И. Преобразования и перестановки. М.: Наука. 1979. 112 с.
4. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.: Высшая школа. 1964. 370 с.
5. Voytekhovsky Y.L. How to name and order convex polyhedra // Acta Cryst. 2016. A72. P. 582–585.
6. Voytekhovsky Y.L. Convex polyhedra with minimum and maximum names // Acta Cryst. 2017. A73. P. 271–273.