

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه یزد  
دانشکده ریاضی  
گروه علوم کامپیوتر

پایان نامه  
جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد  
علوم کامپیوتر

## تولید گراف‌های متناظر با فولرها

استاد راهنما:  
دکتر مهدیه هاشمی نژاد

استاد مشاور:  
دکتر محمدفرشی

پژوهش‌گر:  
محدثه خاکساری اشکذری

اسفند ۱۳۹۲



کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و

نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه

متعلق به دانشگاه یزد است.



## چکیده

گراف‌های متناظر با مولکول‌های فولرن، گراف‌های مسطح، سه منتظم و سه همبندی هستند که همه‌ی وجه‌های آن‌ها پنج‌ضلعی و شش‌ضلعی است. جدیدترین الگوریتم برای تولید گراف‌های متناظر با فولرن‌ها در سال ۲۰۱۲ ارائه شده است. اجرای این الگوریتم  $3/5$  برابر سریع‌تر از پرسرعت‌ترین تولیدکننده‌ی قبلی فولرن‌ها یعنی فولجن است و اولین برنامه بعد از فولجن است که برای تولید فولرن‌های با بیش از ۱۰۰ راس مفید است. در این پایان‌نامه این الگوریتم مورد مطالعه و بررسی قرار می‌گیرد.

نانلوله نیز نوع خاصی از فولرن است که ساختار استوانه‌ای شکل دارد و از دو قسمت بدنه و کلاهک تشکیل شده است. ساختار بدنه‌ی نانلوله وابسته به ساختار کلاهک است. در این پایان‌نامه به بررسی نتایج یک الگوریتم کارا برای تولید کلاهک‌های نانلوله‌ها می‌پردازیم. این الگوریتم در سال ۱۹۹۹ توسط برینکمن ارائه شده است.





# فهرست مطالب

۱	پیشگفتار	۱
۹	تعاریف	۲
۱۰	۱.۲ رابطه، افراز و گروه	۱۰
۱۱	۲.۲ نظریه گراف	۲۰
۱۱	۱.۲.۲ گراف	۲۱
۱۵	۲.۲.۲ مسیر و همبندی	۲۵
۱۶	۳.۲.۲ یکریختی گرافها	۳۰
۱۷	۴.۲.۲ الگوریتم جستجوی اول سطح	۴۰
۱۷	۵.۲.۲ گرافهای فولرن	۵۰
۲۵	۳ تولید گرافهای متناظر با فولرنها	۲۵
۲۶	۱.۳ برشهای یالی دوری در گرافهای فولرن	۲۶
۲۸	۱.۱.۳ ساخت برشهای یالی دوری	۲۸
۳۶	۲.۳ اعمال توسعه برای فولرنها	۳۶
۳۸	۱.۲.۳ الگوریتمها	۳۸
۴۸	۳.۳ تولید فولرنها	۴۸
۴۸	۱.۳.۳ الگوریتم ساخت فولرن	۴۸
۴۹	۲.۳.۳ حذف یکریختی	۴۹
۵۶	۳.۳.۳ بهینه سازی	۵۶

۶۳	.....	تولید فولرن‌های <i>IPR</i>	۴.۳
۶۴	.....	ارزیابی و نتایج	۵.۳
۶۵	.....	تولید کلاهک نانولوله‌ها	۴
۶۶	.....	مقدمه	۱.۴
۶۶	.....	تعاریف	۲.۴
۷۰	.....	ساخت	۳.۴
۸۶	.....	بهینه‌سازی الگوریتم ساخت	۴.۴
۸۸	.....	رد یکرختی	۵.۴
۹۳	.....	نتایج	۶.۴
۹۵	.....		آ
۱۰۷	.....		ب
۱۱۴	.....	واژه‌نامه فارسی به انگلیسی	
۱۱۶	.....	مراجع	

# فهرست تصاویر

۳	.....	باکی بال $(C_{60})$	۱.۱
۵	.....	نانولوله	۲.۱
۱۴	.....	یک گراف مسطح با ترتیب دورانی یال‌ها در جهت ساعت‌گرد.	۱.۲
		گراف قسمت (ب) تصویر آینه‌ای گراف مسطح قسمت (الف) است. (ترتیب دورانی یال‌ها	۲.۲
۱۴	.....	در جهت ساعت‌گرد در نظر گرفته شده است).	
۱۸	.....	فولرن.	۳.۲
۲۰	.....	ایجاد لوله‌ی نوع $(l, m)$ (مرز لوله با نقطه چین مشخص شده است).	۴.۲
۲۱	.....	کلاهک نوع $(4, 3)$ .	۵.۲
۲۲	.....	نانولوله‌ی نوع $(4, 3)$ .	۶.۲
۲۳	.....	ایجاد نیم‌لوله با چسبانندن کلاهک و بدنه‌ی نیم‌لوله به یکدیگر.	۷.۲
۲۹	..	با استفاده از عمل $O_1$ ، برش $k$ -یالی $C$ به برش $(k-1)$ -یالی $C_2$ تبدیل می‌شود.	۱.۳
۲۹		عمل $O_2$ ، برش $k$ -یالی $C$ با $n$ راس را به برش $k$ -یالی $C_2$ با $n-2$ راس تبدیل می‌کند.	۲.۳
		عمل $O_3$ ، برش $k$ -یالی $C$ با $n$ راس را به برش $k$ -یالی $C_2$ با $(n-2k)$ راس تبدیل	۳.۳
۳۰	.....	می‌کند.	
۳۰	.....	حالتی که $v_i$ و $v_j$ ( $j > i + 1$ ) همجوار هستند.	۴.۳
		حالتی که راس $w$ از گراف $H_2$ با رئوس $v_i$ و $v_j$ ( $j > i + 1$ ) روی ناحیه‌ی $O$ همجوار	۵.۳
۳۱	.....	هستند.	
۳۳	.....	شکل (الف): گراف $G_k$ و شکل (ب): گراف $C_2$ .	۶.۳
۳۴	.....	استفاده از عمل $O_2$ برای پنج‌ضلعی.	۷.۳

۳۴	تنها روش ممکن برای ساخت یک برش ۵-یالی دوری. . . . .	۸.۳
۹.۳	یک مثال از نانولوله نوع (۲و۶) و برش یالی دوری $C = \{e_1, e_2, e_3, \dots\}$ که یک برش	
۳۵	در طول شش ضلعی‌های $h_1, h_2, h_3, \dots$ است. . . . .	۳۵
۳۶	فولرن‌های کاهش‌ناپذیر. . . . .	۱۰.۳
۳۷	توسیع $F$ . . . . .	۱۱.۳
۳۷	توسیع $L$ . . . . .	۱۲.۳
۳۸	توسیع $B$ . . . . .	۱۳.۳
۳۹	پیکربندی وجه‌ها در حالت $k = 4$ . . . . .	۱۴.۳
۴۰	پیکربندی وجه‌ها در حالت $k = 3$ . . . . .	۱۵.۳
۴۱	پیکربندی وجه‌ها در حالت $1 \leq k \leq 2$ . . . . .	۱۶.۳
۴۲	$\pi$ دارای دو شکست در شش ضلعی‌های $h_1$ و $h_2$ است. . . . .	۱۷.۳
۴۴	حالت‌هایی که ممکن است وجه‌های همسایه‌ی مسیر $\pi$ یکی باشند. . . . .	۱۸.۳
۱۹.۳	$C_{28}$ با عمل $L$ توسعه داده شده است و سپس بدون این‌که $C_{28}$ در یکی از مراحل میانی	
۴۴	ظاهر شود فولرن‌های حاصل شده به $C_2$ کاهش یافته‌اند. . . . .	۴۴
۲۰.۳	$C_{28}$ با عمل $B_{\circ, \circ}$ توسعه داده شده است و سپس بدون این‌که $C_{28}$ در یکی از مراحل	
۴۵	میانی ظاهر شود فولرن‌های حاصل شده به $C_2$ کاهش یافته‌اند. . . . .	۴۵
۲۱.۳	تولید $C_{28}$ از $C_2$ با معرفی یک نوع توسعه اضافه. . . . .	۴۵
۲۲.۳	کلاهِک فولرن نوع $(5, 0)$ و قسمتی از بدنه‌ی فولرن نوع $(5, 0)$ را با استفاده از توسعه	
۴۶	$L$ توسعه داده‌ایم و سپس آن را به فولرنی که نانولوله نیست کاهش داده‌ایم. . . . .	۴۶
۲۳.۳	کلاهِک فولرن نوع $(5, 0)$ و قسمتی از بدنه‌ی فولرن نوع $(5, 0)$ را با استفاده از توسعه	
۴۶	$B$ توسعه داده‌ایم و سپس آن را به فولرنی که نانولوله نیست کاهش داده‌ایم. . . . .	۴۶
۲۴.۳	فولرن $C_{26}$ . . . . .	۴۷
۲۵.۳	دوگان توسعه‌های $L$ و $B$ . . . . .	۴۸
۲۶.۳	موقعیت پنج ضلعی جدید نسبت به موقعیت مسیر متصل کننده پنج ضلعی‌ها در کاهش $L$ . . . . .	۵۰
۲۷.۳	سه‌تایی‌های $(e_0, (3, 2), 1)$ و $(e_1, (2, 3), 0)$ کاهش‌های یکسانی را نمایش می‌دهند. . . . .	۵۱
۲۸.۳	رشته‌های $x_2, x_3$ و $x_4$ شامل درجه‌ی رئوس $v_2, v_3$ و $v_4$ به صورت صعودی هستند. . . . .	۵۲

- ۲۹.۳ زیرگراف  $G_i (i \leq \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor)$  از فولرن (۵-راس  $v$  با مربع نمایش داده شده، رئوس مرزی هر زیرگراف  $G_i$  با درجه‌ی ۳ به رنگ مشکی و رئوس مرزی هر زیرگراف  $G_i$  با درجه‌ی ۴ به رنگ سفید نشان داده شده‌اند.) لایه‌ی اضافه شده به لایه‌ی  $n$  با خط‌چین نمایش داده شده است. . . . . ۵۷
- ۳۰.۳ حالت‌هایی که ممکن است طول  $W$  تحت تاثیر توسیع افزایش یابد. . . . . ۵۹
- ۳۱.۳ یک قطعه ابتدایی توسیع  $L_2$ ، شامل پنج‌ضلعی‌های همجوار  $p_1$  و  $p_2$ . یکی از یال‌های  $e_1, e_2, e_3$  برابر یکی از یال‌های  $e_4, e_5, e_6$  است. . . . . ۶۰
- ۳۲.۳ یک قطعه ابتدایی توسیع  $B_{1,0}$ ، شامل پنج‌ضلعی‌های همجوار  $p_1$  و  $p_2$ . یکی از یال‌های  $e_1, e_2, e_3$  برابر یکی از یال‌های  $e_4, e_5, e_6$  است. . . . . ۶۰
- ۱.۴ وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب. . . . . ۶۷
- ۲.۴ تصویر بدنه نیم‌لوله‌ی  $(l, m)$  روی شبکه‌ی شش‌ضلعی‌ها. . . . . ۶۸
- ۳.۴ افزودن یک لایه از شش‌ضلعی‌ها به وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب. . . . . ۶۹
- ۴.۴ افزودن یک لایه از شش‌ضلعی‌ها به وصله‌ی شبه‌محدب. . . . . ۷۰
- ۵.۴ حذف یک ردیف از شش‌ضلعی‌ها از یال محدب تا یال مقعر (محل شروع توصیف فرم مرز با نقطه‌ی پررنگ نشان داده شده است). . . . . ۷۳
- ۶.۴ بررسی ایجاد یال مقعر بعد از استفاده از قوانین کاهش. . . . . ۷۵
- ۷.۴ بررسی طول وصله بعد از استفاده از قوانین کاهش. . . . . ۷۷
- ۸.۴ وصله  $P$  که در آن  $r_{j-1} \in R_I$  و  $r_j \notin R_I$  است. . . . . ۸۰
- ۹.۴ دو یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه  $I$  و  $J$  است. . . . . ۸۲
- ۱۰.۴ کم‌ترین تعداد یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه‌ی بین دو مولفه  $I$  و  $J$  یکی است. . . . . ۸۲
- ۱۱.۴ یک نمونه عمل ساخت که با وصله شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب به کار می‌رود. . . . . ۸۵
- ۱۲.۴ یک نمونه عمل ساخت که با وصله شبه‌محدبی که دارای دقیقاً سه یال محدب است، به کار می‌رود. . . . . ۸۵
- ۱۳.۴ تولید وصله‌هایی با مرز  $(l, m)$  از وصله شامل پنج، پنج‌ضلعی که دارای یک یال محدب باشد. . . . . ۸۶

- ۱۴.۴ کدگذاری وصله‌ی نشان‌دار (وصله‌ای که با  $M_1$  نشان‌دار شده پذیرفته می‌شود). . . . . ۹۱
- ۱۵.۴ حالت‌هایی که دو مسیر به فرم  $(۳۲)^m(۲۳)^l$  ممکن است یکدیگر را قطع کنند. . . . . ۹۱

فصل ۱

پیشگفتار

تولید گراف، مبحثی از نظریه گراف است که هدف اصلی آن طراحی و پیاده‌سازی الگوریتم‌هایی است که بتواند کلاس‌های مختلف از گراف‌ها را تولید نماید. یکی از کاربردهای شاخه تولید گراف، پیش‌بینی ساختار مولکول‌ها در شیمی است. فولرن‌ها مولکول‌های کروی کربن هستند که به دلیل خواص الکترونی و ساختار ویژه‌ی آن‌ها، مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. در ادامه به بعضی خواص فولرن‌ها اشاره می‌شود:

### خواص و کاربردهای فولرن‌ها

شکل زیبا و بی سابقه فولرن‌ها و خواص شگفت انگیز این مولکول‌ها، توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده است. پایدارترین و فراوان‌ترین فولرن‌ها انواع  $C_{60}$  و  $C_{70}$  هستند. بنابراین بیشتر خواص ذکر شده در مورد فولرن‌ها نیز روی این دو نوع متمرکز شده است.

- خاصیت روان‌سازی بالا؛ روان‌کاری در مقیاس نانومتری

مولکول‌های فولرن به وسیله پیوندهای ضعیفی که ناشی از نیروهای واندروالس بین آن‌هاست به هم می‌چسبند. این نیروهای نگهدارنده فولرن‌ها در کنار هم مشابه نیروهای موجود بین لایه‌های گرافیت است. بنابراین برخی از خواص فولرن‌ها مشابه خواص گرافیت می‌باشد. به عنوان مثال اخیراً از فولرن‌ها به جای گرافیت در کاربردهای روان‌کاری در مقیاس نانومتری استفاده شده است.

- حساس در برابر نور؛ کاربردهای فوتونیک

فولرن‌ها در برابر نور بسیار حساس بوده و با تغییر طول موج نور خواص الکتریکی این مواد به شدت تغییر می‌کند. بنابراین کاربردهای فوتونیک زیادی برای این مواد در آینده متصور شده است.

- ساختار توخالی؛ مکانی برای قرارگیری عناصر

می‌توان درون مولکول‌های توخالی فولرن‌ها را توسط عناصر دیگر پر کرد. به عنوان مثال با قرار دادن برخی عناصر فلزی درون فولرن‌ها خواص الکتریکی آن‌ها بهبود یافته است. اخیراً از چنین ساختارهایی در تولید دستگاه‌های تصویربرداری تشدید مغناطیسی ( $MRI$ ) در پزشکی استفاده شده است.

- خواص زیست‌سازگاری؛ دارورسانی

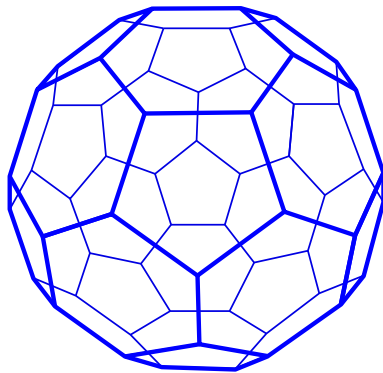
درون فولرن‌ها می‌توان برخی آنزیم‌ها و یا داروها و هورمون‌های مورد نیاز بدن را قرار داد. به این ترتیب در نانوپزشکی می‌توان از این مواد استفاده نمود. در یکی از جدیدترین کاربردهای فولرن‌ها برای مبارزه



با ویروس ایدز، آنزیم ضد این ویروس درون فولرن‌ها قرار داده شده و وارد بدن شده است. مداوای بیماری ایدز با چنین روشی امیدوارکننده بوده است. علاوه بر این، کشف شده که احتمالاً فولرن‌ها برهم کنش‌های بیولوژیکی با ویروس *HIV* دارند و به علاوه می‌توانند در مبارزه با این ویروس به آنزیم‌های دیگر کمک کنند.

به دلیل اهمیت فولرن‌ها، در این پایان‌نامه به مطالعه‌ی جدیدترین الگوریتم موجود برای تولید کلاس گراف‌های متناظر با فولرن‌ها می‌پردازیم.

اولین مولکول فولرن در سال ۱۹۸۵ توسط کروتو<sup>۱</sup> و همکارانش کشف شد [۲۳] که با نام معروف باکی‌بال<sup>۲</sup> شناخته می‌شود (شکل (۱.۱)).



شکل ۱.۱: باکی‌بال ( $C_{60}$ )

کشف باکی‌بال باعث شد تحقیقات زیادی در مورد فولرن‌ها انجام شود که در نتیجه لیست کاملی از ایزومرهای فولرن تولید شد. در زمینه تولید گراف نیز لیست کردن ایزومرهای فولرن با یک تعداد داده شده از اتم‌های کربن به یک مسئله قابل توجه تبدیل شد. اولین روش برای تولید ایزومرهای فولرن، الگوریتم مارپیچ<sup>۳</sup> بود که توسط مانلیپولوس<sup>۴</sup> در سال ۱۹۹۱ ارائه شد [۲۷]. در [۲۶] یک نمونه ایزومر فولرن توسط مانلیپولوس و فولر<sup>۵</sup> ارائه شده است که توسط الگوریتم مارپیچ تولید نمی‌شود. بنابراین الگوریتم مارپیچ، الگوریتم کاملی

<sup>۱</sup>Kroto

<sup>۲</sup>Buckyball

<sup>۳</sup>Spiral

<sup>۴</sup>Manolopoulos

<sup>۵</sup>Fowler

برای تولید فولرن‌ها نیست.

البته الگوریتم ماریچ بعداً اصلاح شد و یک الگوریتم کامل به دست آمد ولی الگوریتم جدید کارا نیست [۲۵]. در سال ۱۹۹۵ یوشیدا<sup>۶</sup> و اوساوا<sup>۷</sup> [۳۰] الگوریتم متفاوتی را با استفاده از شبکه‌های تاشو<sup>۸</sup> ارائه دادند ولی کامل بودن آن تاکنون ثابت نشده است.

روش‌های دیگری هم توسط لیو<sup>۹</sup> [۲۴] و سا<sup>۱۰</sup> [۲۹] شرح داده شده است ولی الگوریتم‌های کارایی نیستند. الگوریتمی نیز در سال ۱۹۹۷ توسط برینکمن<sup>۱۱</sup> و درس<sup>۱۲</sup> [۳] ارائه شد که تا سال ۲۰۱۲ موفق‌ترین الگوریتم در زمینه تولید فولرن بوده است و کامل بودن آن اثبات شده است. این الگوریتم در برنامه‌ای به نام فولجن<sup>۱۳</sup> پیاده‌سازی شده است. ایده اصلی این الگوریتم چسباندن قطعاتی به هم است که آن قطعات دارای مرز با مسیر زیگزاگ هستند. یک اشتباه ساده در برنامه باعث بروز خطایی شده که اولین بار در ۱۳۶ راس اتفاق می‌افتد. به دلیل این خطا بعضی اعداد نادرست در لیست‌هایی از مقاله برینکمن و درس [۳] وجود دارد.

روش دیگر تولید فولرن‌ها این است که با شروع از مجموعه‌ی ساده‌ای از ایزومرها و با استفاده متوالی از یک مجموعه اعمال توسعه، فولرن را تولید کرد. منظور از عمل توسعه این است که قطعه‌ای از فولرن را با یک قطعه بزرگ‌تر که هر دو مرز یکسانی دارند جابجا کنیم. از نظر فعالیت شیمیایی، در عمل توسعه به عنوان یک فرآیند شیمیایی، باید از قطعه‌های خیلی کوچک برای جابجایی استفاده شود. از نتایج ارائه شده توسط برینکمن در مقاله [۱۰] استنباط می‌شود که هیچ مجموعه متناهی از اعمال توسعه وجود ندارد که بتواند همه فولرن‌ها را تولید کند. بنابراین لازم است که هر ساختار بازگشتی برای تولید فولرن تعداد نامتناهی از اعمال توسعه را به کار ببرد. در [۶] برینکمن جابجایی قطعه‌های کوچک را مورد بررسی قرار داده و دو گروه نامتناهی از اعمال توسعه را تولید کرده است. این اعمال می‌تواند همه فولرن‌ها با حداقل ۲۰۰ راس را تولید کند ولی در مقاله [۱۰] درستی روش برینکمن رد شده است.

---

<sup>۶</sup>Yoshida

<sup>۷</sup>Osawa

<sup>۸</sup>Folding nets

<sup>۹</sup>Liu

<sup>۱۰</sup>Sah

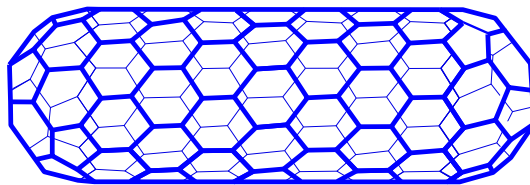
<sup>۱۱</sup>Brinkmann

<sup>۱۲</sup>Dress

<sup>۱۳</sup>Fullgen

در سال ۲۰۰۸ هاشمی نژاد، فلیسنر<sup>۱۴</sup> و مک‌کی<sup>۱۵</sup> [۱۹] یک ساختار بازگشتی را با استفاده از اعمال توسیع برای تولید کلاس همه فولرن‌ها شرح دادند. با استفاده از این ساختار، برنامه‌ی جدیدی در سال ۲۰۱۲ برای تولید فولرن‌های متناهی ارائه شد [۸] که اجرای آن ۳/۵ برابر سریع‌تر از پر سرعت‌ترین تولید کننده‌ی قبلی فولرن‌ها یعنی فولجن است و اولین برنامه بعد از فولجن است که برای تولید فولرن‌های با بیش از ۱۰۰ راس قابل استفاده است. اجرای این برنامه نشان می‌دهد که لیست ارائه شده توسط برنامه‌ی فولجن در ۱۳۶ راس صحیح نیست.

نانولوله نیز نوع خاصی از فولرن است که ساختار استوانه‌ای شکل دارد (شکل (۲.۱)). نانولوله‌های کربن اولین بار در سال ۱۹۹۱ توسط سومیو ایجیما<sup>۱۶</sup> کشف شد [۲۰].



شکل ۲.۱: نانولوله

### خواص و کاربردهای نانولوله‌های کربنی

کشف نانولوله‌های کربنی، موجب شده است که فعالیت‌های تحقیقاتی گسترده‌ای در علوم به بحث نانو ساختارهای کربنی و کاربردهای آن‌ها اختصاص یابد. دلیل عمده‌ی این مسئله تکامل ساختاری مورد انتظار آن‌ها، اندازه کوچک، چگالی کم، سختی بالا، استحکام بالا (استحکام کششی جداره‌ی یک نانولوله کربنی تقریباً ۱۰۰ برابر بیشتر از آلومینیوم است) و خواص عالی الکتریکی آن‌هاست. در نتیجه نانولوله‌های کربنی ممکن است به طور گسترده در تقویت مواد، صفحه نمایش مسطح با انتشار میدانی، حسگرهای شیمیایی، دارو رسانی و علم نانو الکترونیک کاربرد یابند. در ادامه به مواردی از کاربردهای نانولوله‌های کربنی اشاره خواهد شد.

<sup>۱۴</sup>Fleischner

<sup>۱۵</sup>McKay

<sup>۱۶</sup>Sumio Iijima

- به عنوان تقویت کننده در کامپوزیت‌ها

نانولوله‌ها یکی از مستحکم‌ترین مواد به شمار می‌روند. این موضوع، کاربرد نانولوله‌های کربنی را به عنوان ماده‌ی پرکننده در تولید نانوکامپوزیت‌ها به خوبی روشن می‌سازد. کامپوزیت‌های با پایه نانولوله‌ی کربنی دارای نسبت استحکام به وزن بالا هستند و مصارف گسترده‌ای را در صنعت خواهند داشت.

- استفاده در نمایشگرهای تشعشع میدانی

یکی از مشکلات دستگاه‌های نشر میدان امروزی، عدم پایداری میدان‌های تولیدی در بازه‌های زمانی طولانی است. این مشکل را می‌توان با استفاده از نانولوله کربنی حل نمود. بیش از ۷۰۰ مقاله تحقیقاتی در رابطه با کاربردهای نشر میدان نانولوله‌های کربنی منتشر شده است. این آمار بیانگر اهمیت موضوع است. برای مثال، مزایای استفاده از نمایشگرهای تولید شده با نانولوله‌ی کربنی نسبت به نمایشگرهای کریستال مایع، سرعت واکنش بالاتر نسبت به محرک‌های الکتریکی، مصرف انرژی کم‌تر، درخشندگی مناسب‌تر، میدان مغناطیسی پایین در هنگام روشن کردن دستگاه و دمای کاری بالاتر است. بر پایه همین مزیت‌ها، شرکت‌هایی مانند سامسونگ و NEC نمایشگرهای رنگی با استفاده از نانولوله کربنی را تولید کرده است. تلویزیون‌های ساخته شده با این تکنولوژی در اوایل سال ۲۰۰۶ روانه بازار شد.

- استفاده از نانولوله‌های تک دیواره در صنعت الکترونیک

نانولوله‌ها به میزان قابل توجهی سخت و قوی بوده و هادی جریان الکتریسیته و گرما می‌باشند. این خواص سبب استفاده از این مواد در صنعت الکترونیک شده است. لامپ‌های تولید شده با نانولوله‌های کربنی هزینه تولید کم‌تری دارند. به علاوه عمر طولانی‌تر و ثبات رنگ بیش‌تر نسبت به لامپ‌های معمولی، از مزایای دیگر این لامپ‌هاست.

- ساختار تو خالی نانولوله و کاربرد به عنوان ذخیره کننده و پیل سوختی

نانولوله‌ها، ساختارهای کربنی تو خالی هستند. بنابراین، امکان قرار دادن مواد خارجی در داخل آن‌ها وجود دارد.

به طور مثال، با قرار دادن فلزات درون نانولوله‌ها می‌توان خواص الکتریکی این مواد را بهبود بخشید.

• استفاده در تهیه جلیقه‌های ضد گلوله

به دلیل انعطاف‌پذیری بالایی که نانولوله‌ها دارند، از آن‌ها در ساخت جلیقه‌های ضد چاقو و ضد گلوله استفاده می‌شود.

هر نانولوله از دو قسمت کلاهک و بدنه تشکیل شده است که ساختار بدنه، وابسته به ساختار کلاهک است. به عبارت دیگر برای هر کلاهک، بدنه‌ی یکتایی وجود دارد ولی ممکن است کلاهک‌های متفاوت بدنه‌ی یکسانی داشته باشند. بنابراین برای تولید گراف‌های متناظر با نانولوله‌ها کافی است کلاهک‌های آن‌ها تولید شوند. روش‌های مختلفی برای شمارش همه کلاهک‌های غیر یکرخت که با یک بدنه نانولوله‌ی دلخواه سازگاری دارند پیشنهاد شده است ولی بیش‌تر این روش‌ها یا درست نیستند و یا قادر نیستند کلاهک‌های نانولوله‌های با قطر بزرگ را در زمان مورد قبولی شمارش کنند [۱۶، ۱]. اولین الگوریتم کارا و قابل قبولی که برای شمارش کلاهک‌های نانولوله ارائه شد الگوریتم شرح داده شده در مقاله [۵] است. در فصل ۱ به بیان تعاریف و مفاهیم اولیه‌ی مورد استفاده در پایان‌نامه پرداخته می‌شود. در فصل ۲ پایان‌نامه ساختار بازگشتی که در مقاله‌ی [۱۹] شرح داده شده است، به تفصیل بیان می‌شود.

در فصل ۳ به بررسی نتایج الگوریتم بیان شده در [۵] و بیان میزان بهبود کارایی الگوریتم‌های اولیه می‌پردازیم.



## فصل ۲

### تعاريف

در این فصل به بیان تعاریف و مفاهیم اولیه‌ی مورد استفاده در پایان‌نامه پرداخته می‌شود. این تعاریف مطابق با تعاریف مراجع [۸، ۱۱، ۱۳، ۱۴] هستند.

## ۱.۲ رابطه، افراز و گروه

تعریف ۱.۱.۲ برای مجموعه‌ی  $S$ ، هر زیرمجموعه‌ی  $R$  از  $S \times S$  یک رابطه<sup>۱</sup> روی مجموعه‌ی  $S$  است. اگر  $(x, y) \in R$  باشد می‌نویسیم  $xRy$ .

رابطه‌ی  $R$  روی مجموعه‌ی  $S$  یک رابطه‌ی هم‌ارزی<sup>۲</sup> است، اگر دارای ویژگی‌های زیر باشد:

• بازتابی؛ یعنی به ازای هر  $x \in S$ ،  $xRx$ ،

• متقارن؛ یعنی اگر  $xRy$  باشد، آنگاه  $yRx$  است و

• تراگذری باشد؛ یعنی  $xRy$  و  $yRz$  ایجاب می‌کند  $xRz$ .

تعریف ۲.۱.۲ مجموعه شمارش‌پذیر  $\mathcal{P}$  یک افراز<sup>۳</sup> از مجموعه  $X$  نامیده می‌شود اگر ویژگی‌های زیر را داشته باشد:

• مجموعه‌ای از زیرمجموعه‌های ناتهی از  $X$  باشد.

$$X = \bigcup_{P \in \mathcal{P}} P$$

• برای هر دو عضو متمایز  $P_1$  و  $P_2$  از  $\mathcal{P}$  داریم  $P_1 \cap P_2 = \emptyset$ .

تعریف ۳.۱.۲ یک عمل دوتایی روی مجموعه ناتهی  $G$  تابعی است مانند  $G \times G \rightarrow G$  :  $*$  که به هر عضو

$(a, b)$  از  $G \times G$  یک عضو یکتا مانند  $C$  از  $G$  را نسبت می‌دهد.

لازم به یادآوری است که  $G \times G$  حاصل ضرب دکارتی  $G$  در خودش است.

با توجه به تعریف یک عمل دوتایی، یک عمل دوتایی مانند  $*$  روی یک مجموعه ناتهی  $G$  باید دارای

شرایط زیر باشد:

<sup>۱</sup>Relationship

<sup>۲</sup>Equivalent

<sup>۳</sup>Partition



- عمل دوتایی روی کل دامنه خود یعنی  $G \times G$  تعریف شده باشد.
- عمل دوتایی  $*$  یک تابع خوش تعریف از  $G \times G$  به  $G$  باشد، یعنی به هر عضو  $G \times G$  عنصر یکتایی از  $G$  را نسبت می‌دهد.
- حاصل ترکیب دو عضو  $(a, b)$  تحت یک عمل دوتایی باید متعلق به  $G$  باشد. به عبارت دیگر مجموعه  $G$  نسبت به عمل دوتایی خود بسته باشد.
- این که  $*$  یک عمل دوتایی تعریف شده در مجموعه ناتهی  $G$  است را با نماد  $(G, *)$  نمایش می‌دهیم و برای هر  $(a, b) \in G \times G$ ، حاصل عمل  $*$  روی زوج مرتب  $(a, b)$  را به صورت  $a * b$  نشان می‌دهیم.
- تعریف ۴.۱.۲ اگر  $G$  یک مجموعه و  $G \times G \rightarrow G : *$  یک عمل روی  $G$  باشد، گوئیم  $G$  تحت عمل  $*$  یک گروه<sup>۴</sup> است، هرگاه دارای ویژگی‌های زیر باشد:
  - شرکت‌پذیری: برای هر سه عضو  $a, b, c$  از  $G$ ،  $a * (b * c) = (a * b) * c$ .
  - عضو همانی داشته باشد: عضوی مانند  $e \in G$  وجود داشته باشد به طوری که به ازای هر  $a \in G$ ،  $a * e = e * a = a$ .
  - هر عضو در گروه، عضو معکوس داشته باشد: به ازای هر عضو  $a$  از  $G$ ، عضوی مانند  $b \in G$  وجود داشته باشد به طوری که  $a * b = b * a = e$  است که  $e$  عضو همانی گروه است.
- تعریف ۵.۱.۲ یک  $k$ -تایی  $(a_1, \dots, a_k)$  از نظر لغت نامه‌ای<sup>۵</sup> کوچک‌تر از  $k$ -تایی  $(b_1, \dots, b_k)$  است، اگر و تنها اگر در اولین  $i$  ای که  $a_i$  و  $b_i$  متفاوت هستند،  $a_i < b_i$  ( $1 \leq i \leq k$ ) باشد.

## ۲.۲ نظریه گراف

### ۱.۲.۲ گراف

تعریف ۱.۲.۲ زوج مرتب  $G = (V, E)$  که  $V$  یک مجموعه متناهی ناتهی از عناصر به نام راس و  $E$  مجموعه‌ی متناهی از زوج‌های نامرتب از اعضای مجموعه  $V$  است یک گراف نامیده می‌شود. مجموعه‌ی  $V$

<sup>۴</sup>Group

<sup>۵</sup>Lexicographically

را مجموعه راس و مجموعه  $E$  را مجموعه یال گراف  $G$  گویند.

از نقاط برای نشان دادن رئوس گراف استفاده می‌شود و یال‌های گراف را به صورت منحنی‌هایی که این نقاط را به هم متصل می‌کنند، نشان می‌دهیم.

گراف  $G' = (V', E')$  زیرگرافی از  $G = (V, E)$  نامیده می‌شود، اگر  $V'$  زیرمجموعه‌ای از  $V$  و  $E'$  زیرمجموعه‌ای از  $E$  باشد.

یال  $\{u, v\}$  را به صورت  $uv$  نشان می‌دهیم و رئوس  $u$  و  $v$  را نقاط انتهایی<sup>۶</sup> یال می‌نامیم. تعداد یال‌هایی که از راس  $v$  می‌گذرند را درجه<sup>۷</sup> راس  $v$  می‌گوییم. رئوس  $u$  و  $v$  را همجوار<sup>۸</sup> گوئیم هرگاه  $uv \in E$  باشد.

تعریف ۲.۲.۲. انتساب رنگ‌ها به رئوس یک گراف به طوری که رئوس همجوار، رنگ‌های متفاوتی داشته باشند، را رنگ‌آمیزی راسی<sup>۹</sup> یا رنگ‌آمیزی گراف گویند.

دو یال در مجموعه  $E$  همجوار هستند، اگر حداقل یکی از نقاط انتهایی آن‌ها یکسان باشد. دو یال در یک گراف موازی<sup>۱۰</sup> هستند، اگر نقاط انتهایی آن‌ها یکی باشد و اگر هر دو نقطه انتهایی یال یکسان باشد، یال را طوقه<sup>۱۱</sup> گوئیم.

### تعریف ۳.۲.۲

- گراف ساده<sup>۱۲</sup> گرافی است که یال موازی و طوقه نداشته باشد.
- گراف  $k$ -منتظم<sup>۱۳</sup> گرافی است که درجه هر راس آن برابر  $k$  است.
- گراف مسطح<sup>۱۴</sup> گرافی است که بتوان آن را در صفحه طوری رسم کرد که یال‌های آن به جز در رئوس انتهایی، یکدیگر را قطع نکنند.

---

<sup>۶</sup>Endpoints

<sup>۷</sup>Degree

<sup>۸</sup>Adjacent

<sup>۹</sup>Vertex colouring

<sup>۱۰</sup>Parallel

<sup>۱۱</sup>Loop

<sup>۱۲</sup>Simple graph

<sup>۱۳</sup> $k$ -regular

<sup>۱۴</sup>Planar graph

• اگر گراف طوری در صفحه رسم شده باشد که یال‌های آن یکدیگر را قطع نکنند، آن را **گراف صفحه‌ای**<sup>۱۵</sup> گویند.

منظور از رسم **سطح گراف**  $G$ ، این است که گراف  $G$  را به صورت یک گراف صفحه‌ای رسم کنیم.

**تعریف ۴.۲.۲** در گراف صفحه‌ای، ناحیه‌ای که توسط چند یال محصور شده باشد را **وجه**<sup>۱۶</sup> می‌نامیم.

یال‌هایی که یک وجه را احاطه کرده‌اند، یال‌های همجوار با وجه گویند و اندازه وجه برابر تعداد یال‌هایی است که با آن وجه همجوار هستند. دو وجه، همجوار هستند، اگر دارای یال مشترک باشند. اگر وجهی با  $k$  یال احاطه شده باشد، وجه را  **$k$ -ضلعی** می‌نامند.

**قضیه ۵.۲.۲** (خم ژوردان برای چندضلعی‌ها): [۱۴] برای هر چندضلعی  $P \subseteq \mathbb{R}^2$ ، مجموعه‌ی  $\mathbb{R}^2 \setminus P$  دقیقاً دو ناحیه دارد که چندضلعی  $P$  مرز بین دو ناحیه است.

هر گراف سطح دارای یک وجه نامتناهی است که **وجه خارجی**<sup>۱۷</sup> نامیده می‌شود و سایر وجه‌ها که متناهی هستند **وجه داخلی**<sup>۱۸</sup> نامیده می‌شوند.

در رسم سطح گراف سطح، رئوس و یال‌هایی که در وجه‌های داخلی گراف سطح هستند، رئوس و یال‌های داخلی گراف سطح نامیده می‌شوند و رئوس و یال‌هایی که همجوار با وجه خارجی هستند را رئوس و یال‌های مرزی گراف سطح گوییم.

ساختار ترکیبیاتی یک گراف سطح را می‌توان با ترتیب دورانی یال‌های همجوار با هر راس توصیف کرد. یک **جانشانی**<sup>۱۹</sup> از یک گراف سطح، ترتیب دورانی رئوس همجوار با هر راس در یک رسم سطح از آن گراف است. مثلاً در شکل (۱.۲) ترتیب دورانی را ساعت‌گرد در نظر گرفته‌ایم.

در ادامه‌ی پایان نامه، منظور ما از گراف سطح، گراف سطحی است که یک جانشانی از آن داده شده باشد. اگر دو رسم سطح از گراف  $G$  دارای جانشانی یکسانی باشند، می‌گوییم دو گراف دارای جانشانی معادل هستند.

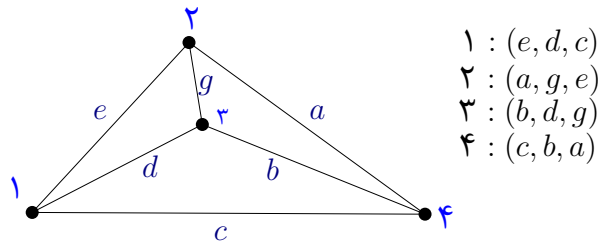
<sup>۱۵</sup>Plane graph

<sup>۱۶</sup>Face

<sup>۱۷</sup>Outer face

<sup>۱۸</sup>Inner face

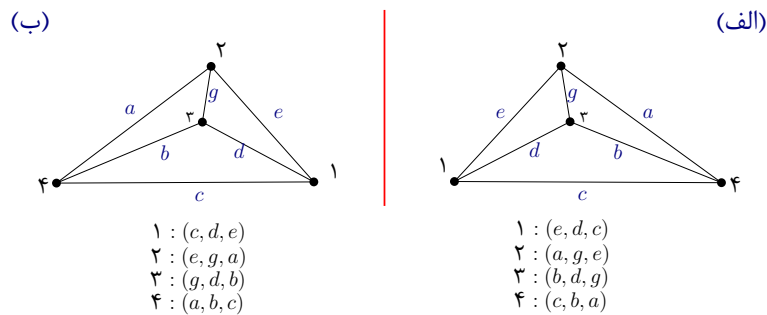
<sup>۱۹</sup>Embedding



- ۱ : (e, d, c)
- ۲ : (a, g, e)
- ۳ : (b, d, g)
- ۴ : (c, b, a)

شکل ۱.۲: یک گراف مسطح با ترتیب دورانی یال‌ها در جهت ساعت‌گرد.

تصویر آینه‌ای<sup>۲۰</sup> یک گراف مسطح  $G$ ، گراف مسطحی است که مجموعه یال‌ها و رئوس آن با  $G$  یکی است و جانشانی آن برابر با معکوس ترتیب دورانی یال‌ها در هر راس از  $G$  است. به عبارت دیگر تصویر آینه‌ای یک گراف از بازتاب گراف حول یک خط به دست می‌آید. به عنوان مثال، در شکل (۲.۲) قسمت (ب) تصویر آینه‌ای گراف مسطح نشان داده شده در قسمت (الف) است.



- ۱ : (c, d, e)
- ۲ : (e, g, a)
- ۳ : (g, d, b)
- ۴ : (a, b, c)

- ۱ : (e, d, c)
- ۲ : (a, g, e)
- ۳ : (b, d, g)
- ۴ : (c, b, a)

شکل ۲.۲: گراف قسمت (ب) تصویر آینه‌ای گراف مسطح قسمت (الف) است. (ترتیب دورانی یال‌ها در جهت ساعت‌گرد در نظر گرفته شده است.)

تعریف ۶.۲.۲<sup>۲۱</sup> مثلث‌بندی<sup>۲۱</sup>، گراف مسطحی است که همه وجه‌های آن با سه یال محدود شده باشند یا به عبارتی همه وجه‌ها مثلث باشند.

تعریف ۷.۲.۲<sup>۲۲</sup> گراف دوگان<sup>۲۲</sup> یک گراف مسطح همبند  $G$ ، گراف مسطحی است که از گراف  $G$  با جابجا کردن نقش رئوس و وجه‌ها به دست می‌آید که در این صورت مجموعه رئوس گراف دوگان همان مجموعه

<sup>۲۰</sup> Mirror image

<sup>۲۱</sup> Triangulation

<sup>۲۲</sup> Dual graph

وجه‌های گراف  $G$  است و دو راس در گراف دوگان همجواریند اگر و تنها اگر دو وجه متناظر آن‌ها در گراف  $G$  در یک یال مشترک باشند. ترتیب دورانی یال‌ها حول یک راس در گراف دوگان از ترتیب دورانی یال‌ها حول وجه متناظر در گراف  $G$  تبعیت می‌کند.

## ۲.۲.۲ مسیر و همبندی

تعریف ۸.۲.۲ یک گشت<sup>۲۳</sup> در گراف  $G(V, E)$  دنباله ناتهی از رئوس و یال‌ها به صورت  $e_k = v_k v_{k+1} \in E, 1 \leq k \leq r-1$  است به طوری که به ازای  $v_1, e_1, v_2, e_2, \dots, e_{r-1}, v_r$  باشد. راس  $v_1$  راس آغازی و راس  $v_r$  راس پایانی گشت  $w$  نامیده می‌شود.  $w$  را یک گشت بین  $v_1$  و  $v_r$  گویند.

گشتی که در آن هیچ راسی بیش از یک بار ظاهر نشود را مسیر<sup>۲۴</sup> می‌نامیم. طول<sup>۲۵</sup> مسیر برابر تعداد یال‌های موجود در مسیر است. گشت  $v_1, e_1, v_2, e_2, \dots, e_{r-1}, v_r$  یک دور<sup>۲۶</sup> است، اگر  $v_1 = v_r$  باشد.

تعریف ۹.۲.۲ گراف همبند<sup>۲۷</sup>، گرافی است که بین هر دو راس آن حداقل یک مسیر وجود داشته باشد.

قضیه ۱۰.۲.۲ [۱۴] (فرمول اویلر): اگر  $G$  گراف مسطح همبند با  $n$  راس،  $m$  یال و  $l$  وجه باشد، آنگاه:

$$n - m + l = 2$$

تعریف ۱۱.۲.۲ راسی از گراف که حذف آن، باعث افزایش تعداد مولفه‌های گراف می‌شود را راس برشی گویند.

تعریف ۱۲.۲.۲ گراف همبند  $G$  را سه همبند<sup>۲۸</sup> گوئیم اگر با حذف کمتر از ۳ راس از  $G$ ، گراف حاصل، همبند باشد.

<sup>۲۳</sup>Walk

<sup>۲۴</sup>Path

<sup>۲۵</sup>Length

<sup>۲۶</sup>Cycle

<sup>۲۷</sup>Connected graph

<sup>۲۸</sup>Three connected

قضیه ۱۳.۲.۲ (ویتنی) [۱۴]<sup>۲۹</sup> هر دو رسم مسطح از یک گراف سه همبند، دارای جانشانی معادل هستند.

## ۳.۲.۲ یکرختی گراف‌ها

تعریف ۱۴.۲.۲ [۱۱] فرض کنید  $G_1 = (V_1, E_1)$  و  $G_2 = (V_2, E_2)$  دو گراف باشند. یک یکرختی<sup>۳۰</sup> از  $G_1$  به  $G_2$  یک جفت نگاشت دوسویی  $\phi: V_1 \rightarrow V_2$  و  $\psi: E_1 \rightarrow E_2$  است که حافظ همجواری باشد، یعنی  $uv \in E_1$  اگر و فقط اگر  $\psi(uv) = \phi(u)\phi(v) \in E_2$  است. گوییم  $G_1$  با  $G_2$  یکرخت است، اگر یک یکرختی از  $G_1$  به  $G_2$  وجود داشته باشد و به صورت  $G_1 \cong G_2$  نشان می‌دهیم.

یک یکرختی حفظ‌کننده جهت<sup>۳۱</sup> از  $G_1$  به  $G_2$  یک یکرختی  $(\phi, \psi)$  از  $(V_1, E_1)$  به  $(V_2, E_2)$  است که جانشانی را حفظ می‌کند، یعنی اگر  $(e_1, e_2, \dots, e_k)$  ترتیب دوری یال‌های همجوار با راس  $v \in V_1$  در گراف  $G_1$  باشد، آنگاه  $(\psi(e_1), \psi(e_2), \dots, \psi(e_k))$  ترتیب دوری یال‌های همجوار با راس  $\phi(v) \in V_2$  در گراف  $G_2$  باشد. [۱۱]

یک یکرختی معکوس‌کننده جهت<sup>۳۲</sup> ترتیب دوری در هر راس را معکوس می‌کند، یعنی اگر  $(e_1, e_2, \dots, e_k)$  ترتیب دوری یال‌های همجوار با راس  $v \in V_1$  در گراف  $G_1$  باشد، آنگاه  $(\psi(e_k), \psi(e_{k-1}), \dots, \psi(e_1))$  ترتیب دوری یال‌های همجوار با راس  $\phi(v) \in V_2$  در گراف  $G_2$  باشد. [۱۱]

تعریف ۱۵.۲.۲ خودریختی<sup>۳۳</sup>، یک یکرختی از  $G$  به  $G$  است.

ترکیب دو خودریختی یک خودریختی دیگر را تشکیل می‌دهد. مجموعه‌ی خودریختی‌های  $G$  تحت عمل ترکیب توابع یک گروه ایجاد می‌کند که گروه خودریختی<sup>۳۴</sup> گراف  $G$  نامیده می‌شود.

<sup>۲۹</sup>Whitney theorem

<sup>۳۰</sup>Isomorphism

<sup>۳۱</sup>Orientation preserving isomorphism

<sup>۳۲</sup>Orientation reversing isomorphism

<sup>۳۳</sup>Automorphism

<sup>۳۴</sup>Automorphism group

## ۴.۲.۲ الگوریتم جستجوی اول سطح

الگوریتم جستجوی اول سطح یا  $BFS$  یکی از ساده‌ترین الگوریتم‌ها برای پیمایش یک گراف است که روش کار آن به صورت زیر می‌باشد.

گراف  $G = (V, E)$  و یک راس مشخص  $v \in V$  را به عنوان ریشه در نظر بگیرید. جستجوی اول سطح به نحوی یال‌های گراف  $G$  را بررسی می‌کند که هر راسی که با یک مسیری به راس  $v$  می‌رسد، پیدا شود. جستجوی اول سطح از راس  $v$  شروع می‌کند و آن را در سطح صفر قرار می‌دهد. سپس در هر مرحله با بررسی رئوس همجوار با رئوس آخرین سطح دیده شده، همه رئوس همجوار با آن رئوس را که تا به حال دیده نشده‌اند ملاقات می‌کند و آن‌ها را در سطح بعدی می‌گذارد. این فرایند زمانی متوقف می‌شود که همه‌ی رئوس همجوار با رئوس آخرین سطح، قبلاً ملاقات شده باشند. در واقع این الگوریتم، تمام رئوس در فاصله‌ی  $k$  از  $v$  را قبل از هر راس در فاصله‌ی  $k + 1$  از  $v$  می‌بیند. زمان اجرای الگوریتم  $BFS$  برابر با  $O(n + m)$  است که  $n$  تعداد رئوس گراف  $G$  و  $m$  تعداد یال‌های گراف  $G$  است [۲۱].

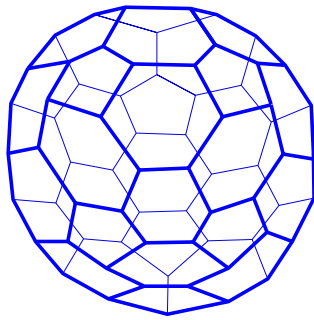
## ۵.۲.۲ گراف‌های فولرن

تعریف ۱۶.۲.۲ فولرن<sup>۳۵</sup> مولکول کروی است که همه اتم‌های تشکیل دهنده آن کربن است و هر اتم با سه اتم همجوارش پیوند دارد. بسیاری از ویژگی‌های مولکول فولرن را می‌توان با استفاده از ابزارهای ریاضی مورد مطالعه قرار داد. از این رو فولرن‌ها مورد توجه ریاضی‌دان‌ها قرار گرفتند. اگر متناظر با مولکول فولرن به ازای هر اتم کربن یک راس و به ازای هر پیوند بین اتم‌های کربن یک یال در نظر بگیریم، گراف فولرن به دست می‌آید. به عبارتی گراف فولرن، گراف مسطح، سه منتظم و سه همبندی است که در آن همه‌ی وجه‌ها پنج‌ضلعی یا شش‌ضلعی هستند (شکل (۳.۲)).

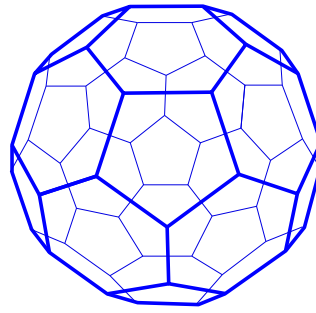
فولرن‌های  $IPR$ ، فولرن‌هایی هستند که در آن هیچ دو پنج‌ضلعی دارای یال مشترک نیستند، به عنوان مثال فولرن  $C_{60}$  در شکل (۳.۲) را مشاهده کنید.

گزاره ۱۷.۲.۲ بر اساس فرمول اویلر در یک فولرن با  $n$  راس، ۱۲ وجه پنج‌ضلعی و  $\frac{n}{4} - 10$  وجه شش‌ضلعی وجود دارد.

<sup>۳۵</sup>Fullerene



$C_7$ .



$C_6$ .

شکل ۳.۲: فولرن.

اثبات. برای گراف مسطح  $G$  با  $n$  راس،  $m$  یال و  $f$  وجه، فرمول اویلر به صورت زیر برقرار است:

$$n + f - m = 2 \quad (1-2)$$

اگر  $f_1$  تعداد وجه‌های پنج‌ضلعی و  $f_2$  تعداد وجه‌های شش‌ضلعی را نشان دهد،

$$f = f_1 + f_2 \quad (2-2)$$

اگر یال‌های وجه‌ها را به طور مجزا با هم جمع کنیم، با توجه به این که هر یال متعلق به دو وجه است، پس هر یال دو بار محاسبه می‌شود، پس داریم:

$$5f_1 + 6f_2 = 2m \quad (3-2)$$

اگر یال‌های همجوار با هر راس را جداگانه با هم جمع کنیم، چون که هر یال همجوار با دو راس است، پس هر یال دو بار محاسبه می‌شود و با توجه به این که هر راس از درجه‌ی ۳ است، داریم:

$$3n = 2m \quad (4-2)$$

از (۳-۲) و (۴-۲) نتیجه می‌شود که

$$n = \frac{5f_1 + 6f_2}{3} \quad (5-2)$$

بنابراین با قرار دادن عبارت‌های (۲-۲) و (۳-۲) و (۵-۲) در فرمول اویلر نتیجه می‌شود که

$$f_1 = 12 \quad (6-2)$$

با در نظر گرفتن (۵-۲) داریم:

$$3n = 60 + 6f_2 \quad (7-2)$$



در نتیجه

$$f_2 = \frac{n}{2} - 1^\circ \quad (8-2)$$

□

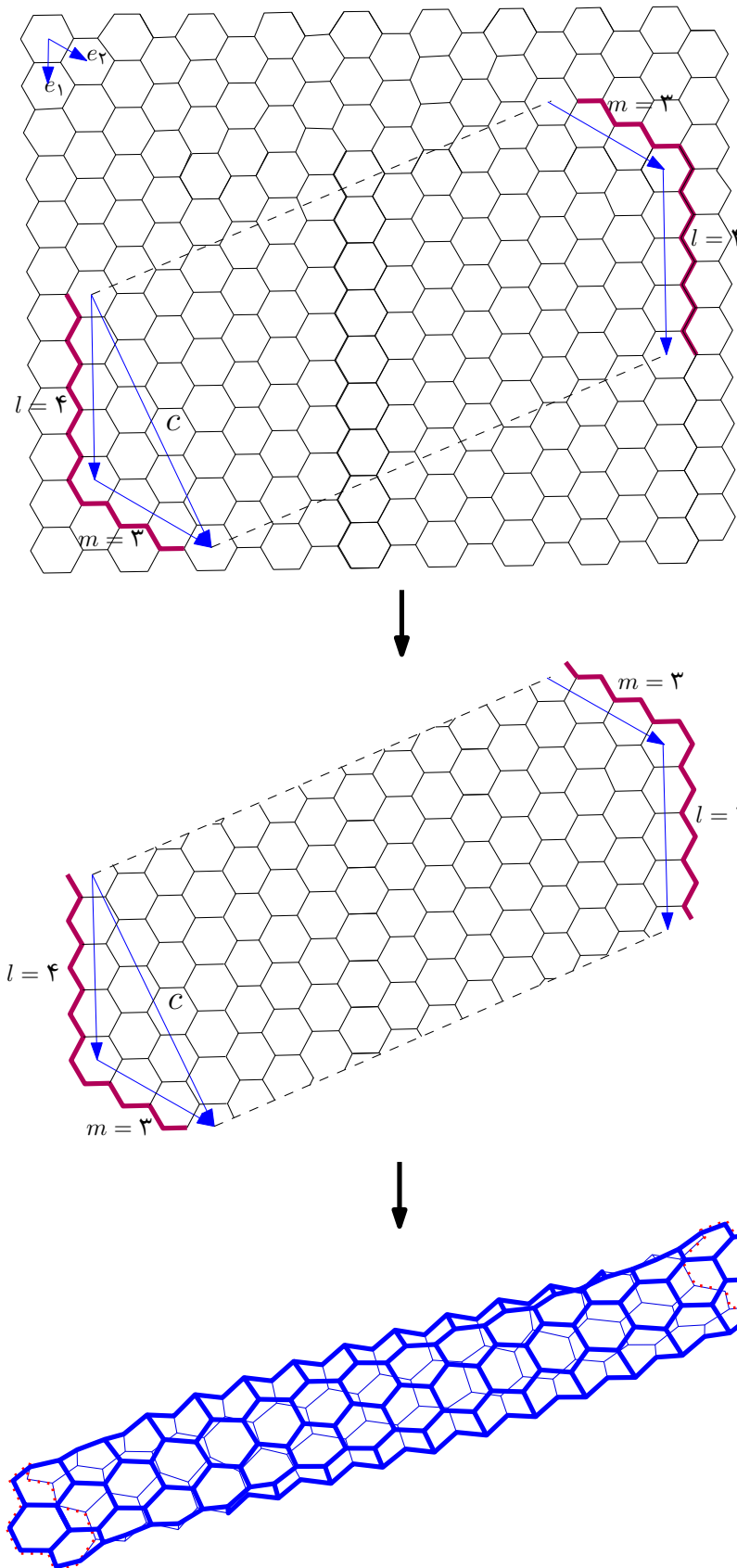
دوگان یک فولرن با  $n$  راس نیز یک مثلث بندی است که شامل ۱۲ راس با درجه ۵ و  $1^\circ - \frac{n}{2}$  راس با درجه شش است.

تعریف ۱۸.۲.۲ در یک مشبکه از شش ضلعی ها، مستطیلی را در نظر بگیرید که رئوس آن روی مرکز شش ضلعی ها باشد و یک ضلع آن، بردار  $c = le_1 + me_2$  ( $l \geq m$ ) باشد که بردارهای  $e_1$  و  $e_2$  بردارهای یکه هستند. مشبکه را در امتداد دو ضلع مستطیل که عمود بر بردار  $c$  هستند برش می دهیم و در نقطه‌ی شروع بردار  $c$ ، به اندازه‌ی  $l$  شش ضلعی در جهت بردار  $e_1$  (بردار  $le_1$ ) و در ادامه‌ی آن به اندازه‌ی  $m$  شش ضلعی در راستای بردار  $e_2$  (بردار  $me_2$ ) برش می دهیم. به موازات بردار  $c$  و در ضلع دیگر مستطیل تصویر آینه‌ای  $c$  را برش می دهیم، یعنی روی همان ضلعی از مستطیل که بردار  $c$  از آن جا شروع شده، به موازات بردار  $c$  حرکت می کنیم و برش می دهیم. سپس ساختار حاصل شده را رول می کنیم تا دو ضلع عمود بر بردار  $c$  روی هم بچسبند. در این صورت ساختاری از شش ضلعی ها به صورت یک استوانه‌ی تو خالی به دست می آید (شکل (۴.۲)). این ساختار که یک گراف مسطح همبند است را لوله<sup>۳۶</sup> نوع  $(l, m)$  می نامیم.

در گراف لوله، بردار  $c$ ، بردار محیطی لوله و اندازه‌ی دو ضلع مستطیل که عمود بر بردار  $c$  هستند، طول لوله را مشخص می کنند.

محلّی که  $l$  شش ضلعی در جهت بردار  $e_1$  و در ادامه‌ی آن  $m$  شش ضلعی در راستای بردار  $e_2$  برش داده شده اند و نیز در سمت دیگر لوله جایی که  $m$  شش ضلعی در راستای بردار  $e_2$  و در ادامه‌ی آن  $l$  شش ضلعی در جهت بردار  $e_1$  برش داده شده اند را مرز لوله گوئیم. در مرز لوله رئوسی با درجه‌ی ۲ و ۳ ایجاد شده است. با توجه به شکل (۴.۲) اگر در مرز لوله از یکی از رئوس روی مرز شروع به حرکت روی یال های مرزی کنیم، به هر راسی که می رسیم چنانچه برای ادامه‌ی مسیر به سمت چپ حرکت کنیم، می گوئیم مسیر در این راس گردش به چپ دارد و اگر برای طی کردن یال همجوار این راس به سمت راست حرکت کنیم، می گوئیم مسیر در این راس گردش به راست دارد. در این صورت مرز لوله با شروع از یک راس و در یک جهت ساعت گرد یا پادساعت گرد به صورت دنباله‌ای است که در آن گردشها به راست و چپ متناوب است به غیر از دو قسمت؛

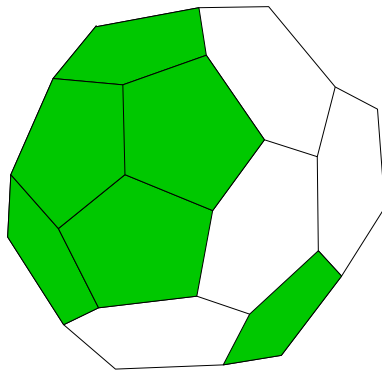
<sup>۳۶</sup>Tube



شکل ۴.۲: ایجاد لوله‌ی نوع  $(l, m)$  (مرز لوله با نقطه‌چین مشخص شده است).

یک بار در جایی که بردار  $le_8$  تمام می‌شود و بردار  $me_2$  شروع می‌شود و دو گردش متوالی در یک سمت داریم که در این محل دو راس متوالی با درجه‌ی ۲ وجود دارد و یک بار هم در محلی که بردار  $me_2$  تمام می‌شود و بردار  $le_8$  شروع می‌شود که دو گردش متوالی در سمت دیگر داریم و دو راس متوالی با درجه‌ی ۳ وجود دارد. اگر  $m = 0$  باشد، مرز به طور متناوب به چپ و راست گردش می‌کند. در این صورت مرز را زیگزاگ می‌گوییم. اگر در مرز لوله رئوس با درجه‌ی ۲ را با عدد ۲ برچسب‌گذاری کنیم و به رئوس با درجه‌ی ۳ برچسب ۳ بدهیم و با پیمودن یال‌های مرزی در جهت ساعت‌گرد، برچسب‌های رئوس را به صورت متوالی بنویسیم، دنباله‌ای به فرم  $(23)^m(32)^l$  ایجاد می‌شود. در این صورت می‌گوییم مرز لوله‌ی نوع  $(l, m)$  به فرم  $(23)^m(32)^l$  است.

تعریف ۱۹.۲.۲ کلاهک  $3^v$  نوع  $(l, m)$  گراف مسطح همبندی است که همه‌ی وجه‌های آن پنج‌ضلعی و شش‌ضلعی هستند به جز یک وجه نامتناهی  $f$ . یال‌ها و رئوس همجوار با وجه نامتناهی  $f$  را یال‌ها و رئوس مرزی کلاهک نوع  $(l, m)$  گویند. مرز کلاهک نوع  $(l, m)$  در جهت ساعت‌گرد به فرم  $(23)^l(32)^m$  است، همه‌ی رئوس کلاهک نوع  $(l, m)$  به جز رئوس روی مرز از درجه‌ی ۳ هستند و رئوس روی مرز کلاهک نوع  $(l, m)$  دارای درجه‌ی ۲ یا ۳ هستند. به عنوان مثال در شکل (۵.۲) کلاهک نوع  $(4, 3)$  نشان داده شده است.

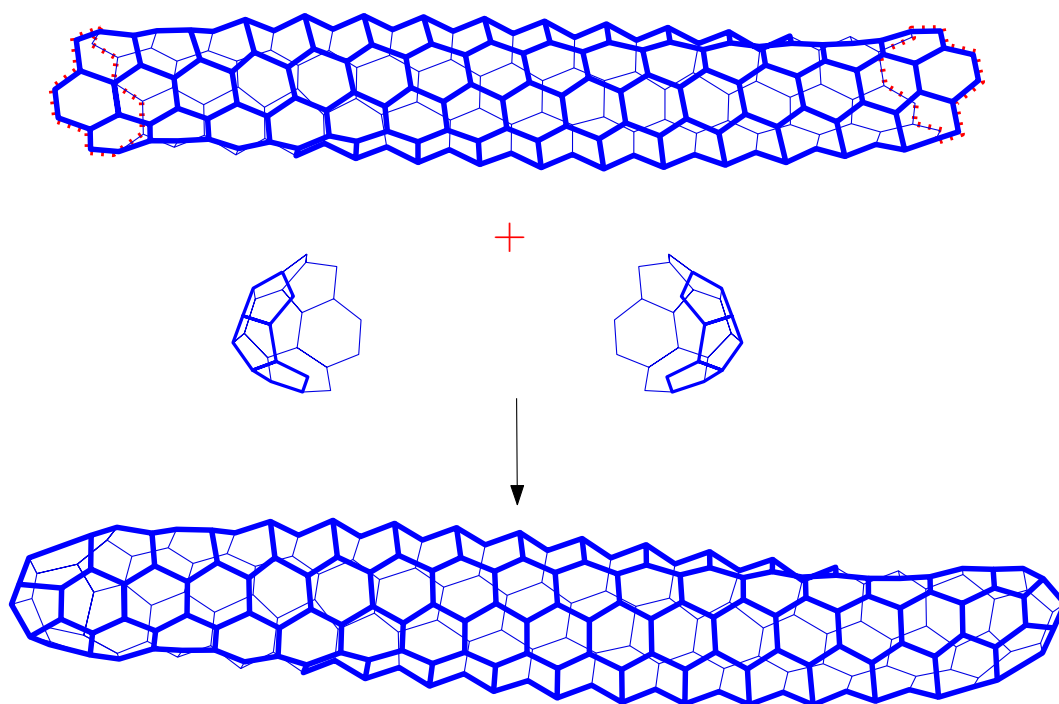


شکل ۵.۲: کلاهک نوع  $(4, 3)$ .

اگر بخواهیم یک لایه از وجه‌ها را به مرز لوله‌ی نوع  $(l, m)$  اضافه کنیم، با توجه به این که درجه‌ی هر راس باید ۳ باشد، وجه‌ها را به گونه‌ای روی مرز قرار می‌دهیم که رئوس درجه‌ی ۳ بدون تغییر بمانند و رئوس درجه‌ی ۲ به درجه‌ی ۳ تبدیل شود. بنابراین باید رئوس درجه‌ی ۲ی وجه‌ها را به رئوس درجه‌ی ۳ مرز بچسبانیم و رئوس

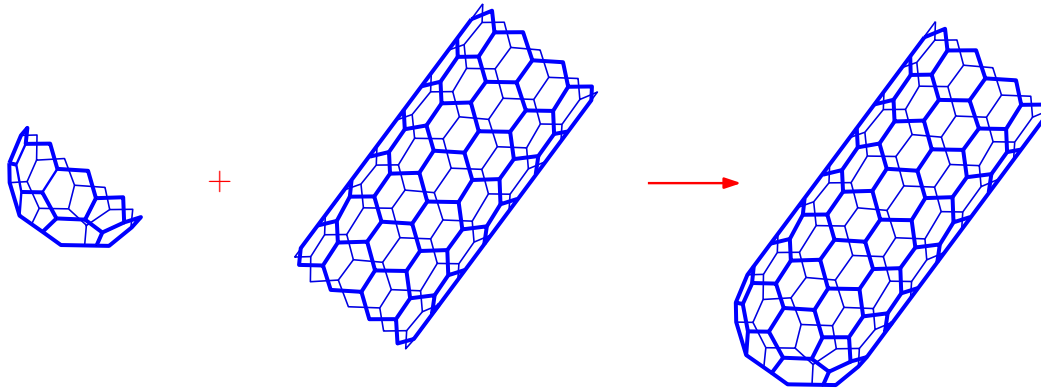
درجه‌ی ۳ وجه‌ها به رئوس درجه‌ی ۲ در مرز لوله بچسبند. در این صورت اگر برای تعیین فرم مرز لوله‌ی نوع  $(l, m)$  و مرز لایه از سمتی که می‌خواهیم آن را به لوله اضافه کنیم، جهت ساعت‌گرد را در نظر بگیریم، لایه‌ای که می‌خواهیم آن را به مرز لوله‌ی نوع  $(l, m)$  بچسبانیم، باید دارای مرزی به فرم  $(32)^m(23)^l$  باشد. با توجه به این که کلاهک نوع  $(l, m)$  دارای مرز به فرم  $(23)^l(32)^m$  است، می‌توانیم آن را به لوله‌ی نوع  $(l, m)$  که دارای مرز به فرم  $(32)^m(23)^l$  است، بچسبانیم.

تعریف ۲۰.۲.۲ اگر دو کلاهک نوع  $(l, m)$  را به دو مرز لوله‌ی نوع  $(l, m)$  بچسبانیم، گرافی به دست می‌آید که مسطح و سه منتظم است و هر وجه آن پنج ضلعی یا شش ضلعی است (شکل ۶.۲). چنین گرافی را نانولوله<sup>۳۸</sup> نوع  $(l, m)$  گوئیم که با توجه به تعریف فولرن، هر نانولوله نیز یک فولرن است.



شکل ۶.۲: نانولوله‌ی نوع  $(3, 4)$ .

اگر فقط یک انتهای لوله را با یک کلاهک مسدود کنیم و انتهای دیگر لوله تا بینهایت ادامه داشته باشد، گراف حاصل را نیم لوله<sup>۳۹</sup> نوع  $(l, m)$  گوئیم (شکل (۷.۲)).  
 در نیم لوله‌ی نوع  $(l, m)$ ، لوله‌ی نوع  $(l, m)$  که کلاهک به آن متصل است را بدنه‌ی نیم لوله می‌گوئیم.



شکل ۷.۲: ایجاد نیم لوله با چسباندن کلاهک و بدنه‌ی نیم لوله به یکدیگر.

---

<sup>۳۹</sup>Half-tube



## فصل ۳

تولید گراف‌های متناظر با فولرنها

این فصل شامل بخش‌های زیر است:

در بخش ۱ قسمت‌هایی از مقاله‌ی [۲۲] که طی این فصل مورد نیاز است آورده شده که در واقع در این بخش به بررسی برش‌های یالی دوری در گراف‌های فولرن پرداخته می‌شود.

در بخش ۲ یک ساختار بازگشتی با استفاده از اعمال توسعه، برای تولید کلاس همه فولرن‌ها از مقاله‌ی [۱۹] به تفصیل بیان می‌شود.

با استفاده از این ساختار، الگوریتم جدیدی در سال ۲۰۱۲ برای تولید فولرن‌های متناهی ارائه شد [۸] که اجرای آن  $\frac{3}{5}$  برابر سریع‌تر از پر سرعت‌ترین تولید کننده‌ی قبلی فولرن‌ها یعنی فولجن است و اولین برنامه بعد از فولجن است که برای تولید فولرن‌های با بیش از  $10^6$  راس مفید است. در بخش ۳ به بیان و بررسی این الگوریتم پرداخته می‌شود.

در بخش ۴ نشان داده شده است که چگونه می‌توان با ایجاد محدودیت‌هایی، اعمال توسعه را برای تولید فولرن‌های IPR به کار برد.

## ۱.۳ برش‌های یالی دوری در گراف‌های فولرن

در این بخش به بیان مطالبی در مورد فولرن‌ها پرداخته می‌شود که در بخش‌های بعدی مورد نیاز است.

تعریف ۱.۱.۳ یک برش یالی<sup>۱</sup> از گراف  $G$ ، یک مجموعه از یال‌های  $C \subset E(G)$  است به طوری که  $G - C$  ناهمبند باشد.

در شکل‌ها یال‌های برش یالی با خطوط نقطه‌چین که از این یال‌ها عبور می‌کنند، نشان داده شده است و وجه‌های پنج‌ضلعی با رنگ خاکستری مشخص شده است.

برش  $k$ -یالی<sup>۲</sup> برش یالی است که دارای  $k$  یال باشد. برش یالی  $C$  از گراف  $G$ ، دوری<sup>۳</sup> است، اگر هر مولفه از  $G - C$  حداقل یک دور داشته باشد.

تعریف ۲.۱.۳ گراف  $G$  را همبند  $k$ -یالی<sup>۴</sup> نامند، اگر نتوان با حذف کم‌تر از  $k$  یال،  $G$  را به حداقل دو مولفه

---

<sup>۱</sup>Edge cut

<sup>۲</sup>K-edge cut

<sup>۳</sup>Cyclic

<sup>۴</sup>k-edge connected



ناهمبند تقسیم کرد.

گراف  $G$ ، به طور دوری همبند  $k$ -یالی<sup>۵</sup> است، اگر نتوان با حذف کم‌تر از  $k$  یال، گراف  $G$  را به حداقل دو مولفه‌ای تقسیم کرد که هر مولفه دارای دور باشد.

در گراف‌های فولرن، برش‌هایی که یکی از مولفه‌های آن تنها شامل یک پنج‌ضلعی یا شش‌ضلعی باشد، بدیهی<sup>۶</sup> نامیده می‌شود. پس در هر گراف فولرن دوازده برش  $5$ -یالی دوری بدیهی داریم.

فرض کنید  $G$  یک گراف فولرن و  $C \subset E(G)$  یک برش  $k$ -یالی دوری باشد. اگر یال‌های مجموعه‌ی  $C$  را از گراف  $G$  حذف کنیم، گراف  $G$  به دو مولفه تقسیم می‌شود که با توجه به این که گراف  $G$  شامل دوازده وجه پنج‌ضلعی است، یکی از مولفه‌ها دارای حداکثر شش وجه پنج‌ضلعی است که این مولفه را با  $H$  نشان می‌دهیم. در مولفه‌ی  $H$  رئوس انتهایی یال‌های برش یالی، درجه‌ی  $1$  و  $2$  دارند. گراف  $H$  را گراف صفحه‌ای در نظر می‌گیریم که این رئوس روی مرز وجه خارجی باشند.

لم زیر را در مورد برش‌های دوری در گراف‌های فولرن به کار می‌بریم:

لم ۳.۱.۳ [۲۲] فرض کنید  $C$  یک برش یالی در گراف فولرن  $G$  است. اگر مولفه  $H$  از  $G - C$  راس درجه یک نداشته باشد؛ آنگاه

$$6 - f_5 = 2n_2 - l$$

که  $n_2$  تعداد رئوس درجه‌ی  $2$  و  $f_5$  تعداد پنج‌ضلعی‌ها در مولفه‌ی  $H$  است و  $l$  اندازه‌ی وجه خارجی  $H$  است.

اثبات. تعداد یال‌های  $H$  را با  $m$ ، تعداد رئوس درجه‌ی  $3$  در مولفه‌ی  $H$  را با  $n_3$  و تعداد شش‌ضلعی‌های مولفه‌ی  $H$  را با  $f_6$  نشان می‌دهیم. واضح است که

$$2n_2 + 3n_3 = 2m \quad (1-3)$$

و

$$5f_5 + 6f_6 = 2m \quad (2-3)$$

بر اساس فرمول اوایلر داریم:

$$n_2 + n_3 + f_5 + f_6 + 1 - m - 2 = 0 \quad (3-3)$$

<sup>۵</sup>Cyclically  $k$ -edge connected

<sup>۶</sup>Trivial

بنابراین

$$6n_2 + 6n_3 + 6f_5 + 6f_6 - 6m - 6 = 0 \quad (4-3)$$

از (1-3)، (2-3) و (4-3) نتیجه می‌گیریم که

$$(4n_2 + 6n_3 - 4m) + (5f_5 + 6f_6 + l - 2m) + 2n_2 + f_5 - l - 6 = 0 \quad (5-3)$$

در نتیجه

$$6 - f_5 = 2n_2 - l. \quad (6-3)$$

□

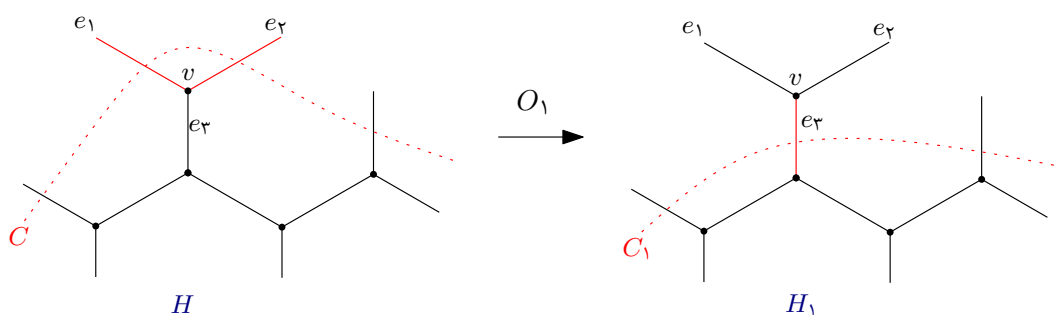
### ۱.۱.۳ ساخت برش‌های یالی دوری

در این قسمت ابتدا سه گروه از اعمال را برای ساخت همه برش‌های یالی دوری در گراف‌های فولرن از نوع بدیهی‌شان معرفی می‌کنیم.

سه عمل اصلی را برای ساخت برش‌های یالی دوری توضیح می‌دهیم. هر عمل  $O_i$  برش  $k$ -یالی دوری  $C$  را به برش یالی دوری  $C_i$  تغییر می‌دهد به طوری که  $G - C_i$  شامل مولفه‌ی  $H_i$  است که  $H_i$  زیرمجموعه‌ای از مولفه‌ی  $H$  است.  $n$  را برابر تعداد رئوس  $H$  در نظر می‌گیریم.

عمل  $O_1$ :

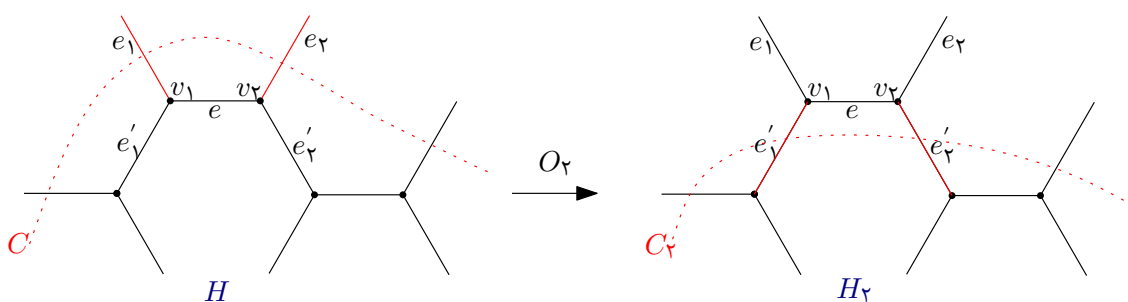
فرض کنید  $v$  یک راس از درجه یک در  $H$  باشد، بنابراین در  $G$  دقیقاً دو یال همجوار  $v$  وجود دارد که متعلق به برش  $C$  هستند و آن‌ها را  $e_1$  و  $e_2$  می‌نامیم و یال سوم که در همجواری راس  $v$  است را  $e_3$  می‌نامیم. (شکل (۱.۳)) در این صورت بدیهی است که  $C_1 = C \setminus \{e_1, e_2\} \cup e_3$  یک برش  $(k-1)$ -یالی دوری در  $G$  است و دارای مولفه‌ی  $H_1 = H - v$  با  $n-1$  راس است که مولفه‌ی  $H_1$  حداکثر شش وجه پنج‌ضلعی دارد.



شکل ۱.۳: با استفاده از عمل  $O_1$ ، برش  $k$ -یالی  $C$  به برش  $(k-1)$ -یالی  $C_1$  تبدیل می‌شود.

### عمل $O_2$ :

فرض کنید مولفه‌ی  $H$  حداقل دو وجه داخلی دارد و  $v_1$  و  $v_2$  دو راس همجوار از درجه‌ی دو در  $H$  هستند. همان‌طور که در شکل (۲.۳) نشان داده شده است، یال  $v_1v_2$  را با  $e$  نشان می‌دهیم و  $e_i$  و  $e'_i$  دو یال همجوار رئوس  $v_i$  ( $i = 1, 2$ ) هستند. بنابراین  $C_2 = C \setminus \{e_1, e_2\} \cup \{e'_1, e'_2\}$  یک برش  $k$ -یالی در  $G$  است که مولفه‌ی  $H_2 = H - v_1 - v_2$  حداکثر شش وجه پنج‌ضلعی دارد. شرط تعداد وجه‌های داخلی برای این عمل باعث می‌شود که  $C_2$  برش یالی دوری باشد.



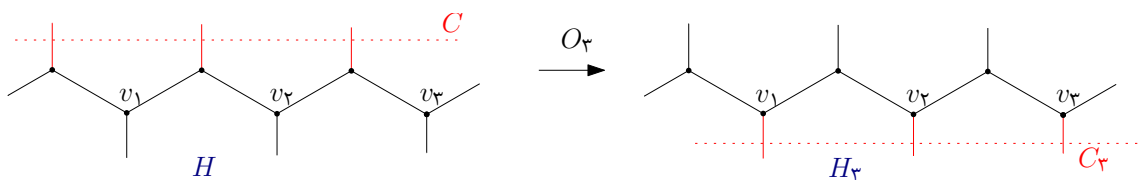
شکل ۲.۳: عمل  $O_2$ ، برش  $k$ -یالی  $C$  با  $n$  راس را به برش  $k$ -یالی  $C_2$  با  $n-2$  راس تبدیل می‌کند.

### عمل $O_3$ :

فرض کنید وجه خارجی  $H$  را  $O$  بنامیم و این وجه دارای اندازه  $2k$  باشد که  $k$  راس درجه ۲ و  $k$  راس درجه ۳ به صورت متناوب روی  $O$  قرار گرفته‌اند. هر یک از رئوس درجه ۳ روی  $O$  دقیقاً همجوار با یک یالی است که در  $O$  نیست.

اگر برش حاصل از عمل  $O_3$  را  $C_3$  بنامیم، ادعا می‌کنیم که  $C_3$  یک برش  $k$ -یالی است (شکل (۳.۳)).

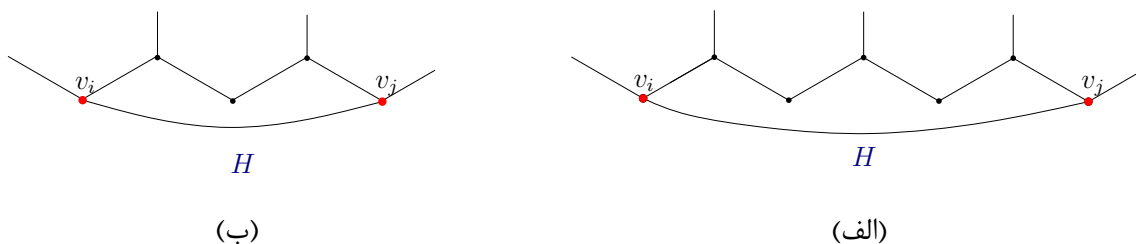
رئوس درجه‌ی ۳ روی  $O$  را در یک ترتیب دوری به صورت  $v_1, v_2, \dots, v_k$  نام‌گذاری می‌کنیم.



شکل ۳.۳: عمل  $O_3$ ، برش  $k$ -یالی  $C$  با  $n$  راس را به برش  $k$ -یالی  $C_3$  با  $(n - 2k)$  راس تبدیل می‌کند.

اگر رئوسی مانند  $v_i$  و  $v_{i+1}$  که  $v_{i+1} = v_1$  است، همجوار باشند، یک وجه مثلثی به وجود می‌آید که وجود چنین وجهی در گراف فولرن امکان ندارد.

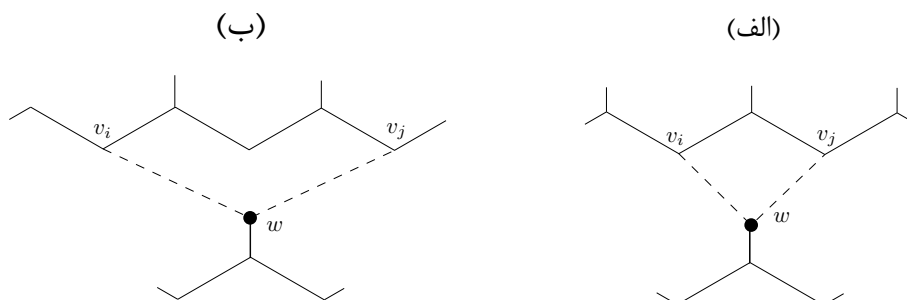
اگر  $v_i$  و  $v_j$  ( $j > i + 1$ ) همجوار باشند باید  $v_{i+1}$  و  $v_{j-1}$  هم همجوار باشند، چون در غیر این صورت اگر تعداد رئوس بین  $v_i$  و  $v_j$  زوج باشد، مانند شکل (۴.۳) قسمت (الف)، یک وجه با اندازه‌ی حداقل هفت داریم. اگر تعداد رئوس بین راس‌های  $v_i$  و  $v_j$  فرد باشد یک وجه با اندازه‌ی حداقل پنج داریم که دارای یک راس درجه‌ی دو است (شکل (۴.۳) قسمت (ب)). چون این راس باید از درجه‌ی سه باشد، باید یال سومی در همجواری آن رسم شود که این یال یا موازی یکی از یال‌های همجوار این راس رسم می‌شود که در این حالت یکی از رئوس همجوار یال موازی از درجه‌ی چهار خواهد بود و یا یالی که رسم می‌شود یال‌های دیگر را قطع می‌کند. هر دو مورد، تعریف فولرن را نقض می‌کند. هم چنین رئوس  $v_{i+2}$  و  $v_{j-2}$  نیز باید همجوار باشند و به همین ترتیب ادامه می‌دهیم. بعد از تعداد متناهی مرحله به حالت‌هایی می‌رسیم که هیچ یک امکان‌پذیر نیست؛ چون در آخرین مرحله اگر دو راس باقی مانده باشد در صورت همجواری این دو راس، وجه مثلثی ایجاد می‌شود و اگر یک راس باقی بماند، همان‌طور که گفته شد باید از درجه‌ی سه باشد که بر اساس آن چه بیان شد، در هر حالت تعریف فولرن نقض می‌شود.



شکل ۴.۳: حالتی که  $v_i$  و  $v_j$  ( $j > i + 1$ ) همجوار هستند.

حال ثابت می‌کنیم  $C_3$  یک برش یالی دوری است. فرض کنید گراف  $H_3$  از  $H$  با حذف رئوس واقع شده در وجه نامتناهی  $O$  به دست آمده است و دارای راسی مانند  $w$  از درجه‌ی حداکثر یک است. پس  $w$  حداقل با دو راس در وجه  $O$  همجوار است که این دو راس را  $v_i$  و  $v_j$  ( $i < j$ ) می‌نامیم. اگر  $z = i + 1$  باشد (شکل (۵.۳) قسمت (الف)) یک وجه با سایز ۴ وجود دارد که در فولرن امکان‌پذیر نیست.

اگر  $z > i + 1$  باشد (شکل (۵.۳) قسمت (ب)) راس  $v_{i+1}$  هم باید به راسی در  $H_3$  وصل باشد؛ یعنی یا با راس  $w$  همجوار است که باعث می‌شود  $w$  از درجه‌ی ۴ باشد و یا به راسی غیر از  $w$  وصل است که در این حالت نیز تقاطع ایجاد می‌شود. بنابراین رئوس مرزی  $H_3$  حداقل از درجه‌ی ۲ هستند و از این رو  $H_3$  دارای دور است.



شکل ۵.۳: حالتی که راس  $w$  از گراف  $H_3$  با رئوس  $v_i$  و  $v_j$  ( $j > i + 1$ ) روی ناحیه‌ی  $O$  همجوار هستند.

توجه کنید اگر  $C$  یک برش یالی دوری بدیهی باشد و مولفه‌ی  $H$  یک دور روی ۵ یا ۶ راس داشته باشد، اعمال  $O_1$ ،  $O_2$  و  $O_3$  نمی‌توانند به کار برده شوند.

لم ۴.۱.۳ [۲۲] فرض کنید  $C$  یک برش  $k$ -یالی دوری غیر بدیهی در گراف فولرن  $G$  باشد و  $H$  یک مولفه از  $G - C$  باشد که حداکثر شش پنج‌ضلعی دارد، در این صورت یکی از اعمال  $O_1$ ،  $O_2$  و  $O_3$  می‌تواند استفاده شود تا برش یالی دوری  $C^*$  به دست آید که دارای مولفه‌ی  $H^*$  از  $G - C^*$  است، به طوری که  $H^*$  زیرگرافی غیر بدیهی از  $H$  است.

اثبات. اگر مولفه‌ی  $H$  شامل راسی از درجه‌ی یک باشد، عمل  $O_1$  می‌تواند به کار برده شود و لم اثبات می‌شود.

فرض می‌کنیم رئوس مولفه‌ی  $H$  دارای حداقل درجه‌ی ۲ باشد. توجه کنید که  $H$  حداقل دو وجه داخلی دارد،

در غیر این صورت  $H$  یک برش ۵-یالی یا ۶-یالی بدیهی دارد که با فرض لم تناقض دارد.  
 اگر در  $H$  دو راس درجه‌ی ۲ همجوار هم باشند، عمل  $O_2$  می‌تواند به کار برده شود تا برش یالی جدیدی به دست آید که این برش ویژگی‌های حکم لم را دارا می‌باشد.  
 حال فرض کنید که در  $H$  هیچ دو راسی از درجه‌ی ۲ همجوار نیستند. با توجه به لم (۳.۱.۳) داریم:

$$6 - f_5 = 2n_2 - l \quad (7-3)$$

که  $f_5$  تعداد پنج‌ضلعی‌ها در  $H$ ،  $n_2$  تعداد رئوس درجه ۲ در  $H$  و  $l$  اندازه‌ی وجه خارجی  $O$  است. چون مولفه‌ی  $H$  حداکثر شش وجه پنج‌ضلعی دارد، پس

$$6 - f_5 \geq 0 \quad (8-3)$$

و چون هیچ دو راسی از درجه‌ی دو در  $H$  همجوار نیستند. پس بین هر دو راس درجه‌ی دو روی  $O$  حداقل یک راس درجه‌ی سه وجود دارد، بنابراین

$$2n_2 - l \leq 0. \quad (9-3)$$

از (۷-۳)، (۸-۳) و (۹-۳) نتیجه می‌گیریم که  $6 - f_5 = 2n_2 - l = 0$ ، در نتیجه  $f_5 = 6$  و  $l = 2n_2 = 2k$ .

پس  $k$  راس درجه ۲ و  $k$  راس درجه ۳ به صورت متناوب روی وجه  $O$  وجود دارند که در این صورت می‌توان عمل  $O_2$  را به کار برد.  $\square$

**قضیه ۵.۱.۳ [۲۲]** برش‌های یالی دوری در یک گراف فولرن می‌توانند از برش‌های یالی دوری بدیهی با استفاده از معکوس اعمال  $O_1$ ،  $O_2$  و  $O_3$  به دست آیند.

**اثبات.** فرض کنید  $C$  یک برش یالی دوری در گراف فولرن  $G$  باشد. اگر  $C$  بدیهی نباشد، طبق لم (۴.۱.۳) می‌توان اعمال  $O_1$ ،  $O_2$  و  $O_3$  را با  $C$  به کار برد. چون تعداد رئوس مولفه‌ی  $H$  بعد از استفاده از هر عمل، کاهش می‌یابد، با به کار بردن تعداد متناهی معکوس اعمال  $O_1$ ،  $O_2$  و  $O_3$  به یک برش یالی دوری بدیهی می‌رسیم. حال معکوس این دنباله از اعمال روی برش یالی دوری بدیهی به دست آمده،  $C$  را نتیجه می‌دهد.  $\square$   
 نتیجه‌ی زیر مستقیماً از قضیه‌ی (۵.۱.۳) به دست می‌آید:

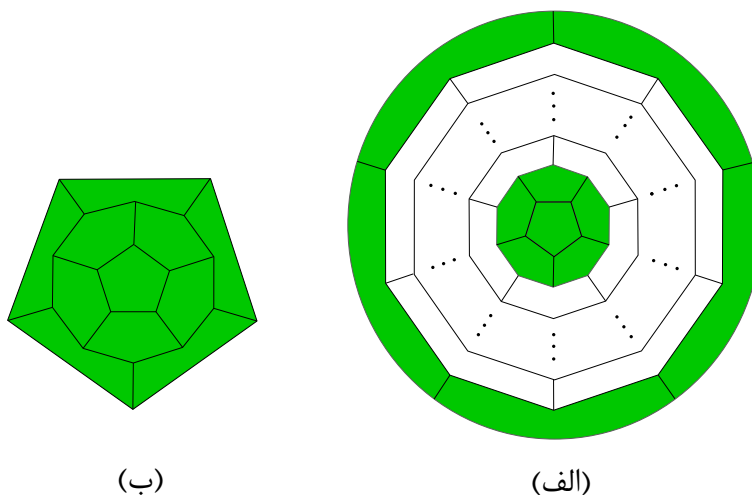
**نتیجه ۶.۱.۳ [۲۲]** هر گراف فولرن به طور دوری همبند ۵-یالی است.

اثبات. با استفاده از اعمال  $O_1, O_2, O_3$  و اندازه‌ی برش‌های یالی دوری کاهش نمی‌یابد، بنابراین اندازه‌ی برش‌های یالی دوری نمی‌تواند کوچک‌تر از اندازه‌ی برش‌های یالی دوری بدیهی باشد؛ پس هیچ برش یالی دوری با اندازه‌ی کم‌تر از پنج وجود ندارد. □

کاربرد دیگری از قضیه‌ی (۵.۱.۳) مشخص کردن گراف‌های فولرنی است که برش‌های ۵-یالی دوری غیر بدیهی دارند.

فرض کنید گراف  $G_k$  فولرنی است که دارای دو کلاهک است که هر یک از آن‌ها شش‌ضلعی دارند و بین دو کلاهک،  $k$  لایه شش‌ضلعی وجود دارد (شکل (۶.۳) قسمت (الف)). توجه کنید که برای  $k \geq 1$  این گراف یک نانولوله‌ی نوع  $(5, 0)$  است، هم‌چنین در نظر داشته باشید که گراف  $G$  با دوازده‌وجهی  $C_{20}$  یکرخت است (شکل (۶.۳) قسمت (ب)).

واضح است که گراف  $G_k$  دقیقاً  $k$  برش ۵-یالی دوری غیر بدیهی دارد.



شکل ۶.۳: شکل (الف): گراف  $G_k$  و شکل (ب): گراف  $C_{20}$ .

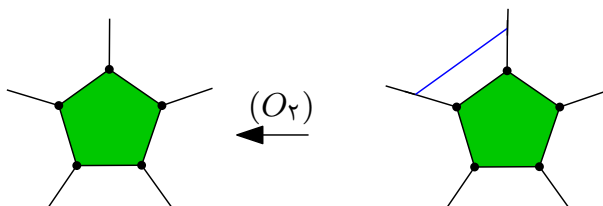
قضیه ۷.۱.۳ [۲۲] یک گراف فولرنی، دارای برش‌های ۵-یالی دوری غیر بدیهی است، اگر و تنها اگر با یک گراف  $G_k$  ( $k \geq 1$ ) یکرخت باشد.

اثبات. از قضیه (۵.۱.۳) نتیجه می‌شود که برای هر برش ۵-یالی دوری غیر بدیهی یک دنباله‌ی متناهی از اعمال وجود دارد که یک برش یالی بدیهی را نتیجه می‌دهد.

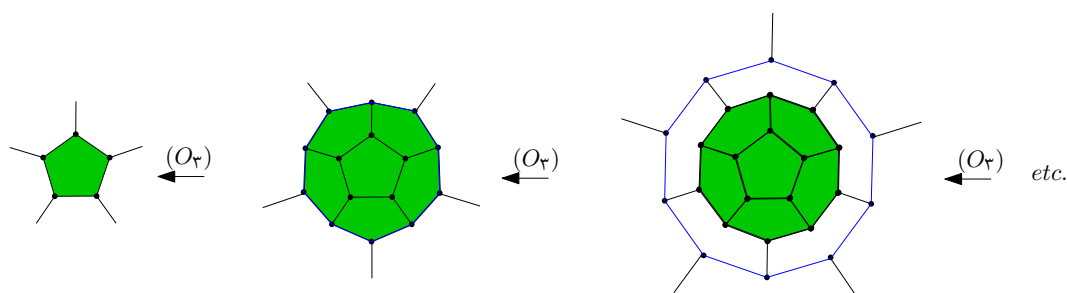
با استفاده از اعمال  $O_1, O_2, O_3$  و اندازه‌ی برش‌های یالی دوری کاهش نمی‌یابد. بنابراین از تنها برش ۵-یالی دوری بدیهی یعنی پنج‌ضلعی شروع می‌کنیم. با توجه به این‌که هیچ برش ۴-یالی دوری وجود ندارد، عمل  $O_1$

نمی‌تواند در دنباله وجود داشته باشد، چون با استفاده از عمل  $O_1$  به جای دو یال در برش یک یال جایگزین می‌شود.

اگر عمل  $O_2$  به کار رود همان طور که در شکل (۷.۳) مشاهده می‌کنید، یک وجه مربعی به وجود می‌آید. بنابراین باید عمل  $O_3$  به کار برده شود که در این صورت یک لایه از شش، پنج‌ضلعی به وجود می‌آید (شکل (۸.۳)).



شکل ۷.۳: استفاده از عمل  $O_2$  برای پنج‌ضلعی.



شکل ۸.۳: تنها روش ممکن برای ساخت یک برش ۵-یالی دوری.

در مرحله بعد عمل  $O_2$  نمی‌تواند مورد استفاده قرار گیرد؛ چون اگر عمل  $O_2$  را استفاده کنیم تعداد پنج‌ضلعی‌ها در مولفه‌ی  $H$  بیشتر از شش می‌شود. بنابراین دوباره تنها عملی که می‌توانیم به کار ببریم عمل  $O_3$  است که یک لایه از شش‌ضلعی‌ها را ایجاد می‌کند.

بنابراین برای همه‌ی برش‌های ۵-یالی دوری غیر بدیهی  $C$  در گراف فولرن  $G$  یکی از مولفه‌های  $G - C$

دارای ساختار زیر است:

مولفه، شامل یک پیکربندی از شش تا پنج‌ضلعی است که با تعدادی لایه‌ی شش‌ضلعی که هر یک دارای پنج، شش‌ضلعی است احاطه شده است.

علاوه بر این چون برش، غیر بدیهی است مولفه‌ی دیگر نمی‌تواند یک پنج‌ضلعی تنها باشد، بنابراین آن مولفه

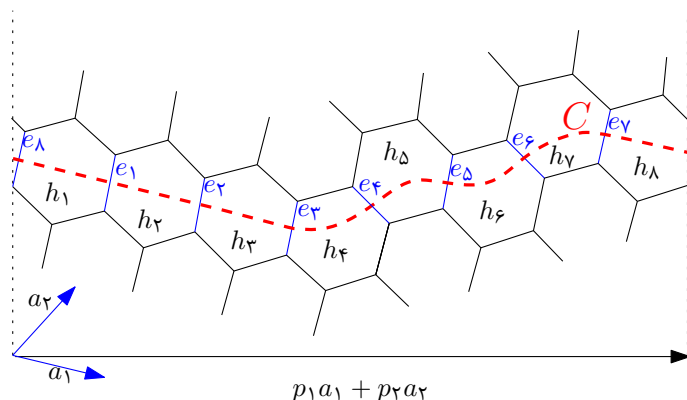


نیز دارای ساختار توصیف شده است. با توجه به ساختاری که دو مولفه دارند نتیجه می‌شود که گراف فولرن  $G$  به ازای یک  $k \geq 1$  با  $G_k$  یکرخت است. □

برش یالی دوری  $C$  از گراف فولرن  $G$ ، غیر منحل<sup>۶</sup> است، اگر هر دو مولفه  $G - C$  دقیقاً شش، پنج ضلعی داشته باشد. در غیر این صورت  $C$ ، منحل<sup>۷</sup> نامیده می‌شود.

لم ۱.۳.۱ [۲۲] در هر یک از دو کلاهک نانولوله دقیقاً شش وجه پنج ضلعی وجود دارد.

اثبات. فرض کنید  $G$  یک نانولوله از نوع  $(p_1, p_2)$  است و  $p = p_1 + p_2$  باشد. بنابراین در بدنه‌ی نانولوله‌ی  $G$  می‌توانیم یک دنباله‌ی دوری از  $p$  شش ضلعی مانند  $(h_1, h_2, \dots, h_p)$  پیدا کنیم به طوری که  $h_i$  و  $h_{i+1}$  همجوار باشند و  $h_{p+1} = h_1$  باشد. اگر  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای واحد باشند و هر شش ضلعی را با یک نقطه در وسط آن نمایش دهیم بردار  $h_i - h_{i+1}$  ( $i = 1, \dots, p$ ) موازی  $a_1$  یا  $a_2$  است. فرض کنید یال مشترک وجه‌های  $h_i$  و  $h_{i+1}$  ( $i = 1, \dots, p$ ) را با  $e_i$  نشان دهیم. در این صورت  $C = \{e_1, \dots, e_p\}$  یک برش  $p$ -یالی دوری در  $G$  است (شکل (۹.۳)).



شکل ۹.۳: یک مثال از نانولوله نوع (۲ و ۶) و برش یالی دوری  $C = \{e_1, e_2, e_3, \dots\}$  که یک برش در طول شش ضلعی‌های  $h_1, h_2, h_3, \dots$  است.

طول وجه خارجی دو مولفه‌ی  $H_1$  و  $H_2$  برابر است، چون مرز هر مولفه یک انتقال از دیگری برای بردار  $a_2 - a_1$  است که در این انتقال ۲-راس‌های روی وجه خارجی هر مولفه به یک ۳-راس روی وجه خارجی مولفه‌ی دیگر مربوط می‌شوند. در وجه خارجی هر دو مولفه تعداد ۲-راس‌هایی که به دلیل حذف یال‌های

<sup>۶</sup>Non degenerate

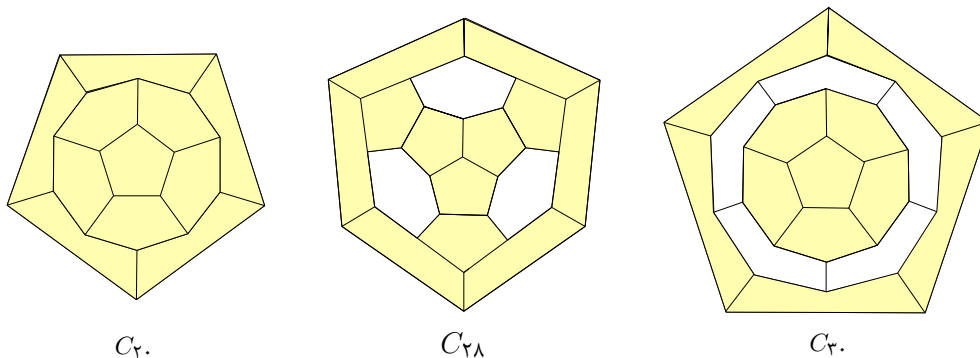
<sup>۷</sup>Degenerate

شش ضلعی‌ها ایجاد شده برابر است؛ بنابراین تعداد ۳-راس‌های روی وجه خارجی هر دو مولفه نیز برابرند و بر اساس انتقال، تعداد ۲-راس‌ها و ۳-راس‌های هر وجه خارجی با هم برابر هستند. حال برای هر دو مولفه بر اساس لم (۳.۱.۳) داریم:  $l = 2n_2 - f_5 = 6$ . با توجه به توضیحات ارائه شده، در سمت راست عبارت داریم:  $2k - (k + k) = 0$ .

پس  $f_5$  نیز برای هر دو مولفه‌ی  $H_1$  و  $H_2$  برابر شش است. □

## ۲.۳ اعمال توسیع برای فولرن‌ها

در این بخش یک مجموعه ساده از اعمال بیان می‌شود که برای تولید همه فولرن‌ها از فولرن‌های کوچک‌تر کافی است. این اعمال را توسیع<sup>۹</sup> و معکوس این اعمال را کاهش<sup>۱۰</sup> می‌نامیم. اگر  $G'$  با یک توسیع روی  $G$  به دست آید،  $G'$  را فرزند  $G$  و  $G$  را پدر  $G'$  می‌نامیم. مجموعه گراف‌های ابتدایی برای تولید فولرن‌ها،  $C_{20}$  (دوازده وجهی)،  $C_{28}$  و نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  در نظر گرفته می‌شوند. در کلاس نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  به ازای هر  $k \geq 0$  دقیقاً یک فولرن با  $30 + k$  راس وجود دارد. کوچک‌ترین عضو این کلاس  $C_{30}$  است و سایر فولرن‌های عضو این کلاس حلقه‌های اضافی از شش ضلعی‌ها دارند (شکل (۱۰.۳)).



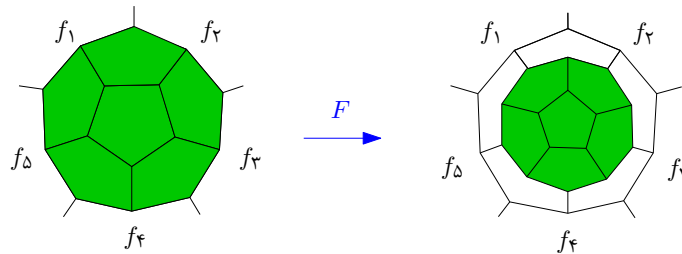
شکل ۱۰.۳: فولرن‌های کاهش‌ناپذیر.

دو نوع توسیع نامتناهی  $L_i$  ( $i \geq 0$ ) و  $B_{i,j}$  ( $i, j \geq 0$ ) و یک توسیع ساده  $F$  را برای تولید فولرن‌ها در نظر می‌گیریم که طبق مثال‌های نشان داده شده به صورت زیر شرح داده می‌شوند:

<sup>۹</sup>Expansion

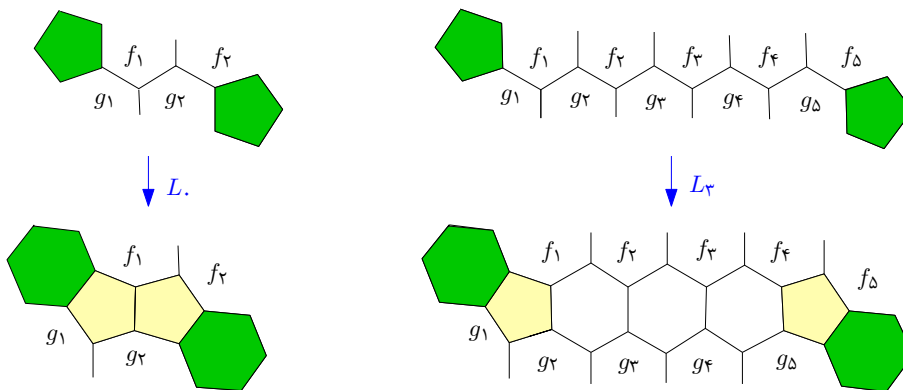
<sup>۱۰</sup>Reduction

توسیع  $F$  پنج وجه شش ضلعی را به صورت یک حلقه بین دو کلاهک نانولوله نوع  $(5, 0)$  اضافه می‌کند (شکل (۱۱.۳)).



شکل ۱۱.۳: توسیع  $F$ .

در توسیع  $L_i$  مسیر بین دو پنج ضلعی به چپ و راست متناوب است و طول مسیر  $2i + 3$  می‌باشد؛ این توسیع،  $i + 2$  وجه را به همان صورتی که در شکل (۱۲.۳) نشان داده شده است، به قطعه اضافه می‌کند. در توسیع  $L_i$  تصاویر آینه‌ای هم در نظر گرفته می‌شوند.

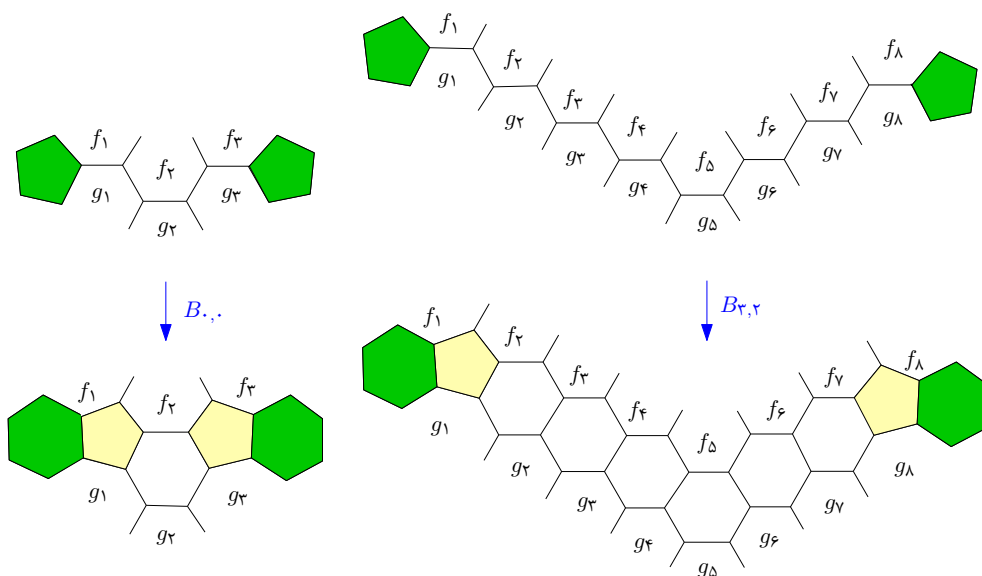


شکل ۱۲.۳: توسیع  $L$ .

در توسیع  $B_{i,j}$  نیز مسیر بین دو پنج ضلعی به چپ و راست متناوب است به جز شکستی که در  $2i + 2$  و  $2i + 3$  داریم که چرخش هر دو یال به یک سمت می‌باشد. یک مسیر از وجه‌های  $...fhg...$  که  $h$  یک شش ضلعی است، در  $h$  دارای شکست<sup>۱۱</sup> است؛ اگر  $f$  و  $g$  در ضلع‌های مقابل هم از شش ضلعی  $h$  قرار نگرفته باشند.

<sup>۱۱</sup>Bend

طول مسیر به کار برده شده در توسعه  $B_{i,j}$ ،  $2i + 2j + 5$  است و این توسعه  $3 + j + i$  وجه را به صورت شکل (۱۳.۳) به قطعه اضافه می‌کند.



شکل ۱۳.۳: توسعه  $B$ .

در شکل‌های (۱۱.۳)، (۱۲.۳) و (۱۳.۳) وجه‌هایی که با  $f_k$  یا  $g_k$  برچسب گذاری شده‌اند می‌توانند پنج‌ضلعی یا شش‌ضلعی باشند. برای استفاده از توسعه‌های تعریف شده، همه وجه‌هایی که به طور کامل رسم شده‌اند و وجه‌هایی که با  $f_k$  و یا  $g_k$  برچسب گذاری شده‌اند، باید از هم مجزا باشند.

### ۱.۲.۳ الگوریتم‌ها

تعریف ۱.۲.۳ ایزومرهای یک فولرن، فولرن‌هایی هستند که دارای تعداد اتم کربن یکسان با آن فولرن هستند، ولی ساختار و در نتیجه خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی دارند.

قضیه ۲.۲.۳ [۱۹] هر ایزومر فولرن به جز  $C_{28}$  را می‌توان با شروع از  $C_{20}$  و با استفاده از توسعه‌های  $F$ ،  $L$  و  $B$  ساخت.

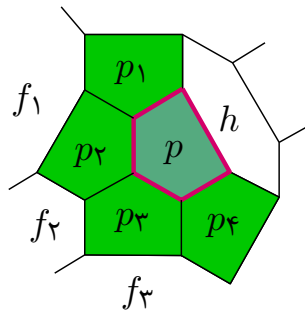
اثبات.  $k$  را بیش‌ترین تعداد پنج‌ضلعی‌های همجوار با یک پنج‌ضلعی در بین همه پنج‌ضلعی‌ها در نظر می‌گیریم و اثبات را بر اساس مقدار  $k$  انجام می‌دهیم.

• اگر  $k = 5$  باشد، در این صورت اگر بعد از حلقه‌ی شامل پنج‌ضلعی‌هایی که همجوار پنج‌ضلعی مشترک هستند لایه‌ای از پنج‌ضلعی‌ها قرار داشته باشد، مشاهده می‌شود که  $G$  همان  $C_{20}$  است. در غیر این

صورت  $G$  یک برش از پنج یال مستقل دارد که در هر مولفه آن بیش از یک پنج‌ضلعی وجود دارد. همان‌طور که در قضیه‌ی (۷.۱.۳) در بخش (۱.۳) بیان شد، حالت دوم فقط برای فولرن‌های نانولوله نوع  $(5, 0)$  اتفاق می‌افتد که در این صورت می‌توان کاهش نوع  $F$  را برای  $G$  به کار برد.

• اگر  $k = 4$  باشد، پنج‌ضلعی  $p$  را در نظر بگیرید که مطابق شکل (۱۴.۳) همجوار با چهار پنج‌ضلعی دیگر و یک شش‌ضلعی  $h$  است. با توجه به شکل (۱۴.۳) اگر  $f_2$  یک شش‌ضلعی باشد می‌توان کاهش  $L_0(f_2, p_3, p, h)$  را با  $G$  به کار برد. (در این جا  $f_2, p_3, p, h$  یک لیست از وجه‌های مربوط به قطعه‌ی توسیع داده شده با استفاده از توسیع  $L_0$  در شکل (۱۲.۳) است. کاهش‌های دیگر را نیز به طور مشابه فهرست می‌کنیم.)

حال اگر  $f_2$  پنج‌ضلعی باشد، چون  $k = 4$  است،  $f_1$  و  $f_3$  باید شش‌ضلعی باشند. پس کاهش  $B_0(f_3, p_4, h, p_1, f_1)$  را می‌توان برای  $G$  به کار برد.



شکل ۱۴.۳: پیکربندی وجه‌ها در حالت  $k = 4$ .

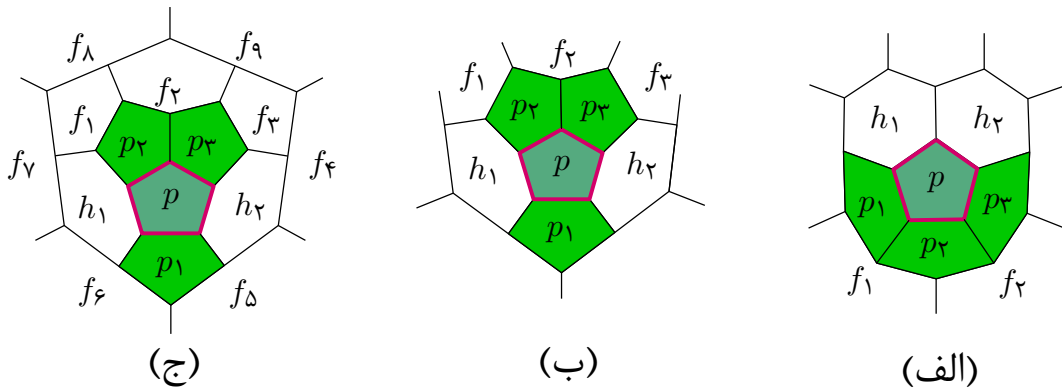
• فرض کنید  $k = 3$  و  $p$  یک پنج‌ضلعی است که همجوار با سه پنج‌ضلعی  $p_1, p_2, p_3$  و دو شش‌ضلعی  $h_1$  و  $h_2$  است.

– اگر همان‌طور که در شکل (۱۵.۳) قسمت (الف) نشان داده شده،  $p_1, p_2, p_3$  به ترتیب اطراف پنج‌ضلعی  $p$  قرار گرفته باشند، در این صورت چون  $k = 3$  است،  $f_1$  و  $f_2$  باید شش‌ضلعی باشند و کاهش  $L_0(h_2, p, p_2, f_1)$  را می‌توان برای  $G$  به کار برد.

– در صورتی که هیچ کدام از حالت‌های ذکر شده رخ ندهد،  $p_1, p_2, p_3$  به صورت یکی از حالت‌های نشان داده شده در قسمت‌های (ب) یا (ج) در شکل (۱۵.۳) حول  $p$  قرار می‌گیرند. با توجه به شکل (۱۵.۳) قسمت (ب)، اگر  $f_1$  شش‌ضلعی باشد کاهش  $L_0(f_1, p_2, p, h_2)$  برای

$G$  به کار گرفته می‌شود و اگر  $f_3$  یک شش ضلعی باشد  $G$  دارای کاهش  $L_0(f_3, p_3, p, h_1)$  خواهد بود.

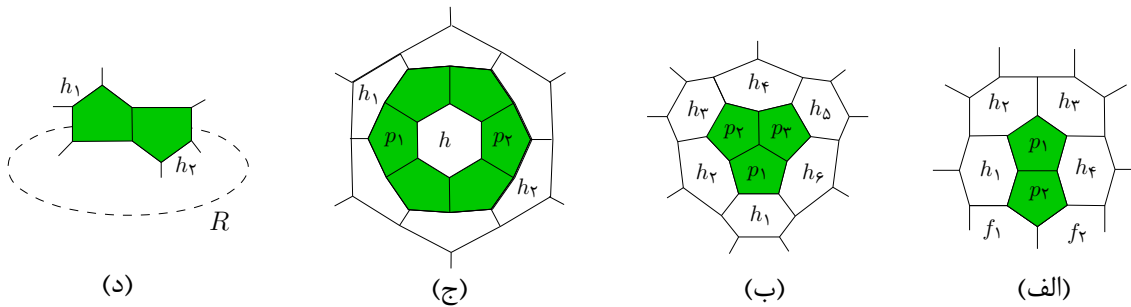
و در نهایت اگر مثل شکل (۱۵.۳) قسمت (ج)، وجه‌های  $f_1$  و  $f_3$  پنج ضلعی باشند  $f_2$  باید شش ضلعی باشد. در نتیجه اگر همه وجه‌های  $f_4, \dots, f_9$  پنج ضلعی باشند  $G$  معادل  $C_{28}$  است. در غیر این صورت حداقل یکی از وجه‌های  $f_4, \dots, f_9$ ، مثلاً  $f_4$  شش ضلعی است و کاهش  $L_1(f_4, f_3, f_2, f_1, h_1)$  برای  $G$  به کار برده خواهد شد.



شکل ۱۵.۳: پیکربندی وجه‌ها در حالت  $k = 3$ .

- در حالتی که  $k = 1$  است، اگر پنج ضلعی  $p_1$  را در نظر بگیریم که فقط در همجواری یک پنج ضلعی دیگر مثل  $p_2$  باشد، با توجه به شکل (۱۶.۳) قسمت (الف)، حداقل یکی از وجه‌های  $f_1$  و  $f_2$  مثلاً  $f_1$  باید شش ضلعی باشد، در این صورت کاهش  $L_0(f_1, p_2, p_1, h_3)$  برای  $G$  به کار برده می‌شود.
  - اگر  $k = 2$  باشد و یک حلقه‌ی پنج ضلعی‌ها که همجوار با هیچ پنج ضلعی دیگری نیست وجود دارد. اگر همان گونه که در شکل (۱۶.۳) قسمت (ب) نشان داده شده سه پنج ضلعی با یک اتم مشترک کنار هم قرار گرفته باشند، کاهش  $L_0(h_1, p_1, p_2, h_4)$  برای  $G$  به کار برده خواهد شد.
- حال فرض کنید چنین حالتی نیست و یک حلقه  $R$  از پنج ضلعی‌ها وجود دارد. امکان ندارد که این حلقه فقط شامل چهار پنج ضلعی باشد، چون در این صورت یک برش ۴-یالی دوری خواهیم داشت. هم چنین حلقه  $R$  تنها در صورتی می‌تواند شامل پنج، پنج ضلعی باشد که داخل آن هم یک پنج ضلعی باشد که در واقع همان حالت  $k = 5$  است که قبلاً بررسی شد. پس حلقه‌ی  $R$  حداقل شامل شش، پنج ضلعی است. اگر همان طور که در شکل (۱۶.۳) قسمت (ج) می‌بینیم داخل یا بیرون حلقه، یک شش ضلعی ساده وجود داشته باشد، می‌توان کاهش  $L_1(h_1, p_1, h, p_2, h_2)$  را برای  $G$  به کار برد و اگر

بیش از یک شش ضلعی داخل حلقه  $R$  وجود داشته باشد، مثل شکل (۱۶.۳) قسمت (د)،  $G$  دارای کاهش  $L_0(h_1, p_1, p_2, h_2)$  می باشد.



شکل ۱۶.۳: پیکربندی وجه‌ها در حالت  $1 \leq k \leq 2$ .

• اگر  $k = 0$  باشد، همه‌ی پنج ضلعی‌ها مجزا هستند. در این صورت  $\pi$  را یک مسیر شامل وجه‌ها در گراف  $G$  در نظر بگیرید که:

۱.  $\pi$  بین همه مسیرهای بین دو پنج ضلعی دارای کم‌ترین طول باشد. دو پنج ضلعی‌ای که  $\pi$  مسیر بین آنها است را  $p_1$  و  $p_2$  می نامیم.

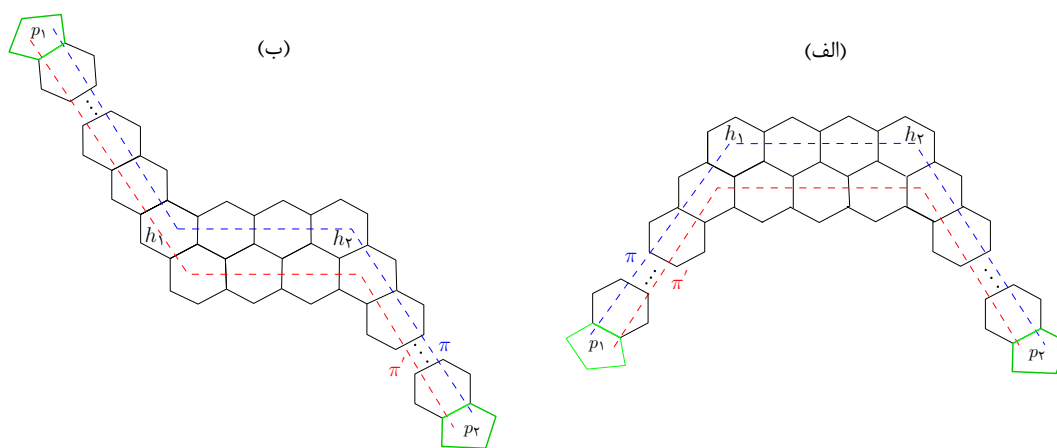
۲. اگر مسیر  $\pi$  دارای شکست باشد، قطعه‌ی بین  $p_1$  و اولین شکست، بلندترین قطعه باشد.

شرط (۱) باعث می شود که وجه‌های روی  $\pi$  به جز وجه‌های  $p_1$  و  $p_2$  شش ضلعی باشند و هیچ شکستی با زاویه‌ی  $60^\circ$  وجود نداشته باشد.

می توان نشان داد که  $\pi$  یا مسیر مستقیم است یا یک شکست با زاویه شکست  $120^\circ$  درجه دارد؛

برای اثبات، فرض کنید  $\pi$  بیش از یک شکست دارد که اولین شکست‌ها در شش ضلعی‌های  $h_1$  و  $h_2$  اتفاق افتاده است. اگر هر دو شکست جهت یکسانی داشته باشند (هر دو به راست یا هر دو به چپ باشند) در این صورت مسیر  $\pi'$  تعریف شده مانند شکل (۱۷.۳) قسمت (الف)، کوتاه‌تر از مسیر  $\pi$  است که در این صورت شرط اول نقض می شود.

اگر دو شکست جهت‌های متفاوتی داشته باشند، مسیر  $\pi'$  تعریف شده به صورت شکل (۱۷.۳) قسمت (ب)، طولی برابر با طول مسیر  $\pi$  دارد، ولی قطعه‌ی اولیه‌ی آن از  $p_1$  تا اولین شکست، بلندتر است که این نیز شرط دوم را نقض می کند. بنابراین  $\pi$  حداکثر یک شکست دارد.



شکل ۱۷.۳:  $\pi$  دارای دو شکست در شش ضلعی های  $h_1$  و  $h_2$  است.

حال ثابت می‌کنیم که وجه‌های همسایه‌ی مسیر  $\pi$  مجزا هستند:

حالت‌های زیر برای این‌که دو وجه همسایه‌ی مسیر  $\pi$  یکی باشند وجود دارد:

- دو وجه همجواری که دارای راس مشترک با یکی از راس‌های پنج‌ضلعی هستند یکی باشند، مثلاً وجه‌های  $f_4$  و  $f_5$  در قسمت (الف) شکل (۱۸.۳) و یا وجه‌های  $f_7$  و  $f_8$  در قسمت (ب) شکل (۱۸.۳). در این صورت یک برش با ۴ یال مستقل وجود دارد که با توجه به بخش (۱.۳) این حالت رد می‌شود.

- دو وجه همجوار در یک سمت مسیر که هر دو در همجواری پنج‌ضلعی نباشند، یکی باشند، مثل وجه‌های  $f_2$  و  $f_3$  در قسمت (الف) شکل (۱۸.۳) یا وجه‌های  $f_3$  و  $f_4$  در قسمت (ب) شکل (۱۸.۳) در این صورت شش‌ضلعی‌ای که همجوار با هر دو وجه است (در این جا  $h_2$ )، دارای یک برش ۵-یالی خواهد بود که با توجه به بخش (۱.۳) تنها پنج‌ضلعی‌ها دارای برش ۵-یالی بدیهی هستند، پس این حالت غیرممکن است.

- دو وجه غیر همجوار در یک سمت مسیر که هر دو در همجواری پنج‌ضلعی نباشند، یکی باشند، مثل وجه‌های  $f_2$  و  $f_4$  در قسمت (الف) شکل (۱۸.۳) یا وجه‌های  $f_3$  و  $f_6$  در قسمت (ب) شکل (۱۸.۳) در این صورت مسیر  $\pi'$  کوتاه‌تر از مسیر  $\pi$  خواهد بود که با اولین شرط در تعریف  $\pi$  تناقض دارد.



- دو وجه غیر همجوار که در یک سمت مسیر  $\pi$  نیستند یکی باشند، در این صورت حالت‌های زیر را در نظر می‌گیریم:

\* وجه‌ها در دو ضلع مقابل یک وجه از مسیر  $\pi$ ، قرار گرفته باشند، مانند وجه‌های  $f_2$  و  $g_3$  در شکل (۱۸.۳) قسمت (ب)، که روی ضلع‌های مقابل شش‌ضلعی  $h_2$  قرار گرفته است. در این صورت اگر شکل را مانند استوانه‌ای در نظر بگیریم که باز شده است و وجه‌های  $f_3$  و  $g_3$  یکی هستند آنگاه وجه  $f_2$  - که همان وجه  $g_3$  است - با پنج وجه  $f_4, h_1, h_2, h_3$  و  $g_2$  همجوار است که با توجه به شش‌ضلعی بودن وجه  $f_2$  و مطالب بخش (۱.۳) این حالت رد می‌شود.

\* وجه‌ها شامل دو نقطه‌ی انتهایی یک یالی باشند که آن یال، یال مشترک بین دو وجه همجوار در مسیر  $\pi$  باشد، مانند وجه‌های  $f_2$  و  $g_3$  در شکل (۱۸.۳) قسمت (الف)، در این صورت اگر شکل را مانند استوانه‌ای در نظر بگیریم که باز شده است و وجه‌های  $f_2$  و  $g_3$  یکی هستند آنگاه وجه  $f_2$  - که همان وجه  $g_3$  است - با چهار وجه  $f_1, f_3, h_1$  و  $h_2$  همجوار است که با توجه به مطالب بخش (۱.۳) که در گراف فولرن برش ۴-یالی وجود ندارد، این حالت رد می‌شود.

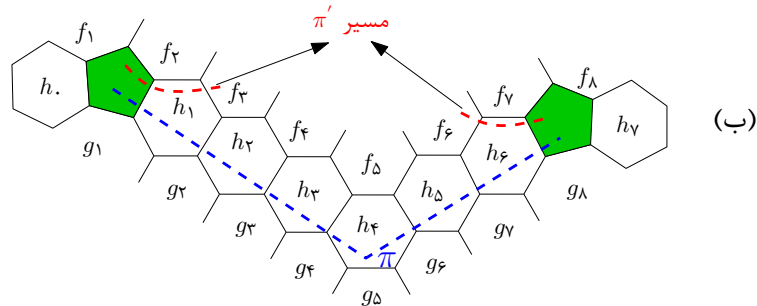
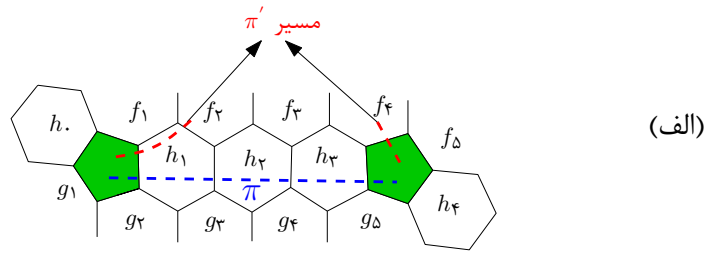
\* در صورتی که دو وجه یکسان، در هیچ یک از دو حالت قبلی صدق نکنند، مثلاً وجه‌های  $f_2$  و  $g_5$  در قسمت‌های (الف) و (ب) در شکل (۱۸.۳)، یکی باشند، مسیر  $\pi$  را می‌توان بین دو پنج‌ضلعی  $p_1$  و  $p_2$  در نظر گرفت که مسیر  $\pi$  کوتاه‌تر از مسیر  $\pi$  است و در این صورت شرط اول برای مسیر  $\pi$  نقض می‌شود.

با توجه به این که همه‌ی حالت‌های بیان شده رد شد، بنابراین وجه‌های همسایه‌ی  $\pi$  از یکدیگر مجزا هستند.

بنابراین در حالت  $k_i = 0$ ، اگر مسیر  $\pi$  هیچ شکستی نداشته باشد، کاهش  $L$  برای  $G$  به کار برده می‌شود و در غیر این صورت کاهش  $B$  را برای گراف  $G$  به کار می‌بریم.

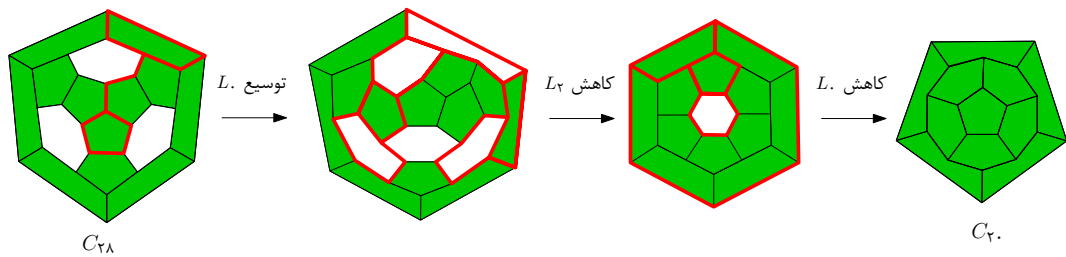
بنابراین همه‌ی فولرن‌ها به جز  $C_{20}$  و  $C_{28}$  را می‌توان با به کار بردن یکی از کاهش‌های نوع  $L$ ،  $B$  یا  $F$  کاهش داد.

برای کامل کردن درستی قضیه‌ی (۲.۲.۳) می‌توان نشان داد که هر فولرنی که با استفاده از یک توسیع روی



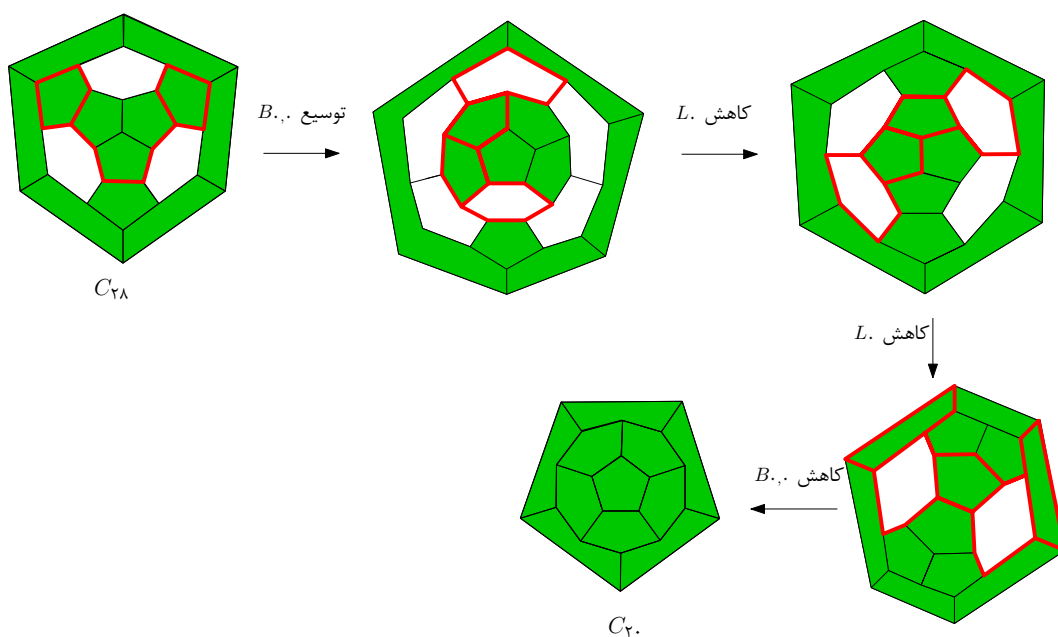
شکل ۱۸.۳: حالت‌هایی که ممکن است وجه‌های همسایه‌ی مسیر  $\pi$  یکی باشند.

$C_{28}$  به دست آمده را می‌توان با به کار بردن کاهش‌های  $L$ ،  $B$  و  $F$  به  $C_{20}$  کاهش داد بدون این‌که  $C_{28}$  در یکی از مراحل میانی ظاهر شود. در شکل‌های (۱۹.۳) و (۲۰.۳) به ترتیب  $C_{28}$  را با اعمال  $L$  و  $B$ ، توسیع داده‌ایم و سپس آن‌ها را به  $C_{20}$  کاهش دادیم بدون این‌که  $C_{28}$  در یکی از مراحل میانی ظاهر شود.  $\square$

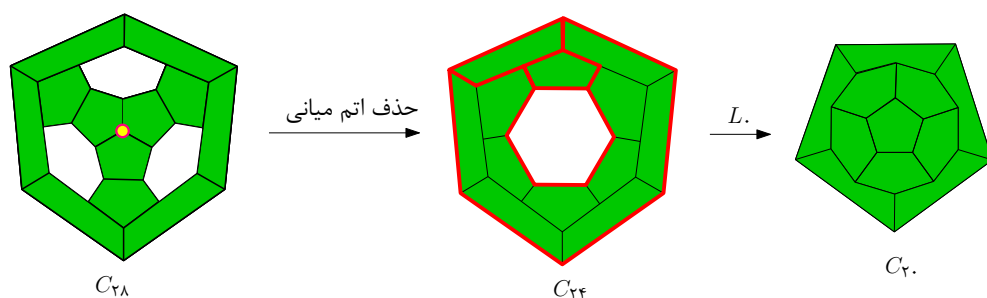


شکل ۱۹.۳:  $C_{28}$  با عمل  $L$  توسیع داده شده است و سپس بدون این‌که  $C_{28}$  در یکی از مراحل میانی ظاهر شود فولرن‌های حاصل شده به  $C_{20}$  کاهش یافته‌اند.

با هزینه‌ی افزودن یک نوع توسیع دیگر می‌توانیم  $C_{28}$  را از  $C_{20}$  به دست آوریم. برای مثال راس میانی  $C_{28}$  را حذف می‌کنیم و رئوس درجه ۲ به وجود آمده را حذف می‌کنیم و بین رئوس همجوار آن‌ها یک یال اضافه می‌کنیم. با این عمل  $C_{24}$  به دست می‌آید و با استفاده از کاهش  $L$  روی  $C_{24}$ ،  $C_{20}$  حاصل می‌شود (شکل (۲۱.۳)).



شکل ۲۰.۳:  $C_{28}$  با عمل  $B_{\cdot, \cdot}$  توسعه داده شده است و سپس بدون این که  $C_{28}$  در یکی از مراحل میانی ظاهر شود فولرن‌های حاصل شده به  $C_{20}$  کاهش یافته‌اند.

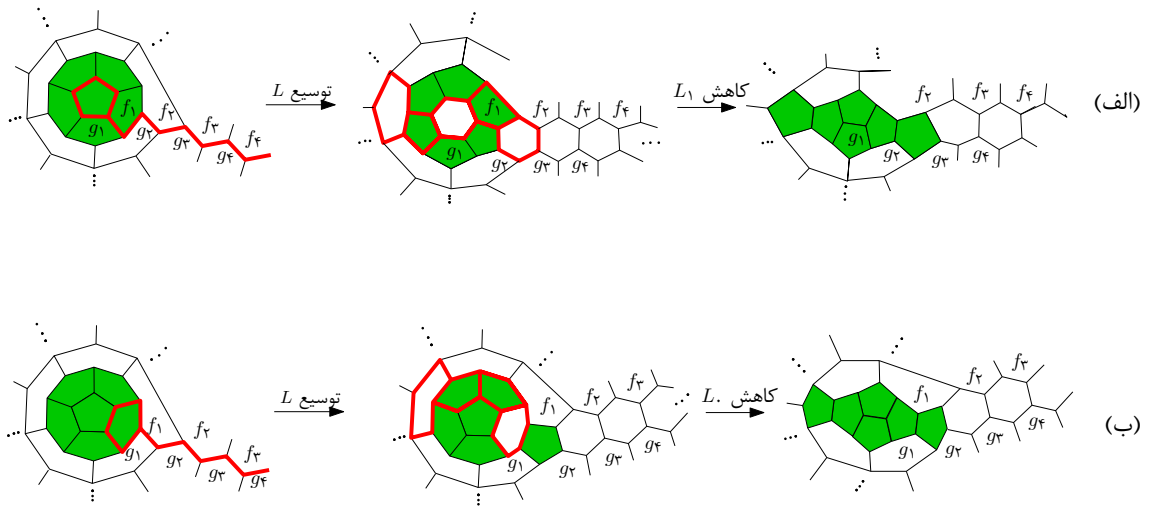


شکل ۲۱.۳: تولید  $C_{28}$  از  $C_{20}$  با معرفی یک نوع توسعه اضافه.

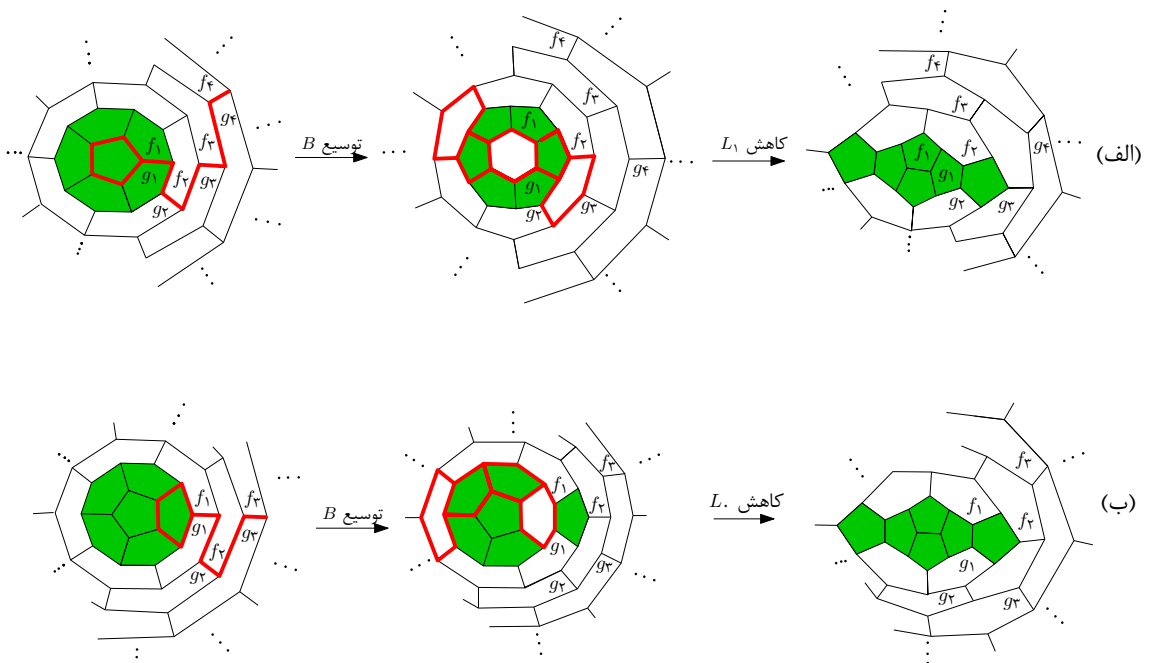
قضیه ۳.۲.۳ [۱۹] هر ایزومر فولرن به جز  $C_{28}$  و نانولوله نوع  $(5, 0)$  می‌تواند با شروع از  $C_{20}$  با استفاده از توسعه‌های  $L$  و  $B$  ساخته شود.

اثبات. ابتدا یادآوری می‌کنیم که همان طور که در حالت  $k = 5$  بیان شد، کاهش  $F$  تنها با نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  قابل استفاده است. دوماً هر فولرنی که با استفاده از یکی از توسعه‌های  $L$  یا  $B$  روی نانولوله نوع  $(5, 0)$  به دست آمده را می‌توان با به کار بردن کاهش‌های  $L$  و  $B$  به فولرنی غیر از نانولوله نوع  $(5, 0)$  کاهش داد. در شکل‌های  $(22, 3)$  و  $(23, 3)$  کلاهک فولرن نوع  $(5, 0)$  و قسمتی از بدنه فولرن نوع  $(5, 0)$  را به

ترتیب با استفاده از توسیع‌های نوع  $L$  و  $B$  توسیع داده‌ایم و سپس آن را به فولرنی که نانولوله نیست کاهش داده‌ایم، چون که شکل کلاهک تغییر یافته و کلاهک نوع  $(5, 0)$  نیست.



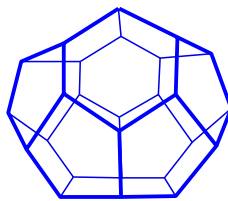
شکل ۲۲.۳: کلاهک فولرن نوع  $(5, 0)$  و قسمتی از بدنه فولرن نوع  $(5, 0)$  را با استفاده از توسیع  $L$  توسیع داده‌ایم و سپس آن را به فولرنی که نانولوله نیست کاهش داده‌ایم.



شکل ۲۳.۳: کلاهک فولرن نوع  $(5, 0)$  و قسمتی از بدنه فولرن نوع  $(5, 0)$  را با استفاده از توسیع  $B$  توسیع داده‌ایم و سپس آن را به فولرنی که نانولوله نیست کاهش داده‌ایم.

قضیه ۴.۲.۳ [۱۹] هر ایزومر فولرن با حداکثر  $30^\circ$  اتم به جز  $C_{28}$  و نانولوله نوع  $(5, 0)$  را می‌توان با شروع از  $C_{20}$  با استفاده از توسیع  $L$  ساخت.

اثبات. در ابتدا توجه کنید در حالتی که پنج‌ضلعی‌ها همجوار هستند، تنها در صورتی که پنج‌ضلعی‌ها در آرایشی مثل شکل (۱۴.۳) هستند و در حالتی که  $f_2$  پنج‌ضلعی و  $f_1$  و  $f_2$  شش‌ضلعی باشند، کاهش نوع  $B$  به کار گرفته شد. چنین فولرنی یک نانولوله نوع  $(3, 3)$  است [۲۲] که آرایش پنج‌ضلعی‌ها در هر دو کلاهک یکی است. کوچک‌ترین نانولوله نوع  $(3, 3)$ ،  $C_{26}$  است (شکل (۲۴.۳)).



شکل ۲۴.۳: فولرن  $C_{26}$ .

در این صورت یک کاهش نوع  $L$  وجود دارد که مسیری را بین یک کلاهک تا کلاهک دیگر کاهش می‌دهد. بنابراین در فولرن‌هایی که شامل پنج‌ضلعی‌های همجوار هستند تنها کاهش نوع  $L$  به کار می‌رود. در فولرنی که همه پنج‌ضلعی‌ها مجزا هستند ممکن است به جز کاهش نوع  $B$  کاهش دیگری قابل استفاده نباشد. پس به دنبال فولرنی هستیم که

- همه پنج‌ضلعی‌ها در آن مجزا هستند.
- به جز کاهش نوع  $B$  کاهش دیگری را نمی‌توان برای آن به کار برد.

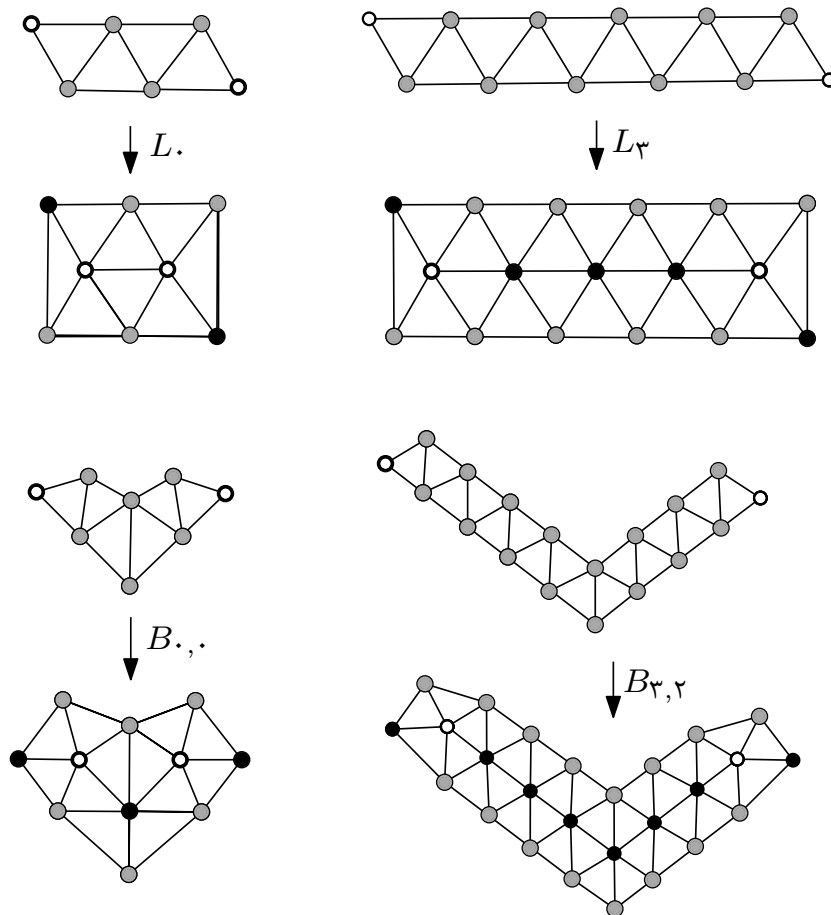
اولین فولرنی که این دو شرط را داشته باشد دقیقاً شناسایی نشده ولی طبق بررسی‌های انجام شده با استفاده از برنامه فولجن [۳] هیچ یک از فولرن‌ها با حداکثر  $30^\circ$  اتم دارای چنین شرایطی نیستند. کوچک‌ترین فولرن دارای این شرایط که تاکنون شناخته شده یک فولرن با  $1340$  اتم بوده که توسط برینکمن در مقاله [۷] گزارش شده است. این فولرن دارای کاهش نوع  $B_{1,6}$  می‌باشد و نمی‌توان هیچ کاهشی از نوع  $L$  را با آن به کار برد. توجه کنید که بیش از  $10^{11}$  ایزومر فولرن با حداکثر  $30^\circ$  اتم وجود دارد [۳، ۱۹]. پس قضیه (۴.۲.۳) برای اکثر مسائل کاربردی، قابل استفاده است.  $\square$

## ۳.۳ تولید فولرن‌ها

### ۱.۳.۳ الگوریتم ساخت فولرن

با استفاده از قضیه (۳.۲.۳) و با شروع از فولرن‌های  $C_{20}$  و  $C_{28}$  و با به کار بردن توسیع‌های  $L$  و  $B$  الگوریتمی را برای تولید همه فولرن‌ها به جز فولرن‌های نانولوله نوع  $(5, 0)$  شرح خواهیم داد. روش ساده‌ای نیز برای تولید فولرن‌های نانولوله نوع  $(5, 0)$  ارائه می‌شود.

در شکل (۲۵.۳) فرم دوگان توسیع‌های  $L$  و  $B$  است که در شکل‌های (۱۲.۳) و (۱۳.۳) نشان داده شده است. در نمایش دوگان یک فولرن، رئوسی که درجه آن‌ها برابر  $k \in \{5, 6\}$  باشد را  $k$ -راس می‌نامیم.



شکل ۲۵.۳: دوگان توسیع‌های  $L$  و  $B$ .

در شکل‌های این بخش، رئوس سفید، ۵-راس‌ها و رئوس مشکی، ۶-راس‌ها را نمایش می‌دهند. رئوس خاکستری رنگ نیز می‌توانند ۵-راس یا ۶-راس باشند.

<sup>۱۲</sup>k-vertex

### ۲.۳.۳ حذف یکرختی

اگر همه‌ی توسیع‌های ممکن در تولید به کار گرفته شوند، بسیاری از فولرن‌های یکرخت تولید می‌شود. ولی هدف این است که از هر گروه خودریختی دقیقاً یک گراف تولید شود. به همین منظور از روش ساخت مسیر متعارفی<sup>۱۳</sup> [۲۸] استفاده می‌کنیم که آن را در ادامه شرح می‌دهیم.

اگر بتوان فولرنی را با استفاده از معکوس یکی از توسیع‌های  $L$ ،  $B$  یا  $F$  به فولرن کوچک‌تری تبدیل کرد، آن فولرن را کاهش‌پذیر می‌گوییم. برای استفاده از روش ساخت مسیر متعارفی ابتدا برای دوگان هر فولرن کاهش‌پذیر  $G$  یک کاهش متعارفی<sup>۱۴</sup> تعریف می‌کنیم. کاهش متعارفی باید برای هر گروه خودریختی  $G$  منحصر به فرد باشد.

دوگان فولرنی که با استفاده از یک کاهش متعارفی روی  $G$  به دست می‌آید را پدر متعارفی<sup>۱۵</sup>  $G$  می‌گوییم. توسیعی که معکوس یک کاهش متعارفی در گراف توسیع یافته  $G$  است، را توسیع متعارفی<sup>۱۶</sup> می‌نامیم. دوگان فولرنی که با استفاده از یک توسیع متعارفی روی  $G$  به دست می‌آید را فرزند متعارفی<sup>۱۷</sup>  $G$  می‌گوییم.

هم‌چنین یک رابطه هم‌ارزی را روی مجموعه همه توسیع‌ها و کاهش‌های دوگان فولرن  $G$  تعریف می‌کنیم. یک توسیع از روی قطعه‌ای که قرار است با استفاده از آن توسیع با یک قطعه بزرگ‌تر جابجا شود مشخص می‌شود. پس دو توسیع را معادل می‌گوییم اگر یک خودریختی از  $G$  وجود داشته باشد که دو قطعه اولیه برای توسیع‌ها را روی هم منطبق کند.

برای کاهش‌های معادل نیز تعریف مشابهی وجود دارد، با این تفاوت که در کاهش، علاوه بر قطعه اولیه، یک جهت چرخشی نیز برای مشخص کردن منحصر به فرد کاهش‌های نوع  $L$  لازم است. بنابراین می‌توان یک پرچم<sup>۱۸</sup> را تعریف کرد که شامل اولین یال روی مسیر متصل‌کننده بین دو پنج‌ضلعی و وجه سمت راست آن یال است و تعیین می‌کند موقعیت پنج‌ضلعی جدید نسبت به موقعیت مسیر متصل‌کننده پنج‌ضلعی‌ها در جهت ساعت‌گرد است یا پادساعت‌گرد. به عنوان مثال در شکل (۲۶.۳) یال  $e$  و وجه  $f$  پرچم هستند که در

<sup>۱۳</sup>Canonical construction path method

<sup>۱۴</sup>Canonical reduction

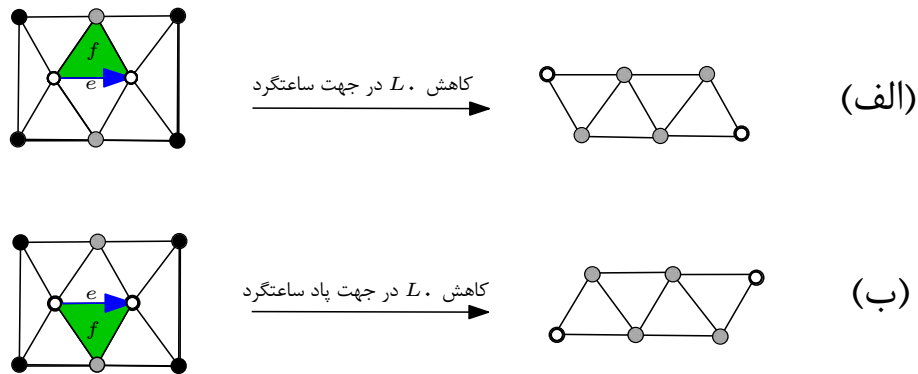
<sup>۱۵</sup>Canonical parent

<sup>۱۶</sup>Canonical expansion

<sup>۱۷</sup>Canonical child

<sup>۱۸</sup>Flag

قسمت‌های (الف) و (ب) در شکل (۲۶.۳) به ترتیب، کاهش  $L$  را در حالت‌هایی که موقعیت پنج‌ضلعی جدید نسبت به موقعیت مسیر متصل کننده پنج‌ضلعی‌ها در جهت ساعت‌گرد و پادساعت‌گرد است نشان داده شده است.



شکل ۲۶.۳: موقعیت پنج‌ضلعی جدید نسبت به موقعیت مسیر متصل کننده پنج‌ضلعی‌ها در کاهش  $L$ .

دو کاهش نوع  $L$  معادل هستند اگر پرچم‌ها یکسان باشند و قطعه‌هایی که کاهش می‌یابند با یک خودریختی حفظ کننده جهت، روی هم نگاشت شوند و یا در حالتی که پرچم‌ها یکسان نیستند قطعه‌ها با یک خودریختی معکوس کننده جهت روی هم نگاشت شوند.

در روش ساخت مسیر متعارفی دو قاعده زیر با دوگان فولرن‌ها به کار می‌رود:

۱. برای دوگان هر فولرن  $G$  تنها یک توسعه از هر کلاس هم‌ارزی از توسعه‌ها استفاده می‌شود.

۲. در هر کلاس یکرختی از گراف‌های مختلف یک گراف را به عنوان نماینده متعارفی کلاس یکرختی انتخاب می‌کنیم. در مورد دوگان فولرن‌ها، نماینده متعارفی، دوگان فولرنی است که در آخرین مرحله‌ی ساخت آن یک توسعه متعارفی استفاده شده باشد.

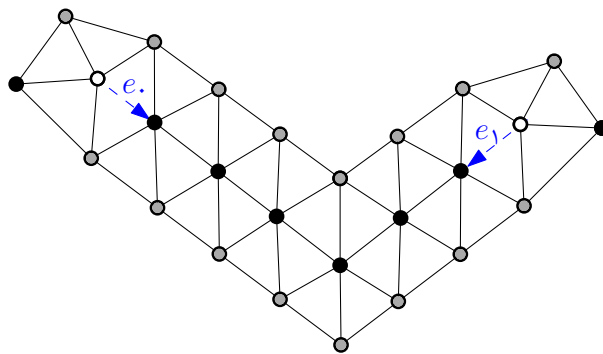
برای نمایش مؤثر کاهش‌ها و توسعه‌ها به روش زیر عمل می‌کنیم:

کاهش‌ها را با سه‌تایی  $(e, x, d)$  نمایش می‌دهیم که  $e$  یال جهت داری است که اولین یال روی مسیر متصل کننده بین دو پنج‌ضلعی است،  $x$  مجموعه پارامتر برای کاهش است؛ مثلاً  $(۲, ۳)$  برای  $B_{۲,۳}$  و  $d$  نیز یک جهت است. مقدار  $d$  برای کاهش‌های نوع  $B$  تعیین می‌کند که گردش در مسیر به سمت چپ است یا راست و برای کاهش‌های نوع  $L$  بین دو تصویر آینه‌ای تمایز ایجاد می‌کند.



با توجه به این که یال  $e$  می‌تواند در هر انتهای مسیر بین دو پنج‌ضلعی باشد، یک جفت سه‌تایی معادل برای کاهش یکسان به وجود می‌آید، به عنوان نمونه به شکل (۲۷.۳) توجه کنید. این سه‌تایی‌ها را سه‌تایی‌های نماینده<sup>۱۹</sup> کاهش می‌گوییم.

به صورت مشابه، سه‌تایی‌های نماینده برای توصیف توسعه‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد.



شکل ۲۷.۳: سه‌تایی‌های  $(e_0, (3, 2), 1)$  و  $(e_1, (2, 3), 0)$  کاهش‌های یکسانی را نمایش می‌دهند.

با استفاده از سه‌تایی‌های نماینده، رابطه‌ی هم‌ارزی به صورت زیر تعریف می‌شود:

۱. سه‌تایی‌های نماینده معادلند اگر کاهش یکسانی را نمایش دهند.

۲. سه‌تایی‌های  $(e, x, d)$  و  $(e', x', d')$  معادلند اگر  $x = x'$  و

• در حالتی که  $d = d'$  یال  $e$  با یک خودریختی حفظ‌کننده جهت روی یال  $e'$  نگاشت شود.

• در حالت  $d \neq d'$  یال  $e$  با یک خودریختی معکوس‌کننده جهت روی یال  $e'$  نگاشت شود.

از آن جایی که هر کاهش با یالی که از یک پنج‌ضلعی خارج می‌شود نمایش داده می‌شود و هر فولرن شامل دوازده وجه پنج‌ضلعی است برای یافتن کاهش متعارفی حداکثر ۶۰ کاهش لازم است ارزیابی شوند. برای این‌که انتخاب کاهش متعارفی به طور کارآمد پیاده‌سازی شود لازم است معیاری داشته باشیم که با محاسبات ساده، کاهش متعارفی را تعیین کند و یا از تعداد کاهش‌هایی که باید بررسی شوند بکاهد. به همین منظور با هر سه‌تایی نماینده  $(e, x, d)$  یک شش‌تایی  $(x_0, \dots, x_5)$  را نیز تعریف می‌کنیم.

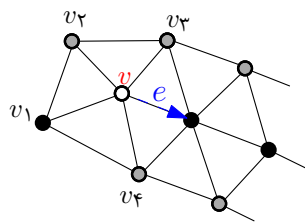
$x_0$  طول کاهش است که سه‌تایی  $(e, x, d)$  نماینده آن است. طول کاهش تعداد یال‌های بین دو  $\omega$ -راس

<sup>۱۹</sup>representing triples

در قطعه ای است که این کاهش روی آن انجام می‌شود. بنابراین با توجه به این که تعداد ۶-راس‌ها بین دو ۵-راس در کاهش نوع  $B_{x,y}$ ،  $x + y + 1$  و در کاهش نوع  $L_x$ ،  $x$  تا است، پس طول کاهش در کاهش  $B_{x,y}$  برابر  $x + y + 2$  و در کاهش  $L_x$  برابر  $x + 1$  می‌باشد. با توجه به تعریف  $x$  به کاهش‌های کوتاه اولویت بیش‌تری خواهیم داد.  $x$  معیار ساده‌ای است و ما را قادر می‌سازد بتوانیم پیش‌بینی‌هایی را برای انتخاب کاهش متعارفی داشته باشیم.

اگر طول بزرگترین مسیر مستقیم در مسیر کاهش را  $a$  بنامیم، مقدار  $x_1$  برابر  $(-a)$  است. پس مقدار  $x_1$  برای کاهش نوع  $L$  برابر  $-x$  است، بنابراین در این مرحله نیز دو کاهش نوع  $L$  با مقدار یکسان  $x$  با هم تمایزی ندارند. مقدار  $x_1$  در کاهش نوع  $B$  برابر  $1 - \max\{x, y\}$  است که ممکن است این مقدار برای دو کاهش نوع  $B$  با مقدار یکسان  $x$  متفاوت باشد ولی مقدار  $x_1$  برای دو کاهش نوع  $L$  و  $B$  با مقدارهای یکسان  $x$  همیشه متفاوت خواهد بود.

با توجه به شکل (۲۸.۳) اگر ۵-راسی که یال  $e$  از آن خارج شده را  $v$  و راس درجه شش که قبل از مسیر کاهش است را  $v_1$  بنامیم، راس  $v$  علاوه بر  $e$  و یال  $vv_1$  با سه یال دیگر هم‌جوار است. اگر رئوس هم‌جوار این سه یال به جز راس  $v$  را به ترتیب ساعت‌گرد  $v_2$ ،  $v_3$  و  $v_4$  نامگذاری کنیم، مقادیر  $x_2$ ،  $x_3$  و  $x_4$  رشته‌هایی هستند که شامل درجه‌های این سه راس به صورت صعودی می‌باشند.



شکل ۲۸.۳: رشته‌های  $x_2$ ،  $x_3$  و  $x_4$  شامل درجه‌ی رئوس  $v_2$ ،  $v_3$  و  $v_4$  به صورت صعودی هستند.

در هر یک از حالت‌های بیان شده مقدار  $x_i$  تنها برای سه‌تایی‌هایی محاسبه می‌شود که دارای کوچک‌ترین مقدار  $(x_0, \dots, x_{i-1})$  باشند و سایر سه‌تایی‌ها را حذف می‌کنیم.

اگر هدف اصلی ما این باشد که تشخیص دهیم آیا توسیعی که برای تولید فولرن استفاده کرده‌ایم متعارفی بوده یا نه، به محض یافتن یک شش‌تایی کوچک‌تر از شش‌تایی مربوط به توسیع استفاده شده، محاسبه را متوقف می‌کنیم. این حالت ممکن است حتی در همان مرحله اولیه یعنی محاسبه مقدار  $x$  رخ دهد.

و اگر هدف، یافتن کاهش متعارفی باشد، زمانی که یک سه‌تایی منحصر به فرد با کوچک‌ترین مقدار  $(x_0, \dots, x_{i-1})$  به دست آید و یا یک جفت سه‌تایی نماینده دارای کوچک‌ترین مقدار  $(x_0, \dots, x_{i-1})$  باشند و هر دو کاهش یکسانی را نشان دهند، در این صورت سه‌تایی به دست آمده، نماینده‌ی کاهش متعارفی است و محاسبه سایر مقادیر را متوقف می‌کنیم.

اگر بعد از محاسبه  $(x_0, \dots, x_4)$  باز هم بیش از یک سه‌تایی نماینده با احتمال متعارفی بودن وجود داشته باشد مقدار  $x_5$  را محاسبه می‌کنیم.

رشته‌ی  $x_5$  ساختار کلی گراف را نسبت به یال و جهت موجود در سه‌تایی نماینده کاهش کدگذاری می‌کند. فرض کنید  $v$  و  $e$  راس و یال موجود در سه‌تایی نماینده‌ی کاهش در گراف مسطح و همبند  $G$  با  $n$  راس باشد و هر راس  $w$  یک رنگ  $c(w) > n$  داشته باشد. برچسب‌های  $l(w) \in \{1, 2, \dots, n\}$  را به طور متوالی به رئوسی که در طول یک بررسی اول سطح یا BFS با شروع از راس  $v$  ملاقات می‌شوند، اختصاص می‌دهیم. بنابراین  $l(w) = 1$  است. با شروع از راس  $v$ ، اولین یال را  $e$  در نظر می‌گیریم، در حالی که برای رئوس دیگر مثلاً راس  $i$  یالی را در نظر می‌گیریم که در امتداد راسی است که بعد از راس  $i$  ملاقات شده است. برای بررسی اول سطح، با توجه به جهت  $d$ ، همسایه‌های یک راس در ترتیب دورانی ساعت‌گرد یا پادساعت‌گرد ارزیابی می‌شوند. نتیجه‌ی این ارزیابی به صورت رشته‌ی زیر کدگذاری می‌شود:

$$\sigma_{v,e} = (c(v), r_1(1), \dots, r_{d_1}(1), \circ, r_1(2), \dots, r_{d_2}(2), \circ, \dots, r_1(n), \dots, r_{d_n}(n), \circ)$$

که  $d_i$  درجه‌ی راس با برچسب  $i$  است و  $(r_j(i), j)$ -امین یال پیرامون راس  $i$  با توجه به جهت  $d$  است. اگر انتهای دیگر این یال راس  $w$  باشد، آنگاه اگر  $w$  برای اولین بار ارزیابی شده باشد  $r_j(i) = c(w)$  و در غیر این صورت  $r_j(i) = l(w)$  است. رشته‌ی  $\sigma_{v,e}$  تنها به راس  $v$ ، یال  $e$  و ساختار گراف بستگی دارد و می‌توان با استفاده از این رشته به ساختار گراف دست یافت [۱۱].

فرض کنید مقدار  $d$  برای سه‌تایی‌های نماینده دو قطعه در دو گراف - که ممکن است گراف‌ها یکی باشند یا نباشند - یکسان باشد، در این صورت مقدار  $x_5$  برای این سه‌تایی‌ها برابر است اگر و تنها اگر گراف‌ها یک یکرختی حفظ‌کننده جهت داشته باشند که یال‌های موجود در سه‌تایی‌ها را روی هم نگاشت دهد. حال اگر جهت‌های سه‌تایی‌ها یکسان نبود مقدار  $x_5$  برای آن‌ها برابر است اگر و تنها اگر یک خودریختی معکوس‌کننده جهت وجود داشته باشد که یال‌های موجود در سه‌تایی‌ها را روی هم نگاشت دهد. بنابراین با محاسبه مقدار نهایی  $x_5$  می‌توانیم به یقین بگوییم دو قطعه‌ای که مقدار یکسان  $(x_0, \dots, x_5)$  دارند با یک تابع یکرختی  $(\phi, \psi)$  روی یکدیگر نگاشت می‌شوند. در این صورت با پیاده‌سازی کاهش‌های مربوطه، قطعه‌ها با قطعه‌های

کوچک‌تر جابجا می‌شوند و متناظر با این جابجایی تصویرهای  $\phi(v)$  از رئوس داخل هر قطعه نیز نظیر به نظیر در قطعه دیگر جابجا می‌شود. به این ترتیب یک یکرختی از گراف‌های کاهش یافته نیز به دست می‌آید که قطعه‌های کاهش یافته را روی یکدیگر نگاشت می‌کند، پس قطعه‌های کاهش یافته نیز با یکدیگر یکرخت هستند.

بر اساس مطالب بیان شده وقتی  $x_5$  محاسبه شد و گرافی مانند  $G$  بعد از انجام بررسی‌ها در مورد متعارفی بودن پذیرفته شد به عنوان یک خروجی فرعی یک گروه خودریختی از  $G$  نیز به دست می‌آید.

به ازای هر سه‌تایی نماینده کاهش هر یک از مقادیر  $x_4, \dots, x_0$  در زمان ثابت و مقدار  $x_5$  در زمان خطی محاسبه می‌شود. بنابراین با توجه به محدود بودن تعداد کاهش‌هایی که باید بررسی شوند، ارزیابی متعارفی بودن یک کاهش می‌تواند در زمان خطی انجام پذیرد.

هر چند تعیین متعارفی بودن یک مجموعه داده شده از کاهش‌ها در زمان خطی یک ویژگی خوب و مطلوب است ولی در عمل، محاسبه مقادیر ترکیبی  $(x_4, \dots, x_0)$  به دلیل این که هزینه کم‌تری دارد، از اهمیت بالاتری برخوردار می‌باشد. در مورد دوگان فولرن‌های با ۱۵۲ راس (فولرن با ۳۰۰ راس) در بیش از ۹۹/۹ درصد از موارد تنها با محاسبه  $(x_4, \dots, x_0)$  تعیین می‌شود که آیا آخرین توسعه استفاده شده متعارفی بوده است [۸]. حتی گاهی اوقات با استفاده از مقادیر کم هزینه  $(x_4, \dots, x_0)$  می‌توانیم قبل از به کار بردن توسعه روی فولرن پیش‌بینی کنیم آیا این توسعه متعارفی هست یا نه. ابتدا لیستی از توسعه‌ها را ایجاد می‌کنیم، همان طور که می‌دانیم ممکن است مسیر بین دو پنج‌ضلعی در کوتاه‌ترین کاهش، تحت تاثیر یک توسعه رشد کند و این کاهش دیگر دارای کوتاه‌ترین طول نباشد. بر این اساس محدودیتی را برای توسعه‌ها در نظر می‌گیریم که عبارت است از این که اگر یک توسعه معین، کاهش‌های کوتاه‌تر را خراب نکند یا کاهشی با طول برابر با طول این توسعه و مقدار  $x_4$  کم‌تر وجود داشته باشد، این توسعه نمی‌تواند متعارفی باشد و آن را از لیست حذف می‌کنیم. با در نظر گرفتن این محدودیت از به کار بردن تعداد زیادی از توسعه‌های غیرمتعارفی جلوگیری می‌شود. در مورد دوگان فولرن‌های با ۱۵۲ راس در ۹۵/۶ درصد از موارد تنها با محاسبه مقادیر  $(x_4, \dots, x_0)$  می‌توانیم توسعه‌هایی که فاقد این محدودیت هستند را شمارش کنیم [۸].

اگر فقط یک سه‌تایی نماینده با کم‌ترین مقدار  $(x_0, \dots, x_i) (i < 4)$  وجود داشته باشد، گروه خودریختی  $G$  بدیهی است و نیاز به محاسبه‌های اضافی نداریم. این حالت در دوگان فولرن‌های با ۱۵۲ راس در ۸۰/۹ درصد از موارد اتفاق می‌افتد. این مقدار با توجه به تعداد رئوس افزایش می‌یابد، برای دوگان فولرن‌های با ۱۲۷ راس ۸۶/۹ درصد و برای دوگان فولرن‌های با ۱۰۲ راس ۹۳/۳ درصد می‌باشد [۸].

قضیه ۱.۳.۳ [۸] فرض کنید از هر کلاس یکرخیختی از دوگان فولرن‌های با  $n - 2$  راس دقیقاً یک نماینده داده شده است. مراحل زیر را اجرا می‌کنیم:

۱. یک توسیع از هر کلاس هم‌ارزی از توسیع‌های  $L$  و  $B$  را پیاده‌سازی می‌کنیم که باعث تولید فولرن با  $n$  راس خواهد شد.

۲. دوگان فولرن جدید، پذیرفته می‌شود، اگر و تنها اگر سه‌تایی نماینده‌ی معکوس آخرین توسیع، بین همه کاهش‌های ممکن کم‌ترین مقدار  $(x_0, \dots, x_5)$  را داشته باشد.

در این صورت دقیقاً یک نماینده از هر کلاس یکرخیختی از دوگان فولرن‌های کاهش‌پذیر با  $n$  راس پذیرفته شده است.

اثبات. فرض کنید  $G$  دوگان یک فولرن کاهش‌پذیر با  $n$  راس باشد. بر اساس قضیه‌ی (۳.۲.۳) حداقل یک کاهش برای  $G$  وجود دارد. بنابراین  $G$  دارای کاهش متعارفی  $\rho$  است. گرافی که از کاهش  $\rho$  روی  $G$  به دست می‌آید با گرافی از مجموعه ورودی یکرخیخت است که آن گراف توسیعی دارد که با معکوس  $\rho$  هم‌ارز است. پارامترهای کاهش معکوس این توسیع با پارامترهای  $\rho$  یکسان است و گراف حاصل از آن با گراف  $G$  یکرخیخت است، بنابراین گراف تولید شده با این توسیع پذیرفته می‌شود. تا این جا ثابت کردیم که از هر کلاس یکرخیختی از دوگان فولرن‌های با  $n$  راس حداقل یک نماینده تولید می‌شود. اکنون باید نشان دهیم که از هر کلاس یکرخیختی حداکثر یک نماینده تولید می‌شود.

فرض کنید دو فولرن یکرخیخت  $G$  و  $G'$  با  $n$  راس توسط الگوریتم پذیرفته شده‌اند. با توجه به این که  $G$  و  $G'$  یکرخیخت هستند، کاهش‌های متعارفی آن‌ها مجموعه پارامترهای  $(x_0, \dots, x_5)$  یکسانی دارند و چون هر دو پذیرفته شده‌اند پس هر دو با توسیع متعارفی ساخته شده‌اند. طبق آن چه قبلاً گفته شد معکوس این توسیع‌ها پارامترهای یکسانی دارند. بنابراین پدرهای آن‌ها یعنی  $G$  و  $G'$  نیز یکرخیخت هستند و یک تابع یکرخیختی وجود دارد که توسیع‌های متناظر را روی هم نگاشت می‌دهد. طبق فرض که از هر کلاس فولرن با  $n - 2$  راس یک نماینده وجود دارد نتیجه می‌شود که  $G$  و  $G'$  یکی هستند و دو توسیع هم‌ارز هستند که با مرحله ۱ تناقض دارد.  $\square$

نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  توسط توسیع‌های  $L$  یا  $B$  نمی‌توانند تولید شوند ولی با استفاده از توسیع نوع  $F$  روی  $C_2$  همه نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  دقیقاً یک بار تولید خواهند شد. به این ترتیب الگوریتم کامل خواهد شد.

### ۳.۳.۳ بهینه سازی

از آن جایی که بیش تر فولرن ها کاهش های کوتاه دارند و ما نیز به کاهش های کوتاه اولویت می دهیم، پس بسیاری از توسیع های بلند متعارفی نیستند و می توانیم برای بهبود کارایی الگوریتم، یک کران بالا برای طول توسیع متعارفی تعریف کنیم.

لم ۲.۳.۳ [۸] دوگان فولرن های کاهش پذیر که شامل همسایگی ۵-راس ها هستند، دارای یکی از کاهش های  $L_1$ ،  $L_2$  یا  $B_{2,2}$  هستند.

اثبات. اثبات لم در بخش (۲.۳) در اثبات قضیه (۲.۲.۳) آورده شده است. □  
بر اساس لم (۲.۳.۳) دوگان هر فولرن کاهش پذیر غیر  $IPR$ ، یک کاهش به طول حداکثر ۲ دارد. طول کوتاه ترین کاهش در دوگان فولرن های  $IPR$  برابر کمترین فاصله بین دو ۵-راس است.

گزاره ۳.۳.۳ [۸] اگر در دوگان فولرن، کوتاه ترین فاصله بین دو ۵-راس حداقل  $d$  باشد، مجموعه رئوس در فاصله حداکثر  $\lfloor \frac{d-1}{4} \rfloor$  از هر ۵-راس مجزا هستند. بنابراین کران پایین برای تعداد رئوس در دوگان فولرن  $f(\lfloor \frac{d-1}{4} \rfloor) \geq 1 + \frac{5}{4}(x+1)x$  است که در آن  $f(x) = 1 + \frac{5}{4}(x+1)x$  است.

اثبات. ابتدا تعداد رئوس پیرامون هر ۵-راس را تا فاصله  $\lfloor \frac{d-1}{4} \rfloor$  از آن محاسبه می کنیم. ۵-راس  $v$  را در نظر بگیرید. گراف  $G_i$  را زیرگرافی از دوگان فولرن تعریف می کنیم که شامل رئوسی است که فاصله ی آنها از  $v$  کوچک تر یا مساوی  $i$  است. ادعا می کنیم که روی مرزگراف  $G_i$  پنج راس درجه ی ۳ و  $5(i-1)$  راس درجه ی ۴ وجود دارد.

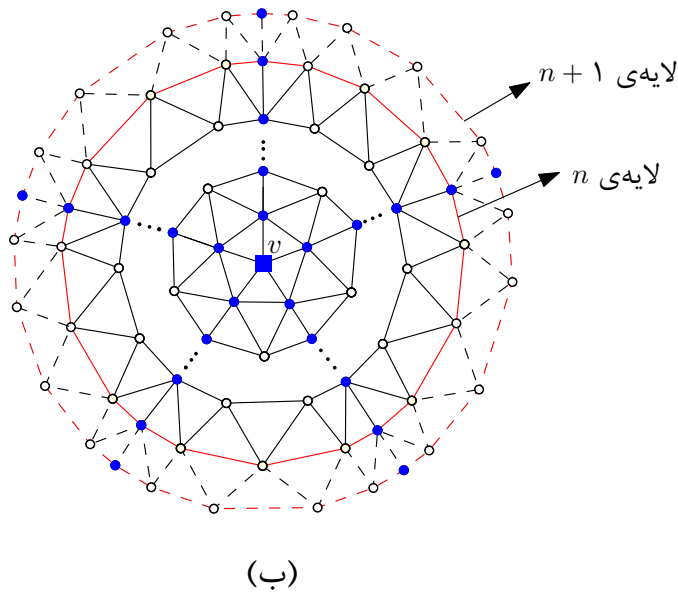
این ادعا را با استقرا ثابت می کنیم.

پایه استقرا: اگر  $i = 1$  باشد، همان طور که در شکل (۲۹.۳) قسمت (الف) مشاهده می کنید، در همجواری راس  $v$  فقط پنج راس درجه ۳ وجود دارد.

فرض استقرا: فرض کنید به ازای  $i < \lfloor \frac{d-1}{4} \rfloor$ ، در مرزگراف  $G_i$  پنج راس درجه ۳ و  $5(i-1)$  راس درجه ۴ وجود دارد.

حکم استقرا: ثابت می کنیم در مرزگراف  $G_{i+1}$ ، پنج راس درجه ۳ و  $5i$  راس درجه ۴ وجود دارد.

گراف  $G_{i+1}$  را از گراف  $G_i$  می سازیم. با توجه به این که در مرزگراف  $G_i$  پنج راس درجه ۳ و  $5(i-1)$  راس درجه ۴ وجود دارد، پس مرزگراف  $G_i$  دارای  $5i$  یال است. چون روی دوگان فولرن بحث می کنیم، پس همه



شکل ۲۹.۳: زیرگراف  $G_i (i \leq \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor)$  از فولرن  $(5-راس v$  با مربع نمایش داده شده، رئوس مرزی هر زیرگراف  $G_i$  با درجه ی ۳ به رنگ مشکی و رئوس مرزی هر زیرگراف  $G_i$  با درجه ی ۴ به رنگ سفید نشان داده شده اند.) لایه ی اضافه شده به لایه ی  $n$  با خط چین نمایش داده شده است.

وجه ها مثلثی هستند. بنابراین برای تولید گراف  $G_{i+1}$  از گراف  $G_i$  به ازای هر یال، دو یال رسم می کنیم، یعنی از هر راس روی مرز  $G_i$  دو یال خارج می شود. با توجه به این که تا فاصله  $\lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor$  از راس  $v$  همه رئوس از درجه شش هستند، پس رئوسی که روی مرز  $G_i$  از درجه ۳ بوده اند باید یک یال دیگر هم خارج شود که در نتیجه پنج راس جدید با درجه ۱ و  $5i$  راس جدید با درجه ۲ ایجاد می شود. سپس برای کامل شدن گراف  $G_{i+1}$  رئوس جدید ایجاد شده را به هم وصل می کنیم که در این صورت روی مرز  $G_{i+1}$  پنج راس درجه ۳ و  $5i$  راس درجه ۴ به وجود می آید.

در نهایت برای شمارش تعداد رئوس پیرامون راس  $v$ ، رئوس مرزی  $G_i$  ها که  $i \leq \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor$  است را با هم جمع می کنیم.

$$\sum_{i=1}^{\lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor} (5 + 5(i-1)) = \sum_{i=1}^{\lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor} (5i) = 5 \left( \sum_{i=1}^{\lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor} i \right) = \frac{5}{2} \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor + 1 \right) \right)$$

و با توجه به این که دوازده  $5-راس$  در دوگان فولرن وجود دارد حداقل تعداد رئوس برابر

$$12 + 12 \left( \frac{5}{2} \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor + 1 \right) \right) \right) = 12 \left( 1 + \frac{5}{2} \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor \left( \lfloor \frac{d-1}{2} \rfloor + 1 \right) \right) \right)$$

□

می باشد.

این نتیجه از به کار بردن توسیعی های غیرمتعارفی و بررسی توسیعی های با طول زیاد جلوگیری می کند.

همچنین اغلب اوقات می‌توان کران بالایی را برای طول بیشینه توسیع متعارفی تعیین کرد.

لم ۴.۳.۳ [۸] اگر دوگان فولرن  $G$  یک کاهش به طول  $2 \leq d$  داشته باشد، آنگاه همه فرزندان  $G'$  از  $G$  کاهش به طول حداکثر  $2 + d$  دارند.

اثبات. اگر  $G', IPR$  نباشد، نتیجه مستقیماً از لم (۲.۳.۳) به دست می‌آید. بنابراین فرض می‌کنیم  $G', IPR$  باشد. در این صورت طول کوتاه‌ترین کاهش برابر طول کوتاه‌ترین فاصله بین دو  $5$ -راس است.

فرض کنید  $W$  کوتاه‌ترین مسیر بین دو  $5$ -راس باشد که یک کاهش به طول  $d$  را در  $G$  ممکن می‌سازد و  $P$  قطعه‌ای باشد که با توسیع آن  $G'$  از روی  $G$  ساخته شود.

با توجه به این که  $2 \leq d$  است و همه رئوس در قطعه  $P$  مجزا هستند، پس  $W$  مسیر بین دو پنج‌ضلعی در یکی از کاهش‌های  $L_0, L_1$  یا  $B_{0,0}$  در گراف  $G$  است. حالت‌هایی که ممکن است طول  $W$  تحت تاثیر توسیع افزایش یابد، در شکل (۳۰.۳) نشان داده شده است. حالت‌های نشان داده شده در قسمت‌های (الف) تا (د) در شکل (۳۰.۳)، در توسیع  $B$  نیز اتفاق می‌افتد.

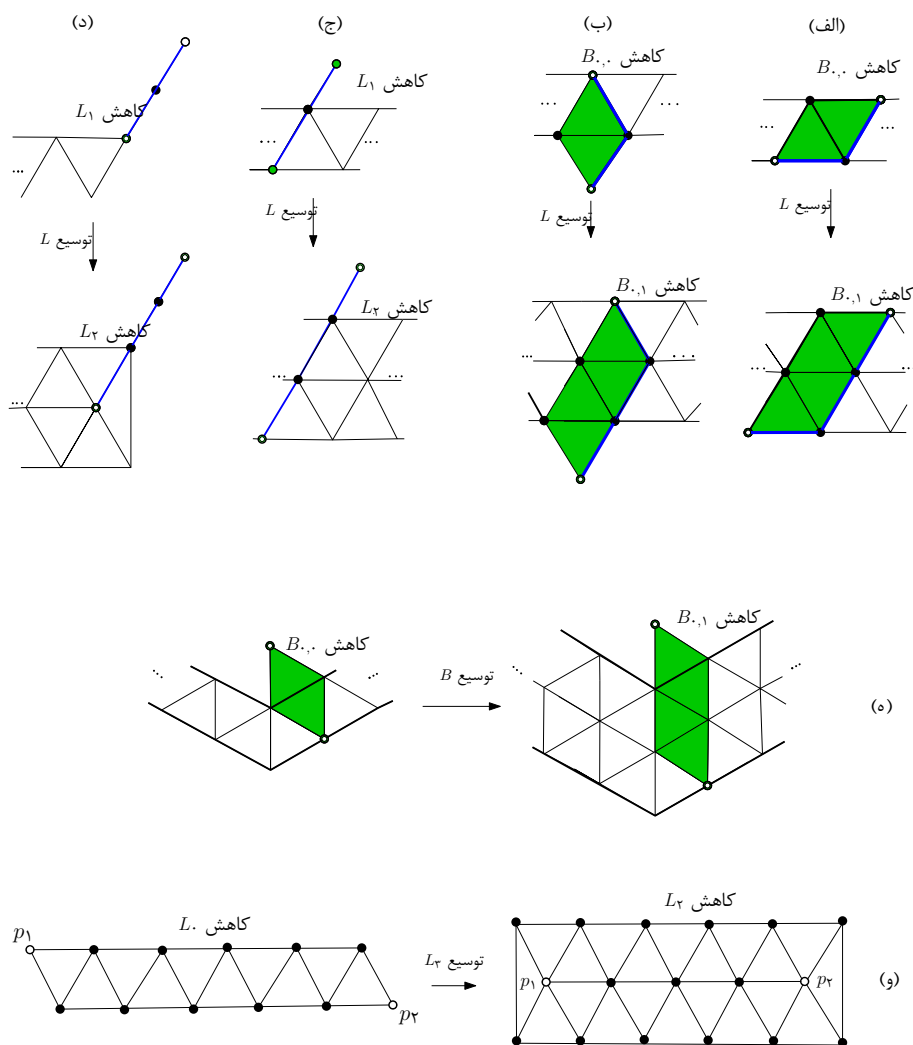
در شکل (۳۰.۳) قسمت (و)، دو  $5$ -راس  $p_1$  و  $p_2$ ،  $5$ -رئوس مربوط به کاهش  $L_0$  هستند که بعد از توسیع به کاهش  $L_2$  تبدیل شده و طول کاهش در قطعه‌ی توسیع داده شده  $2$  واحد افزایش یافته است. در حالتی که  $5$ -راس‌های مربوط به کاهش نوع  $L_1$  نیز در چنین موقعیتی قرار گرفته باشند طول کاهش  $2$  واحد افزایش می‌یابد. بنابراین طول کاهش در قطعه‌ی توسیع یافته حداکثر  $2$  واحد افزایش می‌یابد.

افزایش طول  $W$  در این شکل‌ها به دلیل این است که در توسیع فاصله‌ی بین رئوس روی مرز از یکدیگر و همچنین فاصله‌ی بین  $5$ -راس موجود در توسیع با رئوس روی مرز حداکثر یک واحد افزایش می‌یابد.  $\square$

لم ۵.۳.۳ [۸] اگر دوگان فولرن  $G$  یک کاهش  $L_0$  داشته باشد، آنگاه همه فرزندان متعارفی  $G'$  از  $G$  کاهش به طول حداکثر  $2$  دارند.

اثبات. اگر  $G', IPR$  نباشد، نتیجه مستقیماً از لم (۲.۳.۳) به دست می‌آید. بنابراین فرض می‌کنیم  $G', IPR$  باشد. بر اساس لم (۴.۳.۳)،  $G'$  کاهش به طول حداکثر  $3$  دارد. بنابراین یک فرزند متعارفی با توسیعی به طول حداکثر  $3$  روی  $G$  ساخته شده است. پس  $G'$  می‌تواند با یکی از توسیع‌های  $L_0, L_1, L_2$ ،  $B_{0,0}$  یا  $B_{1,0}$  ساخته شود. اگر  $G'$  با یکی از توسیع‌های  $L_0, L_1$  یا  $B_{0,0}$  ساخته شده باشد، بلافاصله حکم لم ثابت می‌شود.

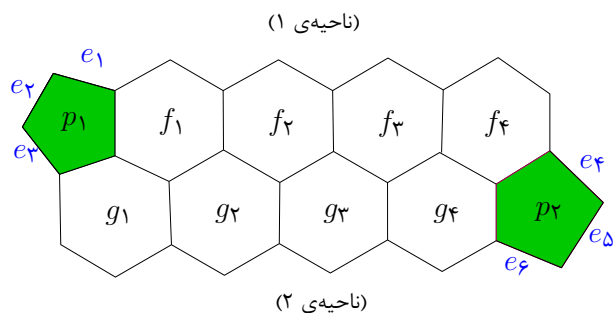




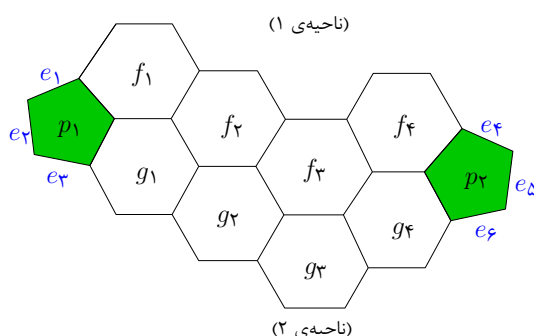
شکل ۳۰.۳: حالت‌هایی که ممکن است طول  $W$  تحت تاثیر توسعه افزایش یابد.

شکل (۳۱.۳) و (۳۲.۳) تنها حالت‌هایی را نشان می‌دهد که یک توسعه  $L_2$  یا  $B_{\dots}$  می‌تواند کاهش  $L_0$  را که شامل دو پنج‌ضلعی  $p_1$  و  $p_2$  است، از بین ببرد. با استفاده از این توسعه‌ها فولرن توسعه داده شده  $G'$  کاهش‌ی به طول کوتاه‌تر از ۳ ندارد. وجه‌های  $f_i$  و  $g_i$  ( $1 \leq i \leq 4$ ) که روی مرز توسعه  $L_2$  یا  $B_{\dots}$  قرار دارند باید شش‌ضلعی باشند، چون در غیر این صورت دوگان فولرن  $G'$  شامل ۵-راس‌هایی خواهد بود که فاصله بین آن‌ها حداکثر ۲ می‌باشد.

با توجه به این که  $p_1$  و  $p_2$  پنج‌ضلعی‌های درگیر در کاهش  $L_0$  هستند باید یک یال مشترک داشته باشند، پس باید یالی از  $\{e_1, e_2, e_3\}$  با یالی از  $\{e_4, e_5, e_6\}$  برابر باشد و چون پنج‌ضلعی‌ها دارای یال مشترک هستند، باید دو وجه مشترک نیز داشته باشند به طوری که هر وجه شامل یکی از نقطه‌های انتهایی این یال مشترک است. همان‌طور که در بخش (۲.۳) گفته شد، وجه‌های  $f_i$  و  $g_i$  ( $1 \leq i \leq 4$ ) باید مجزا باشند.



شکل ۳۱.۳: یک قطعه ابتدایی توسیع  $L_2$ ، شامل پنج ضلعی‌های همجوار  $p_1$  و  $p_2$ . یکی از یال‌های  $e_1, e_2, e_3$  برابر یکی از یال‌های  $e_4, e_5, e_6$  است.



شکل ۳۲.۳: یک قطعه ابتدایی توسیع  $B_{1,0}$ ، شامل پنج ضلعی‌های همجوار  $p_1$  و  $p_2$ . یکی از یال‌های  $e_1, e_2, e_3$  برابر یکی از یال‌های  $e_4, e_5, e_6$  است.

هم‌چنین در هم‌جواری وجه‌های  $f_i$  ( $1 \leq i \leq 4$ ) در ناحیه‌ی یک و در هم‌جواری وجه‌های  $g_i$  ( $1 \leq i \leq 4$ ) در ناحیه‌ی دو در شکل‌های (۳۱.۳) و (۳۲.۳) حداقل دو وجه وجود دارد. در غیر این صورت توسیع‌ها دارای طولی کوتاه‌تر از توسیع نشان داده شده، خواهند بود. به همین دلیل به راحتی دیده می‌شود که هر انتخاب  $a$  و  $b$  باعث می‌شود که فولرن شامل قطعه‌ی شکل (۳۱.۳) یا (۳۲.۳) یک برش ۴-یالی یا ۵-یالی داشته باشد. به عنوان مثال اگر در شکل‌های (۳۱.۳) یا (۳۲.۳)،  $e_3 = e_4$  باشد، وجه‌های  $f_4$  و  $g_1$  در نقاط انتهایی یال مشترک، مشترک هستند و اگر در مسیر  $(g_1, g_2, g_3, g_4, f_4, g_1)$  یک برش ایجاد کنیم، در این صورت یک برش ۵-یالی خواهیم داشت که هر دو مولفه‌ی آن دارای بیش از یک وجه است. در حالتی که  $e_1 = e_6$  باشد نیز به طور مشابه یک برش ۵-یالی غیر بدیهی داریم. در حالتی که  $e_1 = e_4$  وجه‌های  $f_1$  و  $f_4$  در نقاط انتهایی یال مشترک هستند و قطعه دارای برش ۴-یالی در مسیر وجه‌های  $(f_1, f_2, f_3, f_4, f_1)$  است و در حالت  $e_3 = e_6$  نیز به روش مشابه برش ۴-یالی داریم. در حالت‌های دیگر نیز برش‌های ۴-یالی و ۵-یالی به وجود می‌آید که با توجه به مطالب مطرح شده در بخش (۱.۳) فولرن‌ها، دارای برش‌های همبند ۵-یالی

هستند. بنابراین برش ۴-یالی ندارند. هم چنین در بخش (۱.۳) نشان داده شد که نانولوله‌های نوع  $(5, 0)$  تنها فولرن‌هایی هستند که برش ۵-یالی غیر بدیهی دارند.

بنابراین توسیعی وجود ندارد که با  $G$  به کار برده شود به طوری که فولرن توسیع داده دارای کوتاه‌ترین کاهش با طول ۳ باشد، پس همه فرزندان متعارفی  $G$ ، کاهش به طول حداکثر ۲ دارند. □

مشاهده ۶.۳.۳ [۸] اگر در مجموعه رئوس موجود در قطعه ابتدایی یک توسیع به طول  $l$ ، حداقل سه ۵-راس وجود داشته باشد (علاوه بر دو ۵-راس توسیع، حداقل یک ۵-راس دیگر نیز روی مرز قطعه وجود داشته باشد) آنگاه در قطعه توسیع داده شده، دو ۵-راس وجود دارد که در فاصله حداکثر  $1 + \frac{l}{4}$  از یکدیگر قرار دارند.

اثبات. اگر یک توسیع  $L$  در گرافی پیاده‌سازی شود، فاصله‌ی بین دو ۵-راس توسیع در گراف توسیع داده شده برابر  $l$  است. اگر فرض کنیم به جز دو ۵-راس توسیع، فقط یک ۵-راس دیگر روی مرز وجود داشته باشد، در این صورت کوتاه‌ترین فاصله‌ی بین دو ۵-راس، زمانی حاصل می‌شود که ۵-راس روی مرز و یکی از ۵-راس‌های توسیع را در نظر بگیریم. حداکثر فاصله برای این کوتاه‌ترین فاصله در حالتی اتفاق می‌افتد که ۵-راس روی مرز وسط دو ۵-راس توسیع قرار گرفته باشد که در این صورت حداکثر فاصله برابر  $1 + \frac{l}{4}$  است. برای حالت‌های دیگر که علاوه بر دو ۵-راس توسیع بیش از یک ۵-راس روی مرز قرار داشته باشد، طول کوتاه‌ترین فاصله مقداری کمتر از  $1 + \frac{l}{4}$  خواهد داشت. □

لم ۷.۳.۳ [۸] اگر دوگان فولرن  $G$  حداقل دو کاهش به طول ۲ داشته باشد که این کاهش‌ها مجموعه ۵-رئوس یکسانی نداشته باشند، در این صورت همه فرزندان متعارفی  $G'$  از  $G$  کاهش به طول حداکثر ۳ دارند.

اثبات. اگر  $IPR, G'$  نباشد، نتیجه مستقیماً از لم (۲.۳.۳) به دست می‌آید. پس فرض می‌کنیم که  $G'$  دوگان یک فولرن  $IPR$  باشد. بنابراین باید یک کران بالا برای کوتاه‌ترین فاصله بین دو ۵-راس پیدا کنیم. اگر حداقل یکی از کاهش‌های به طول ۲ در قطعه‌ای که توسیع داده می‌شود دخیل نباشد،  $G'$  نیز دارای کاهش به طول ۲ خواهد بود. حال فرض می‌کنیم ۵-راس‌های کاهش‌ها در قطعه‌ی ابتدایی توسیع قرار دارند. بر اساس لم (۴.۳.۳) هر فرزند  $G$  یک کاهش به طول ۴ دارد، در نتیجه هر فرزند متعارفی با توسیعی به طول حداکثر ۴ ساخته شده است. اگر در قطعه ابتدایی توسیع، سه ۵-راس وجود داشته باشد با توجه به مشاهده‌ی (۶.۳.۳) قطعه‌ی توسیع داده شده دارای دو ۵-راس به فاصله حداکثر ۳ از یکدیگر خواهد بود و حکم ثابت می‌شود و اگر یکی از ۵-راس‌های مربوط به یکی از کاهش‌های به طول ۲ در قطعه ابتدایی نباشد، در این صورت فاصله آن

با ۵-راس دیگر این کاهش بعد از توسیع حداکثر یک واحد افزایش می‌یابد که در این حالت نیز حکم اثبات می‌شود. □

لم ۸.۳.۳ [۸] اگر دوگان فولرن  $G$  حداقل ۳ کاهش به طول ۲ داشته باشد که مجموعه ۵-راس‌های کاهش‌ها دو به دو مجزا باشند، آنگاه هر فرزند  $G'$  از  $G$  کاهش به طول حداکثر ۲ دارد.

اثبات. اگر  $G', IPR$  نباشد، نتیجه مستقیماً از لم (۲.۳.۳) به دست می‌آید. اگر  $G'$  دوگان یک فولرن  $IPR$  باشد، بر اساس لم (۷.۳.۳)  $G'$  دارای کاهش به طول حداکثر ۳ است. اگر در قطعه ابتدایی توسیع سه ۵-راس وجود داشته باشد، نتیجه از گزاره (۶.۳.۳) به دست می‌آید. بنابراین فرض می‌کنیم حداقل یک کاهش به طول ۲ وجود دارد که هیچ یک از ۵-راس‌های آن در قطعه ابتدایی نیست. در این صورت مسیر به طول ۲ بین این پنج ضلعی‌ها بدون تغییر در گراف توسیع داده شده باقی می‌ماند و فولرن  $G'$  نیز دارای کاهش به طول ۲ خواهد بود. □

برای دو کاهش  $R_1$  و  $R_2$  در دوگان فولرن  $G$  فاصله  $d(R_1, R_2)$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$d(R_1, R_2) = \{d(a_1, a_2) \mid a_i \text{ یک } 5\text{-راس از } R_i \text{ است}\}$$

لم ۹.۳.۳ [۸] اگر دوگان فولرن  $G$  دو کاهش  $R_1$  و  $R_2$  از نوع  $L$  داشته باشد به طوری که  $d(R_1, R_2) > 4$ ، آنگاه همه فرزندان متعارفی  $G'$  از  $G$  کاهش  $L$  دارند.

اثبات. بر اساس لم (۵.۳.۳)،  $G'$  دارای کاهش به طول حداکثر ۲ است. پس توسیعی که با  $G$  به کار برده شده و باعث تولید  $G'$  شده علاوه بر  $L$  می‌تواند یکی از دو نوع  $L_1$  و یا  $B_0$  باشد. در هر دو توسیع، فاصله بین دو ۵-راس در قطعه‌ی اولیه، حداکثر ۴ است. بنابراین با توجه به این که  $d(R_1, R_2) > 4$  حداقل یکی از جفت ۵-راس همسایه در یکی از کاهش‌های  $R_1$  یا  $R_2$  بدون تغییر خواهد ماند و رئوس همسایه نیز یا بدون تغییر باقی می‌مانند و یا به ۶-راس تبدیل می‌شوند که در هر حالت کاهش  $L$  امکان پذیر خواهد بود. □

برای دوگان فولرن‌های با ۱۵۲ راس، در ۹۳.۹ درصد از موارد می‌توان با استفاده از لم‌های (۴.۳.۳)، (۷.۳.۳)، (۸.۳.۳) و (۹.۳.۳) یک محدوده برای طول توسیع‌های متعارفی تعیین کرد. [۸]

### ۴.۳ تولید فولرن‌های $IPR$

در بخش قبل الگوریتم تولید فولرن برای تولید همه فولرن‌ها توسعه داده شد. می‌توان با ایجاد محدودیت‌هایی الگوریتم را برای تولید فولرن‌های  $IPR$  نیز به کار برد:

همان طور که در بخش (۲.۳) گفته شد هر توسعه  $L_i$ ،  $(i + 2)$  وجه را به قطعه اضافه می‌کند و هر توسعه  $B_{i,j}$ ، نیز  $(i + j + 3)$  وجه را به قطعه اضافه می‌کند. در دوگان فولرن‌ها نیز توسعه‌های  $L_i$  و  $B_{i,j}$  به ترتیب  $(i + 2)$  و  $(i + j + 3)$  راس را به قطعه اضافه می‌کنند.

توسیع  $L$  تنها توسیعی است که تعداد راس‌ها در دوگان فولرن را ۲ واحد افزایش می‌دهد، ولی فولرن حاصل از توسعه  $L$  هیچ‌گاه دوگان فولرن  $IPR$  نیست. در زمان ساخت دوگان فولرن‌های  $IPR$  با  $n$  راس، دوگان فولرن‌های  $IPR$  با  $n - 2$  راس نباید ساخته شوند و دوگان بزرگ‌ترین فولرنی که با یک توسعه به کار برده می‌شود باید دارای  $n - 3$  راس باشد.

در مورد دوگان فولرن‌های با  $n - 4$  راس تنها توسعه‌های به طول ۳ یعنی  $L_2$  و یا  $B_1$  می‌تواند منجر به تولید دوگان فولرن‌های  $IPR$  با  $n$  راس شود. هم چنین اگر دوگان یک فولرن با  $n - 4$  راس شامل کاهش  $L$  باشد از لم (۵.۳.۳) نتیجه می‌شود که توسعه‌های به طول ۳ متعارفی نیستند. بنابراین می‌توانیم دوگان همه فولرن‌های با  $n - 4$  راس که شامل کاهش  $L$  هستند را رد کنیم. هم چنین باید از به کار بردن توسعه‌های  $L$  با دوگان فولرن‌های با  $n - 6$  راس اجتناب شود. چون باعث تولید دوگان فولرن با  $n - 4$  راس می‌شود که آن فولرن دارای کاهش  $L$  است.

این محدودیت‌های ساده قبلاً در یک برنامه کارا استفاده شده که می‌توانید نتایج آن را در جدول (آ-۱) در

پیوست (آ) مشاهده کنید [۸].

## ۵.۳ ارزیابی و نتایج

زمان‌های اجرا و یک مقایسه با فولجن در جدول (آ-۱) در پیوست (آ) آورده شده است [۸]. طبق مرجع [۸] الگوریتمی که در این فصل شرح داده شد باکی‌ژن<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. برنامه توسط gcc کمپایل شده و در یک رشته‌ی واحد روی CPU Intel Xeon L5520 در ۲/۲۷ گیگا هرتز اجرا شده است.

باکی‌ژن برای تولید همه فولرن‌ها تا ۴۰۰ راس استفاده شده بود. این امر منجر به تشخیص یک خطای برنامه‌نویسی در فولجن شد که خطاهایی را برای فولرن‌ها با شروع در ۱۳۶ راس و فولرن‌های IPR با شروع در ۲۵۴ راس نشان می‌داد. بعد از تصحیح خطا در فولجن، دو برنامه تا حداقل ۳۸۰ راس با هم سازگار هستند. بر اساس نتایج در [۸] در جدول‌های (آ-۲) تا (آ-۱۰) در پیوست (آ) مقادیری آورده شده که مقادیر مقاله برینکمن و در [۳] را اصلاح کرده است. هم‌چنین محاسبات ارائه شده توسط برینکمن [۱۲] که بر اساس برنامه فولجن است، تکرار شده و توسعه داده شده است که نتایج آن در جدول‌های (آ-۲) تا (آ-۸) در پیوست (آ) آورده شده است.

همان‌طور که در بخش‌های قبلی گفته شده باکی‌ژن فولرن‌ها را از فولرن‌های کوچک‌تر تولید می‌کند، در حالی که برنامه فولجن به این شکل عمل نمی‌کند و به همین دلیل هزینه‌های تولید فولرن‌ها در برنامه فولجن به طور قابل ملاحظه‌ای از هزینه‌های تولید فولرن‌ها در برنامه باکی‌ژن بیشتر است. به عنوان مثال برنامه باکی‌ژن همه فولرن‌ها با  $n \in [290, 300]$  راس را بیش از ۱۵ برابر سریع‌تر از برنامه فولجن تولید می‌کند. مقایسه بیشتر برنامه فولجن و باکی‌ژن را می‌توانید در جدول (آ-۱) در پیوست (آ) مشاهده کنید. این جداول، نتایج ارائه شده در مرجع [۸] هستند.

---

<sup>۲</sup>Buckygen

## فصل ۴

### تولید کلاهک نانولوله‌ها

## ۱.۴ مقدمه

نانولوله‌های کربن اولین بار در سال ۱۹۹۱ توسط سومیو ایجیما<sup>۱</sup> کشف شد [۲۰]. در این فصل الگوریتمی را برای ساخت همه کلاهای غیر یکرخت که با یک بدنه‌ی دلخواه سازگاری دارند و در مرجع [۱۳] ارائه شده است، را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. قبلاً روش‌های مختلفی برای حل این مسئله پیشنهاد شده است [۱۶، ۱] ولی بیش‌تر این روش‌ها یا نادرست هستند و یا قادر نیستند کلاهای نانولوله‌های با قطر بزرگ را در زمان مورد قبولی شمارش کنند. اولین الگوریتم کارآمد و قابل قبولی که برای شمارش کلاهای نانولوله ارائه شد، الگوریتم شرح داده شده در مقاله [۵] است و هدف ما در این فصل بررسی نتایج این الگوریتم و بیان میزان بهبود کارایی الگوریتم‌های اولیه است.

## ۲.۴ تعاریف

تعریف ۱.۲.۴ وصله<sup>۲</sup> گراف مسطحی است که هر وجه آن پنج‌ضلعی یا شش‌ضلعی است، درجه‌ی همه‌ی رئوس داخلی آن ۳ و درجه‌ی رئوس روی مرز ۲ یا ۳ هستند.

یک راس مرزی با درجه ۲ را ۲-راس<sup>۳</sup> و راس مرزی با درجه ۳ را ۳-راس<sup>۴</sup> می‌نامیم. یال محدب<sup>۵</sup> یالی است که هر دو نقطه انتهایی آن ۲-راس باشد و اگر رئوس انتهایی یک یال مرزی ۳-راس باشد، آن یال را یال مقعر<sup>۶</sup> می‌نامیم.

وصله شبه‌محدب<sup>۷</sup> وصله‌ای است که هیچ یال مقعری در مرز آن وجود نداشته باشد و وصله تقریباً شبه‌محدب<sup>۸</sup> وصله‌ای است که دقیقاً یک یال مقعر روی مرز آن وجود داشته باشد (شکل (۱.۴)).

با توجه به تعریف کلاهای و بدنه‌ی نیم‌لوله که در فصل ۱ بیان شد و این که هیچ مرز طبیعی بین کلاهای و بدنه

<sup>۱</sup>Sumio Lijima

<sup>۲</sup>Patch

<sup>۳</sup>2-vertex

<sup>۴</sup>3-vertex

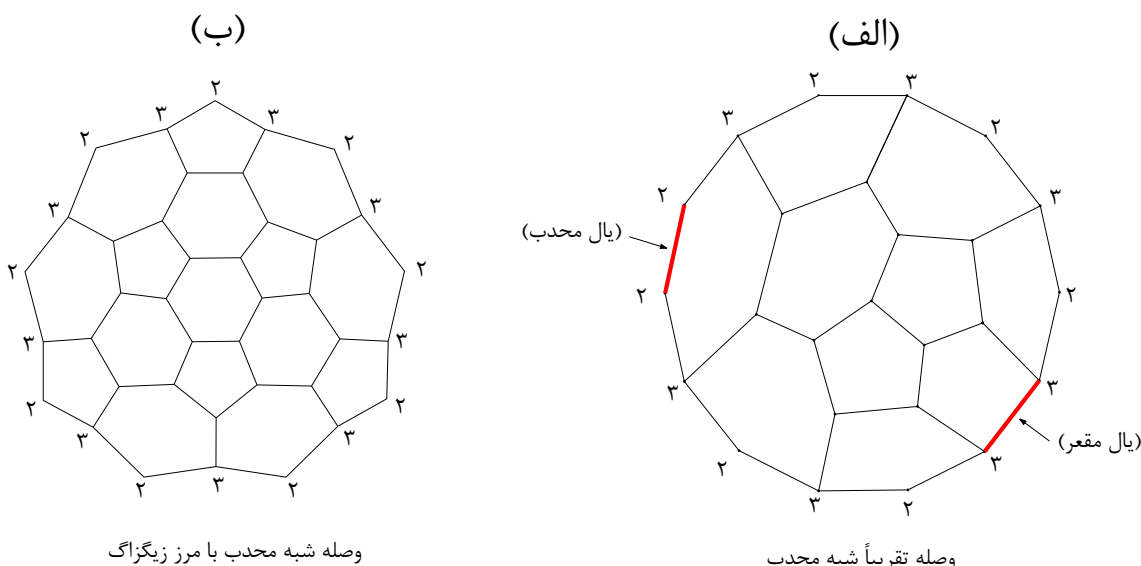
<sup>۵</sup>Convex edge

<sup>۶</sup>Concave edge

<sup>۷</sup>Pseudoconvex

<sup>۸</sup>Almost pseudoconvex





شکل ۱.۴: وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب.

نیم‌لوله وجود ندارد، مرز بین این دو قسمت باید به گونه‌ای انتخاب شود که شمارش کلاهک‌ها تا حد امکان کارا باشد.

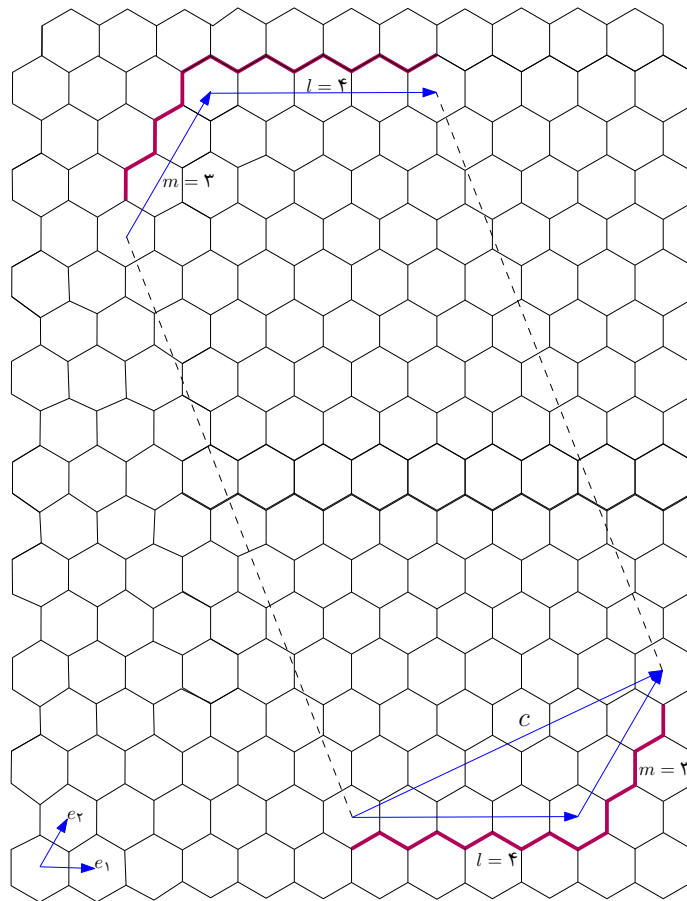
همان طور که در قسمت‌های (الف) و (ب) در شکل (۱.۴) به عنوان یک مثال نشان داده شده، اگر در وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب، ۲-راس‌ها را با عدد ۲ و ۳-راس‌ها را با عدد ۳ برچسب گذاری کنیم و با شروع از یک ۲-راس در وصله‌ی شبه‌محدب و یا ۲-راس دوم در یال محدب از یک وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب، درجه‌ی رئوس را بنویسیم، دنباله‌ای به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  ایجاد می‌شود که در حالتی که وصله، شبه‌محدب باشد  $m = ۰$  است.

در فصل ۱ گفته شد که مرز بدنه‌ی نیم‌لوله به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  است. بنابراین کلاهک نیم‌لوله نیز باید دارای مرزی به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  باشد. در نتیجه کلاهک نیم‌لوله یک وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب و یا شبه‌محدب است.

در شکل (۲.۴) بدنه‌ی یک نیم‌لوله با مرز به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  و در شکل (۱.۴) قسمت (الف)، کلاهک نیم‌لوله‌ای با مرز به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  نشان داده شده است که در هر دو  $l = ۴$  و  $m = ۳$  است.

گزاره ۲.۲.۴ اگر وصله‌ای دارای مرزی به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  باشد، هر تعداد لایه شش ضلعی به آن اضافه کنیم، فرم مرز یا نیم‌لوله‌ی متناظر آن تغییر نمی‌کند.

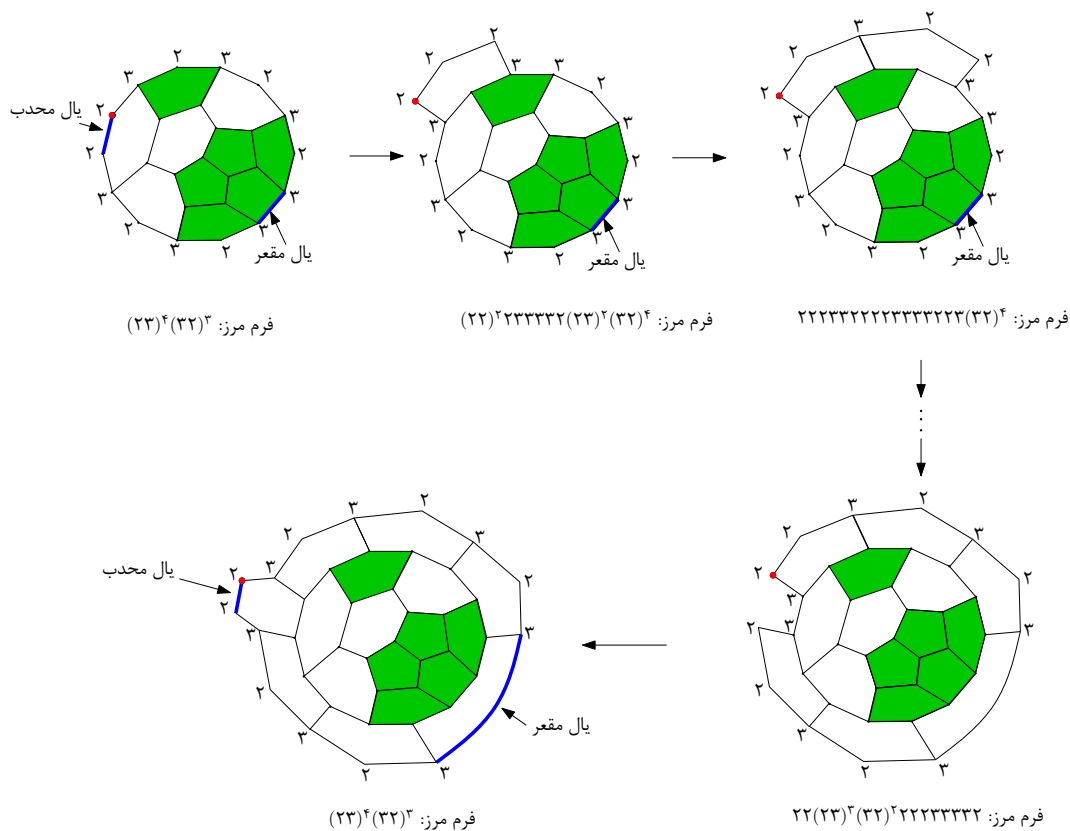
اثبات. فرض کنید وصله‌ای با مرز به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  وجود دارد. برای اثبات، شش ضلعی‌ها را یکی یکی و در جهت ساعت‌گرد به مرز اضافه می‌کنیم و فرم یال‌ها را با نوشتن متوالی درجه‌ی رئوس انتهایی یال‌ها در جهت



شکل ۲.۴: تصویر بدنه نیم‌لوله‌ی  $(l, m)$  روی شبکه‌ی شش ضلعی‌ها.

ساعت‌گرد مشخص می‌کنیم. در بررسی یال‌های مرزی، فرم یال‌ها به ترتیب ساعت‌گرد نوشته می‌شود. با توجه به این که درجه‌ی هر راس باید از درجه‌ی ۳ باشد، برای افزودن هر شش ضلعی از یک راس درجه‌ی ۲ شروع به افزودن یال می‌کنیم تا به ۲-راس بعدی برسیم. اگر وصله دارای یال‌های محدب و مقعر باشد، از دومین راس درجه‌ی ۲ روی یال محدب، شروع به افزودن شش ضلعی‌ها می‌کنیم. با افزودن اولین شش ضلعی دو یال مرزی به فرم‌های ۲۳ و ۳۲ با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۲ و ۲۲ و ۲۳ جابجا می‌شود. در افزودن شش ضلعی‌های بعدی تا قبل از شش ضلعی که یال مقعر را می‌پوشاند، افزودن هر شش ضلعی، یال‌های به فرم ۲۳ و ۳۲ و ۳۲ با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۲ و ۲۳ جابجا می‌شود. شش ضلعی که یال مقعر را می‌پوشاند، یال‌های به فرم ۲۳ و ۳۳ و ۳۳ و ۳۲ را می‌پوشاند و یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۳ در مرز قرار می‌گیرد و شش ضلعی‌های بعدی تا قبل از آخرین شش ضلعی، یال‌های به فرم ۲۳ و ۳۳ و ۳۲ را با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۲ و ۲۳ جابجا می‌کند و افزودن آخرین وجه شش ضلعی، یال‌های به فرم ۲۳ و ۳۳ و ۳۲ را با یال‌های به فرم ۲۲ و ۲۳ جابجا می‌کند. بنابراین در نهایت فرم مرز تغییر نمی‌کند. به عنوان مثال، در شکل (۳.۴) تغییرات فرم مرز نشان

داده شده است که فرم مرز وصله را با نوشتن متوالی درجه‌ی رئوس در جهت ساعت‌گرد به دست می‌آوریم.

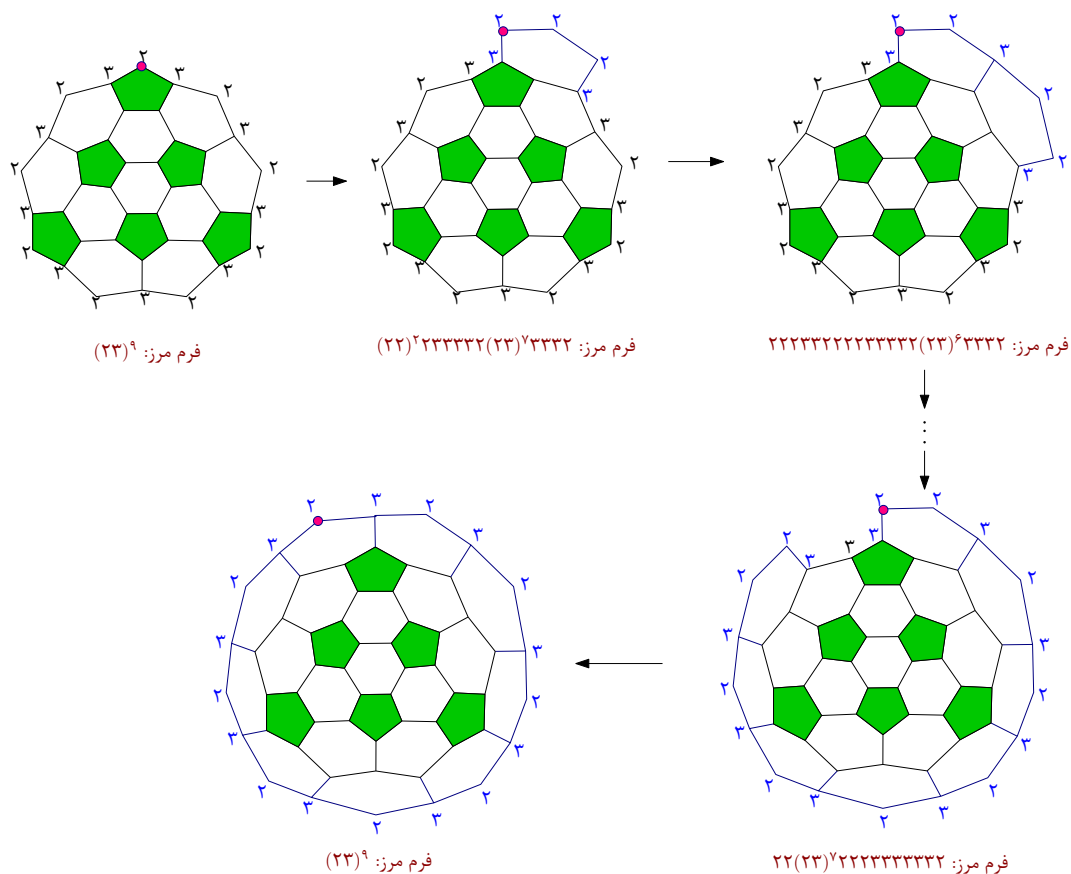


شکل ۳.۴: افزودن یک لایه از شش ضلعی‌ها به وصله تقریباً شبه‌محدب.

اگر وصله، شبه‌محدب باشد، یعنی یال محدب و مقعری نداشته باشد، از یکی از ۲-راس‌های روی مرز شروع به افزودن شش ضلعی‌ها می‌کنیم. با افزودن اولین شش ضلعی یال‌های به فرم ۲۳ و ۳۲ در مرز در جهت ساعت‌گرد با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۲ و ۲۲ و ۲۳ جایجا می‌شود. در مورد بقیه‌ی شش ضلعی‌ها تا قبل از آخرین شش ضلعی، افزودن هر وجه شش ضلعی، یال‌های مرزی به فرم ۲۳ و ۳۳ و ۳۲ با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۲ جایجا می‌شود و افزودن آخرین شش ضلعی یال‌های مرزی به فرم ۲۳ و ۳۳ و ۳۳ و ۳۲ با یال‌های به فرم ۳۲ و ۲۳ جایجا می‌شود. بنابراین در نهایت فرم مرز تغییری نمی‌کند (شکل ۴.۴). □

بر اساس مشاهده‌ی (۲.۲.۴)، توجه‌مان را به کلاهک‌هایی معطوف می‌کنیم که حداقل یک پنج ضلعی در مرز آن وجود داشته باشد.

مرز هر وصله‌ی شبه‌محدب با یک دنباله‌ی دوری توصیف می‌شود. این دنباله شامل تعداد ۲-راس‌ها بین یال‌های محدب در جهت ساعت‌گرد است. چنانچه یال محدبی وجود نداشته باشد ولی حداقل یک پنج ضلعی در مرز باشد، دنباله‌ی دوری شامل تعداد ۲-راس‌ها بین پنج ضلعی‌ها است.



شکل ۴.۴: افزودن یک لایه از شش ضلعی‌ها به وصله‌ی شبه‌محدب.

دنباله‌ی مرزی دوری، متعارفی<sup>۹</sup> است، اگر دارای ترتیب لغت‌نامه‌ای کمین بین همه جایگشت‌های دوری باشد. مرز وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب نیز به روش مشابه توصیف می‌شود. در وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب همیشه دنباله‌ی مرزی متعارفی از اولین یال محدبی که در جهت ساعت‌گرد بعد از یال مقعر منحصر به فرد قرار دارد، شروع می‌شود و فاصله بین یال مقعر و یال‌های محدب همسایه و نیز فاصله بین یال‌های محدب را ثبت می‌کند.

### ۳.۴ ساخت

با در نظر گرفتن توضیحات بخش قبل، هدفمان این است که وصله‌های همبند ساده‌ی غیر یکریختی بسازیم که شامل شش ضلعی‌ها و شش پنج ضلعی است، به طوری که حداقل یک پنج ضلعی روی مرز وصله به فرم  $(۲۳)^l(۳۲)^m$  قرار داشته باشد.

<sup>۹</sup>Canonical

در چنین وصله‌ای با هر طول مرزی  $n = l + m$  می‌توانیم با استفاده از قضیه‌ی زیرکران بالای  $V(n)$  را برای تعداد رئوس به دست آوریم.

قضیه ۱.۳.۴ [۱۷] به ازای  $n, k \in \mathbb{N}$  و  $k < 6$  یک وصله با مرز به طول حداکثر  $n$  و  $k$  پنج‌ضلعی، در صورتی دارای بیش‌ترین تعداد شش‌ضلعی است که چیدن وجه‌ها به صورت مارپیچ و با شروع از پنج‌ضلعی‌ها انجام شود و تا جایی که طول مرز می‌تواند بزرگ شود افزودن شش‌ضلعی‌ها ادامه می‌یابد.

حداکثر تعداد رئوس برای این وصله با  $V(n, k)$  نمایش داده می‌شود. با توجه به این که در قضیه‌ی (۱.۳.۴)،  $k < 6$  است و کلاhek نیم‌لوله، شامل شش پنج‌ضلعی است برای این که بتوانیم از این قضیه برای کلاhek نیم‌لوله استفاده کنیم می‌توانیم یکی از پنج‌ضلعی‌های موجود در مرز را با شش‌ضلعی جابجا کنیم که در این صورت تعداد رئوس روی مرز یک واحد افزایش می‌یابد. در نتیجه  $V(n) = V(n+1, 5) - 1$  به دست می‌آید.

تعریف ۲.۳.۴  $\rho(n)$  کلاس وصله‌های به طول مرز حداکثر  $n$  است که در زمانی که تعداد پنج‌ضلعی‌ها شش تا است، دارای حداقل یک پنج‌ضلعی و حداکثر شش پنج‌ضلعی روی مرز است.

وصله‌های جدید با افزودن وجه‌ها به وصله موجود به دست می‌آید. این کار باید به گونه‌ای انجام شود که همه وصله‌ها تولید شوند و هیچ وصله‌ای بیش از یک بار تولید نشود. برای رسیدن به این هدف، وصله‌ها را نشان‌دار می‌کنیم، یعنی روی یکی از یال‌های محدب یا در صورت نداشتن یال محدب، روی یال مرزی یکی از پنج‌ضلعی‌ها، یک نشان قرار می‌دهیم.

یالی که نشان روی آن قرار دارد را یال نشان‌دار و وجه شامل یال نشان‌دار را وجه نشان‌دار می‌نامیم. نشان را متعارفی گوئیم، اگر در موقعیتی قرار گرفته باشد که توصیف مرزی وصله با شروع از یال نشان‌دار، یک دنباله متعارفی را نتیجه دهد. کلاس همه وصله‌های نشان‌دار متعارفی به جای وصله‌های غیر نشان‌دار در  $\rho(n)$  را با  $\rho(\bar{n})$  نشان می‌دهیم.

ممکن است وصله‌های نشان‌دار مختلفی که در طول ساخت به دست می‌آیند با وصله‌های غیر نشان‌دار یکرخت باشند. همان‌طور که در بخش (۲.۴) گفته شد، مرز وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب به فرم  $m(32)^l(23)^l$  است.

در حالتی که  $l > m \neq 0$  باشد، یک یال محدب روی مرز وجود دارد، پس تنها یک انتخاب برای نشان وجود دارد و در نتیجه رابطه‌ی یک به یک بین وصله‌های نشان‌دار و بدون نشان وجود دارد.

در حالت  $m = 0$  یال محدبی نداریم و ممکن است چند پنج‌ضلعی در مرز وجود داشته باشد که در این صورت نشان می‌تواند روی هر یک از یال‌های مرزی پنج‌ضلعی‌ها قرار بگیرد، بنابراین رابطه‌ی یک به یکی بین وصله‌های نشان‌دار و بدون نشان وجود ندارد.

با توجه به این که جهت حرکت روی مرز وصله‌ها می‌تواند ساعت‌گرد یا پادساعت‌گرد باشد، در حالت  $m = l$  ممکن است دو وصله‌ی نشان‌دار، تصویر آینه‌ای یکدیگر باشند.

اعمال توسیع برای ساخت وصله‌ها را می‌توانیم به صورت معکوس قوانین کاهش توصیف کنیم. قوانین کاهش به صورت زیر تعریف می‌شوند:

وجه نشان‌دار را حذف می‌کنیم و عمل حذف کردن وجه‌ها در جهت ساعت‌گرد ادامه می‌یابد تا یکی از حالت‌های زیر اتفاق بیفتد:

- وجهی که شامل دومین یال محدب است حذف شود؛ در این حالت اگر وجه نشان‌دار، شامل دو یال محدب باشد، عمل کاهش، در اولین گام و تنها با حذف وجه نشان‌دار متوقف می‌شود.

- وجه حذف شده پنج‌ضلعی باشد،

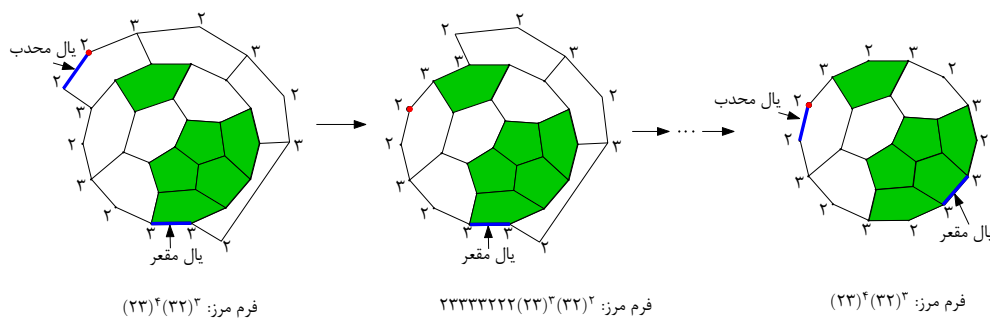
- وجه بعدی برای حذف، یال مقعری داشته باشد که دارای یک راس مشترک با آخرین وجه حذف شده باشد، یا

- با در نظر گرفتن وصله‌ی فاقد وجه‌های حذف شده، وجه بعدی که باید حذف شود قبلاً حذف شده باشد.

بعد از حذف وجه‌ها و متوقف شدن عمل کاهش، نشان در جهت پادساعت‌گرد روی اولین یالی قرار می‌گیرد که نشان در آن موقعیت، یک نشان متعارفی باشد.

لم ۳.۳.۴ [۱۳] بین همه‌ی کلاهی‌ها با مرز  $m(۳۲)^l(۲۳)$  در یک نیم‌لوله‌ی داده شده، حداقل یک کلاهی با یک پنج‌ضلعی در دو قسمت مرز بین یال‌های محدب و مقعر وجود دارد. اگر یک پنج‌ضلعی در مرز، شامل یال محدب باشد، این پنج‌ضلعی متعلق به هر دو قسمت مرز در نظر گرفته می‌شود.

اثبات. کلاهی را در نظر بگیرید که یال محدب آن روی پنج‌ضلعی نباشد و در مرز بین یال محدب تا یال مقعر، هیچ پنج‌ضلعی وجود نداشته باشد. با استفاده از قوانین کاهش، شش‌ضلعی‌های روی مرز بین یال محدب تا یال مقعر را حذف می‌کنیم. با توجه به شکل (۵.۴) همه وجه‌هایی که حذف می‌شوند، به جز آخرین وجه، دارای سه راس مشترک با لایه زیرین هستند. برای توصیف حذف، فرم یال‌های حذف شده و اضافه شده



شکل ۵.۴: حذف یک ردیف از شش ضلعی‌ها از یال محدب تا یال مقعر (محل شروع توصیف فرم مرز با نقطه‌ی پررنگ نشان داده شده است).

را بررسی می‌کنیم که منظور از فرم یال، نوشتن متوالی درجه‌ی رئوس انتهایی یال در جهت ساعت‌گرد است. بعد از حذف هر شش ضلعی، یک یال به فرم ۲۳ که روی آن شش ضلعی قرار داشته از بین می‌رود و به جای آن یک یال ۲۳ روی لایه‌ی زیرین ایجاد می‌شود که با توجه به این که وجه قبل از حذف وجه شامل یال محدب، دارای یال به فرم ۲۳ بوده، با به وجود آمدن راس درجه‌ی ۲ که بعد از حذف شش ضلعی ایجاد شده است، یک یال محدب روی آن وجه ایجاد می‌شود و تا قبل از حذف آخرین شش ضلعی که قبل از یال مقعر قرار دارد، تعداد یال‌های به فرم ۲۳ که از یال محدب قبلی تا آخرین وجه حذف شده وجود داشته و تعداد یال‌های ۲۳ از یال محدب جدید تا قبل از حذف آخرین وجه تغییر نکرده است. آخرین وجه، دارای چهار راس مشترک با لایه‌ی داخلی است که دو راس وسط از درجه ۳ هستند، پس بعد از حذف آخرین وجه، یال‌های ۲۳ و ۳۳ در جهت ساعت‌گرد ایجاد می‌شوند، پس یال مقعر قبلی از بین رفته و یک یال مقعر جدید ایجاد می‌شود و با توجه به این که با حذف اولین وجه، یک یال ۳۲ قبل از یال محدب از بین رفته و با حذف آخرین وجه یک یال ۳۲، بعد از یال مقعر ایجاد می‌شود، پس شکل مرز بدون تغییر باقی می‌ماند (شکل ۵.۴). اگر لایه‌ی جدید روی مرز بین یال محدب تا یال مقعر باز هم فقط شامل شش ضلعی‌ها بود، به همان صورتی که گفته شد می‌توانیم شش ضلعی‌ها را حذف کنیم بدون این که فرم مرز تغییر کند. بنابراین حذف شش ضلعی‌های روی مرز بین یال محدب تا یال مقعر را ادامه می‌دهیم تا زمانی که حداقل یک پنج ضلعی روی مرز بین یال محدب تا یال مقعر وجود داشته باشد یا یک پنج ضلعی روی مرز باشد که شامل یال محدب باشد. در مورد شش ضلعی‌های بین یال مقعر تا یال محدب هم به طور مشابه، می‌توانیم شش ضلعی‌ها را حذف کنیم، بدون این که فرم مرز تغییر کند.

کاهش تعریف شده، برای هر وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب، پایان‌پذیر است. چون وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب، دارای یال مقعر است و از این رو حتماً متوقف می‌شود. علاوه بر آن همه وجه‌هایی که حذف شده‌اند متعلق به مرز وصله هستند.

گزاره ۴.۳.۴ [۱۳] با انجام عمل کاهش روی وصله‌ی شبه‌محدب یا وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب، هیچ یال مقعرِ دومی ایجاد نمی‌شود.

اثبات. برای اثبات، همه‌ی حالت‌ها را برای حذف در نظر می‌گیریم:

ابتدا باید در نظر داشت که فرم مرز وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب به صورت  $m(۳۲)^l(۲۳)$  است، بنابراین اگر وصله، یال محدب نداشته باشد، یال مقعر نیز نمی‌تواند داشته باشد.

در شکل‌ها وجهی که با حذف آن، ایجاد یال مقعر مورد بررسی قرار می‌گیرد را با رنگ خاکستری نمایش می‌دهیم و رئوس مشترک مورد بحث را با دایره‌ی مشکی نمایش می‌دهیم.

منظور از وصله‌ی باقیمانده، وصله‌ای است که در آن تعدادی از وجه‌ها تا قبل از وجه مورد بررسی، حذف شده‌اند.

در همه‌ی حالت‌ها باید در نظر داشته باشیم که تعداد رئوس مشترک بین وجهی که حذف می‌شود و وصله‌ی باقیمانده در نوع مرزی که بعد از حذف این وجه ایجاد می‌شود تاثیر دارد، مثلاً اگر تعداد راس مشترک با لایه‌ی زیرین ۲ تا باشد یالی که روی لایه‌ی زیرین ایجاد می‌شود به فرم ۲۲ است و اگر بیش از دو راس مشترک داشته باشد به جز دو راس کناری که بعد از حذف از درجه‌ی ۲ می‌شود، سایر رئوس مشترک باقیمانده روی لایه‌ی زیرین بعد از حذف از درجه‌ی ۳ می‌باشند.

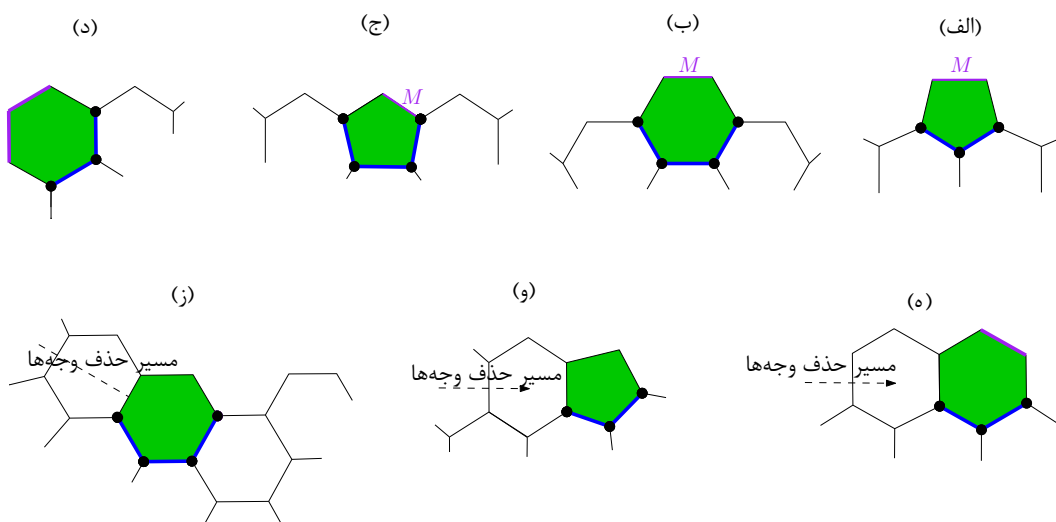
• ابتدا حذف وجه نشان‌دار را مورد بررسی قرار می‌دهیم:

۱. نشان روی یال محدب باشد:

- اگر یال محدب روی پنج‌ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (الف)) این وجه با وصله‌ی باقیمانده در سه راس مشترک است و با حذف این وجه یال مقعری ایجاد نمی‌شود.

- اگر یال محدب روی شش‌ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (ب)) این شش‌ضلعی دارای ۴ راس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است که بعد از حذف این وجه، یال مقعر ایجاد می‌شود ولی با حذف وجه بعدی، یال مقعر ایجاد شده، از بین می‌رود؛ مگر این که وجه بعد از





شکل ۶.۴: بررسی ایجاد یال مقعر بعد از استفاده از قوانین کاهش.

شش ضلعی نشان‌دار، قبل از حذف، دارای یال مقعر بوده باشد که در این صورت با حذف شش ضلعی یال مقعر قبلی از بین می‌رود.

۲. اگر وصله یال محدب نداشته باشد و نشان روی پنج ضلعی باشد (شکل ۶.۴ قسمت (ج)) در این صورت پنج ضلعی حذف می‌شود و با توجه به این که پنج ضلعی دارای ۴ رأس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است یال مقعر ایجاد می‌شود، ولی با حذف وجه بعدی این یال مقعر از بین می‌رود.

• اکنون ایجاد یال مقعر را در حالت‌های توقف بررسی می‌کنیم:

۱. وجه شامل دومین یال محدب حذف شود:

- اگر اولین وجه دارای دو یال محدب باشد (شکل ۶.۴ قسمت (د)) این وجه دارای ۳ رأس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است که بعد از حذف، یال مقعری ایجاد نمی‌کند.

- اگر دومین یال محدب، روی وجه اول نبود (شکل ۶.۴ قسمت (ه)) در این صورت چون این وجه بعد از حذف وجه قبلی دارای ۳ رأس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است، بعد از حذف این وجه، یال مقعری ایجاد نمی‌شود.

۲. اگر توقف با حذف پنج ضلعی باشد (شکل ۶.۴ قسمت (و)) در این صورت پنج ضلعی دارای ۳ رأس مشترک با وصله‌ی باقیمانده بعد از حذف وجه‌های قبلی است، بنابراین با حذف این وجه، یال مقعری ایجاد نمی‌شود.

۳. توقف به دلیل یال مقعر باشد:

- اگر وجه قبل از یال مقعر شش ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (ز)) در این صورت این وجه، دارای ۴ راس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است و در نتیجه یال مقعر ایجاد می‌شود ولی یال مقعر قبلی از بین می‌رود.

- اگر وجه قبل از یال مقعر، پنج ضلعی باشد، با توجه به این که عمل حذف به علت حذف پنج ضلعی متوقف نشده است بلکه به دلیل وجود یال مقعر، عمل حذف متوقف شده است، پس این پنج ضلعی دارای نشان است. همان طور که می‌دانیم در صورتی نشان روی پنج ضلعی قرار می‌گیرد که یال محدب نداشته باشیم که با توجه به فرم مرز وصله‌های شبه محدب و تقریباً شبه محدب، یال مقعر هم نمی‌توانیم داشته باشیم، پس این حالت غیرممکن است.

۴. اگر وجه بعدی برای حذف، قبلاً حذف شده باشد به معنای این است که یک لایه‌ی کامل حذف شده و این بدان معناست که همه‌ی وجه‌های حذف شده به جز وجه نشان‌دار شش ضلعی‌هایی هستند که یال مقعر و محدب ندارند؛ یعنی وصله، شبه محدب است.

اگر وجه نشان‌دار هم شش ضلعی باشد، یک لایه کامل از شش ضلعی‌ها حذف شده که بر اساس گزاره‌ی (۲.۲.۴) فرم مرز تغییری نمی‌کند و اگر وجه نشان‌دار، پنج ضلعی باشد، هر شش ضلعی به جز آخرین شش ضلعی دارای ۴ راس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است و در نتیجه با حذف هر شش ضلعی یک یال مقعر ایجاد می‌شود ولی با حذف شش ضلعی بعدی یال مقعر ایجاد شده، از بین می‌رود. آخرین شش ضلعی در هنگام حذف دارای ۳ راس مشترک با وصله‌ی باقیمانده است که در نتیجه بعد از حذف آخرین شش ضلعی هیچ یال مقعری ایجاد نشده است.

- حذف وجهی که اولین و آخرین وجه، در عمل کاهش نباشد، یال مقعر جدیدی را ایجاد نمی‌کند، چون اگر با حذف این وجه یال مقعر ایجاد شود بعد از حذف وجه بعدی این یال مقعر از بین می‌رود. □

گزاره ۵.۳.۴ [۱۳] با انجام عمل کاهش روی یک وصله‌ی شبه محدب یا وصله‌ی تقریباً شبه محدب، طول مرز وصله بعد از عمل کاهش، افزایش نمی‌یابد.

اثبات. برای اثبات، مشابه اثبات گزاره‌ی (۴.۳.۴) عمل می‌کنیم و همه‌ی حالت‌ها را برای عمل کاهش در نظر می‌گیریم:

• حذف وجه نشان‌دار:

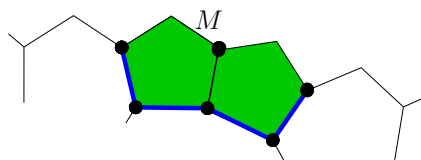
۱. نشان روی یال محدب باشد:

- اگر یال محدب روی پنج‌ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (الف)) این پنج‌ضلعی با وصله‌ی باقیمانده در ۲ یال و با وجه خارجی در ۳ یال مشترک است که با حذف این وجه طول مرز یک واحد کم می‌شود.

- اگر یال محدب روی شش‌ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (ب)) این شش‌ضلعی دارای ۳ یال مشترک با وصله‌ی باقیمانده و ۳ یال مشترک با وجه خارجی است که بعد از حذف این وجه، طول مرز تغییری نمی‌کند.

۲. اگر وصله یال محدب نداشته باشد و نشان روی پنج‌ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (ج)) در این صورت پنج‌ضلعی دارای ۳ یال مشترک با وصله‌ی باقیمانده و ۲ یال مشترک با وجه خارجی است. پس با حذف پنج‌ضلعی نشان‌دار، طول مرز یک واحد افزایش می‌یابد. با توجه به این که مرز وصله‌های شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب به فرم  $(۳۲)^m (۲۳)^l$  است، پس در این حالت وصله فاقد یال مقعر است. حال عمل حذف را ادامه می‌دهیم:

اگر وجه بعدی نیز پنج‌ضلعی باشد (شکل (۷.۴)) بعد از حذف پنج‌ضلعی نشان‌دار پنج‌ضلعی دوم دارای ۲ یال مشترک با وصله‌ی باقیمانده و ۳ یال مشترک با وجه خارجی است که در مجموع با حذف این دو پنج‌ضلعی طول مرز تغییری نمی‌کند و عمل کاهش متوقف می‌شود.



شکل ۷.۴: بررسی طول وصله بعد از استفاده از قوانین کاهش.

اگر وجه بعد از وجه نشان دار، شش ضلعی باشد، با توجه به این که در مرز وصله یال مقعر نداریم، پس عمل کاهش تا رسیدن به وجه پنج ضلعی یا حذف ردیف کامل از شش ضلعی ها ادامه می یابد. در حین عمل کاهش به هر شش ضلعی که می رسیم، آن شش ضلعی دارای ۳ یال مشترک با وصله ی باقیمانده و ۳ یال مشترک با وجه خارجی است. پس با حذف هر شش ضلعی طول مرز تغییر نمی کند. اگر در حین عمل کاهش به وجه پنج ضلعی برسیم، پنج ضلعی دارای ۳ یال همجوار با وجه خارجی و ۲ یال همجوار با وصله ی باقیمانده است که با حذف این پنج ضلعی طول مرز وصله یک واحد کاهش می یابد. با توجه به این که با حذف اولین پنج ضلعی طول مرز یک واحد افزایش یافته و حذف شش ضلعی ها تغییری در طول مرز ایجاد نکرده است، پس در مجموع طول مرز وصله تغییری نمی کند.

اگر پنج ضلعی در مرز نداشته باشیم عمل کاهش تا حذف یک ردیف کامل از وجه ها ادامه می یابد که در این صورت آخرین شش ضلعی که روی این ردیف قرار دارد، در هنگام حذف دارای دو یال مشترک با وصله ی باقیمانده و ۴ یال مشترک با وجه خارجی است. بنابراین در مجموع با انجام عمل کاهش با شروع از پنج ضلعی و حذف شش ضلعی ها طول مرز وصله یک واحد کاهش می یابد.

• حالت های توقف:

۱. وجه شامل دومین یال محدب حذف شود:

- اگر اولین وجه دارای دو یال محدب باشد (شکل (۶.۴) قسمت (د)) با حذف این وجه طول مرز ۲ واحد کاهش می یابد.

- اگر دومین یال محدب، روی وجه اول نبود (شکل (۶.۴) قسمت (ه)) بعد از حذف وجه های قبل از وجه شامل دومین یال محدب، این وجه دارای ۴ یال مشترک با وجه خارجی است. پس بعد از حذف این وجه طول مرز دو واحد کاهش می یابد.

۲. اگر توقف با حذف پنج ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (و)) در این صورت پنج ضلعی بعد از حذف وجه های قبلی دارای ۲ یال مشترک با وصله ی باقیمانده و ۳ یال مشترک با وجه خارجی است، بنابراین با حذف این وجه طول مرز کاهش می یابد.

۳. اگر توقف به دلیل یال مقعر باشد، همان طور که در اثبات گزاره ی (۴.۳.۴) گفته شد، وجه قبل

از یال مقعر باید شش ضلعی باشد (شکل (۶.۴) قسمت (ز)) در این صورت این وجه، بعد از حذف وجه‌های قبلی دارای ۳ یال مشترک با وصله‌ی باقیمانده و ۳ یال مشترک با وجه خارجی است و در نتیجه با حذف این وجه، طول مرز تغییری نمی‌کند.

۴. اگر وجه بعدی برای حذف، قبلاً حذف شده باشد به معنای این است که یک لایه‌ی کامل حذف شده و این بدان معناست که همه‌ی وجه‌های حذف شده به جز وجه نشان‌دار شش ضلعی‌هایی هستند که یال مقعر و محدب ندارند؛ یعنی وصله، شبه‌محدب است. اگر وجه نشان‌دار هم شش ضلعی باشد، یک لایه کامل از شش ضلعی‌ها حذف شده که بر اساس گزاره‌ی (۲.۲.۴) فرم مرز تغییری نمی‌کند و اگر وجه نشان‌دار، پنج ضلعی باشد، همان طور که در حالت قرار داشتن نشان روی پنج ضلعی گفته شد، طول مرز وصله یک واحد کاهش می‌یابد.

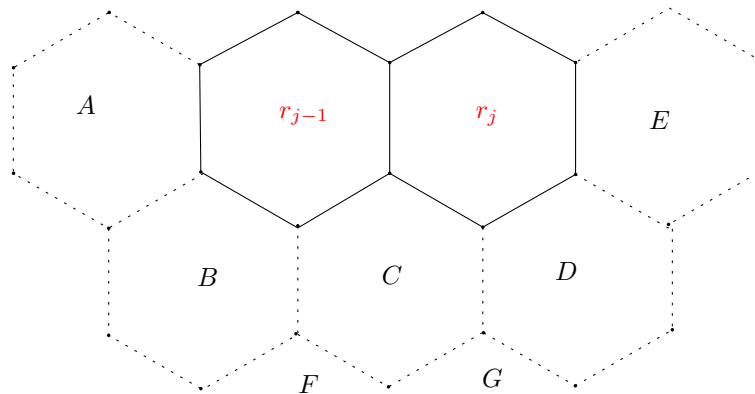
□

لم ۶.۳.۴ [۱۳] فرض کنید که  $P$  یک وصله باشد،  $R$  نیز مجموعه وجه‌هایی باشد که در طول قانون کاهش حذف شده‌اند و  $I$  مولفه‌ای از  $P \setminus R$  باشد، به طوری که وجه‌هایی در  $R$  وجود داشته باشند که همسایه  $I$  نباشند. وجه‌هایی در  $R$  که همسایه وجه‌های  $I$  باشند را با  $R_I$  نمایش می‌دهیم. در این صورت یک یال مقعر وجود دارد که روی وجهی است که متعلق به  $R_I$  یا  $I$  باشد (یعنی هر دو نقطه انتهایی یال مقعر متعلق به  $R_I$  یا  $I$  باشد).

اثبات. وجه‌های مجموعه  $R$  را با شروع از وجه نشان‌دار و در جهتی که وجه‌ها حذف می‌شوند به صورت  $r_1, \dots, r_n$  شماره‌گذاری می‌کنیم. به دلیل قوانین کاهش، همه وجه‌های داخلی - که  $r_2, \dots, r_{n-1}$  هستند - حداقل یک ۲-راس در مرز و دو همسایه نیز در  $R$  دارند؛ چون اگر وجهی در مرز ۲-راس نداشته باشد شامل یال مقعر خواهد بود و عملیات حذف قبل از آن وجه متوقف می‌شود. بنابراین هر وجه داخلی حداکثر دو همسایه در خارج از مجموعه  $R$  دارد.

از همبند بودن  $P$  نتیجه می‌گیریم که  $R_I$  ناتهی است. بنابراین وجه  $r_j \notin R_I$  با برچسب کمینه  $z$  را انتخاب می‌کنیم به طوری که  $r_{j+1}$  یا  $r_{j-1}$  یک عضو از  $R_I$  باشد.

تنها حالتی که  $r_{j-1} \in R_I$  و  $r_j \notin R_I$  باشد را مورد بحث قرار می‌دهیم. حالت  $r_{j+1} \in R_I$  و  $r_j \notin R_I$  می‌تواند به روش مشابه بررسی شود. علاوه بر این فرض می‌کنیم که همه وجه‌ها شش ضلعی باشند. در حالت‌هایی



شکل ۸.۴: وصله  $P$  که در آن  $r_{j-1} \in R_I$  و  $r_j \notin R_I$  است.

که وجه پنج‌ضلعی هم وجود داشته باشد اثبات به روش مشابه انجام می‌شود. چگونگی اشغال موقعیت‌های مختلف نشان داده شده در شکل (۸.۴) را مورد بررسی قرار می‌دهیم. وجه‌هایی که در موقعیت‌های اشغال شده قرار گرفته‌اند را با نام همان موقعیت، نام‌گذاری می‌کنیم. از آن جایی که  $r_j$  همسایه  $I$  نیست، اگر وجه‌هایی در موقعیت‌های  $C, D$  و یا  $E$  قرار گرفته باشد داریم  $C, D, E \notin I$  و چون  $r_{j-1} \in R_I$  حداقل یکی از موقعیت‌های  $A$  یا  $B$  باید حاوی وجهی باشد که عضو مجموعه  $I$  باشد. اگر وجهی در موقعیت  $A$  قرار داشته باشد، آن وجه باید در مجموعه  $R$  باشد تا وجه  $r_{j-1}$  که در جهت ساعت‌گرد، بعد از وجه  $A$  قرار دارد بتواند حذف شود، بنابراین در هر صورت باید وجه  $B$  وجود داشته باشد و عضو مجموعه  $I$  باشد.

اگر موقعیت  $C$  خالی باشد، یک یال مقعر روی وجه  $r_{j-1}$  وجود دارد و لم اثبات می‌شود. بنابراین فرض می‌کنیم که  $C \in P \setminus I$  که با توجه به این که  $B \in I$  همسایه  $C$  است، داریم  $C \in R_I$ . توجه کنید که به دلیل قوانین کاهش  $C$  نمی‌تواند در مجموعه  $R$  بلافاصله قبل از  $r_{j-1}$  یا بلافاصله بعد از  $r_j$  قرار بگیرد. چون اگر موقعیت  $A$  اشغال شده باشد،  $r_{j-1}$  در جهت ساعت‌گرد، بعد از  $A$  قرار دارد و در صورتی که موقعیت  $A$  خالی باشد،  $r_{j-1}$  در جهت ساعت‌گرد، بعد از  $B$  قرار دارد. چون  $B \in I$  است باید وجه دیگری غیر از  $B$  در مجموعه  $R$  قبل از  $r_{j-1}$  قرار بگیرد. در مورد  $r_j$  هم اگر موقعیت‌های  $E$  و یا  $D$  اشغال شده باشند، بعد از وجه  $r_j$ ، وجه  $E$  و در صورت عدم وجود وجه  $E$ ، وجه  $D$  در مجموعه  $R$  قرار می‌گیرد و اگر موقعیت‌های  $D$  و  $E$  هر دو خالی باشند و به جز وجه  $C$  وجه دیگری همسایه  $r_j$  نباشد، وجه دارای دو یال محدب است و عملیات حذف در آن جا متوقف می‌شود که خلاف فرض است.

حال چهار حالت زیر را بررسی می‌کنیم:

۱. موقعیت‌های  $F$  و  $G$  هر دو اشغال شده باشند.

در این حالت اگر موقعیت  $D$  اشغال شده باشد،  $C$  یک وجه داخلی خواهد بود؛ یعنی روی مرز قرار ندارد که  $C \in R$  را نقض می‌کند و اگر موقعیت  $D$  خالی باشد،  $C$  شامل یک یال مقعر خواهد بود و لم اثبات می‌شود.

۲. فقط موقعیت  $G$  اشغال شده باشد.

در این صورت وجه  $C$  دارای یال مقعر خواهد بود و اثبات کامل می‌شود.

۳. فقط موقعیت  $F$  اشغال شده باشد.

اگر وجه  $D$  وجود داشته باشد، یک یال مقعر روی  $C$  وجود دارد و لم اثبات می‌شود. پس فرض می‌کنیم موقعیت  $D$  خالی باشد. بنابراین  $C$  می‌تواند تنها  $F$  را به عنوان پدر یا فرزند خود داشته باشد؛ یعنی  $C$  باید اولین یا آخرین وجه در مجموعه  $R$  باشد. با توجه به این که  $C$  یال محدب ندارد و پنج ضلعی هم نیست نمی‌تواند اولین وجه در مجموعه  $R$  باشد. پس  $C$  آخرین وجه مجموعه‌ی  $R$  یعنی  $r_n$  است. بنابراین دوری شامل وجه‌های  $r_{j-1}, r_j, r_{j+1}, \dots, F, C$  یک منحنی ژوردان در  $P$  است که در میان این منحنی فضای خالی  $D$  وجود دارد که با همبند ساده بودن  $P$  تناقض دارد.

۴. هر دو موقعیت  $F$  و  $G$  خالی باشند.

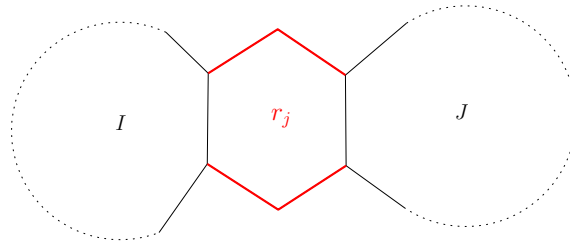
در این صورت چون تنها  $D$  می‌تواند پدر یا فرزند  $C$  باشد، پس وجه  $D$  باید وجود داشته باشد و متعلق به مجموعه‌ی  $R$  باشد. همان طور که در حالت ۳ گفته شد  $C$  نمی‌تواند  $r_n$  باشد. پس  $C$  آخرین وجه یعنی  $r_n$  است و چون بعد از  $C$  در جهت ساعت‌گرد وجه  $B$  قرار دارد، برای توقف باید یک یال مقعر در وجه  $B$  وجود داشته باشد، در نتیجه لم اثبات می‌شود.  $\square$

لم ۷.۳.۴ [۱۳] چنانچه وصله‌ای بعد از استفاده از قوانین کاهش ناهمبند شد، هیچ وجهی در ردیف حذف شده‌ی  $R$  وجود ندارد که همسایه دو مولفه متفاوت باشد.

اثبات. فرض می‌کنیم چنین وجهی که همسایه دو مولفه باشد وجود داشته باشد. بین همه وجه‌ها با این ویژگی، وجه با برجسب کمینه را پیدا می‌کنیم و آن را  $r_j$  می‌نامیم. در این جا فرض می‌کنیم  $r_j$  شش ضلعی

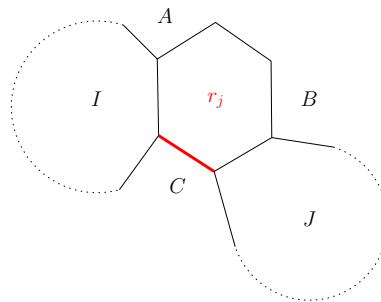
باشد. حالتی که  $r_j$  پنج ضلعی باشد به روش مشابه اثبات می‌شود.

دو مولفه را  $I$  و  $J$  می‌نامیم. دو پیکربندی متفاوت برای  $r_j$  وجود دارد که مربوط به کمترین تعداد یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه  $I$  و  $J$  است که ممکن است دو یال و یا یک یال باشد که به ترتیب در شکل‌های (۹.۴) و (۱۰.۴) نشان داده شده است. در ادامه، این دو حالت را بررسی می‌کنیم:



شکل ۹.۴: دو یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه  $I$  و  $J$  است.

در حالتی که دو یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه وجود دارد، با توجه به شکل (۹.۴) نمی‌تواند پدر یا فرزندی در مجموعه  $R$  داشته باشد. چون در صورت وجود پدر یا فرزند در مجموعه  $R$ ، وجه دارای یال مقعر خواهد بود و طبق قوانین کاهش حذف نمی‌شود. بنابراین مجموعه  $R$  باید دارای تنها عضو  $r_j$  باشد که این نیز امکان‌پذیر نمی‌باشد چون  $r_j$  یال محدب ندارد تا بتواند شروع کننده کاهش باشد.



شکل ۱۰.۴: کمترین تعداد یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه  $I$  و  $J$  یکی است.

حالت دوم را در نظر می‌گیریم که کمترین تعداد یال روی مرز  $r_j$  در ناحیه بین دو مولفه  $I$  و  $J$  یکی است. با توجه به شکل (۱۰.۴) مشخص است که  $A$ ،  $B$  و  $C$  نمی‌توانند متعلق به  $I$  یا  $J$  باشند. چون اگر یکی از  $A$  یا  $B$  عضو یکی از مولفه‌ها باشند همان طور که در حالت قبل بیان شد،  $r_j$  نمی‌تواند پدر یا فرزندی در  $R$  داشته باشد. اگر  $A$  و  $B$  هر دو عضو مولفه‌ها باشند، یال مقعر روی  $r_j$  به وجود می‌آید و  $r_j$  حذف نمی‌شود. اگر



$C$  عضویکی از مولفه‌های  $I$  یا  $J$  باشد، بعد از حذف  $r_j$  مولفه‌ها از هم جدا نمی‌شوند و وصله بعد از قوانین کاهش، همبند باقی می‌ماند.

اکنون حالت‌های زیر را برای  $r_j$  بررسی می‌کنیم:

- اگر  $j = 1$  باشد، وجه بعد از  $r_j$  که باید حذف شود در موقعیت  $B$  قرار دارد که در این صورت وجه  $r_j$  دارای یال محذب نیست و نمی‌تواند شروع کننده عملیات حذف باشد.

- اگر  $r_j$  تنها عضو  $R$  باشد یا در حالت کلی‌تر  $r_j = r_n$  باشد، در این صورت برای این که عمل حذف  $r_j$  پایان یابد لازم است که یک یال مقعر در تقاطع بین موقعیت خالی  $B$  و مولفه‌ی  $J$  وجود داشته باشد تا از ادامه عمل حذف جلوگیری شود. چون که فقط یک یال مقعر می‌تواند وجود داشته باشد، در موقعیت  $C$  باید وجهی باشد که یک عضو از  $R$  باشد که در این صورت  $C$  عضوی از  $R$  است که قبل از  $r_j$  حذف شده و دارای برجسی کمی‌تر از برجسب  $r_j$  است که فرض کمینه بودن برجسب  $r_j$  نقض می‌کند.

- اگر  $1 < j < n$  باشد به اجبار باید وجههایی در موقعیت‌های  $A$  و  $B$  وجود داشته باشد تا در مجموعه‌ی  $R$  به ترتیب قبل و بعد از  $r_j$  قرار بگیرند که در این صورت یک یال مقعر بین  $A$  و  $B$  روی وجه  $r_j$  وجود دارد که قانون کاهش مبنی بر توقف حذف قبل از یال مقعر را نقض می‌کند.  $\square$

گزاره ۸.۳.۴ [۱۳]  $\bar{\rho}_{(l+m)}$  تحت قوانین کاهش بسته است.

اثبات. همان طور که در گزاره‌ی (۴.۳.۴) گفته شد در وصله‌ی کاهش یافته، حداکثر یک یال مقعر وجود دارد و می‌دانیم که همه‌ی وجه‌ها پنج‌ضلعی و شش‌ضلعی هستند.

بر اساس گزاره‌ی (۵.۳.۴) طول مرز وصله‌ی کاهش یافته، حداکثر  $l + m$  است. در حین عمل کاهش، همه وجه‌های حذف شده روی مرز هستند و در نتیجه مولفه‌های وصله‌ی کاهش یافته، همبند ساده هستند.

حال اثبات می‌کنیم که وصله‌ی کاهش یافته همبند است:

فرض کنید که وصله‌ای مانند  $P$  بعد از حذف ردیف  $R$  ناهمبند شده است به طوری که وصله‌ی کاهش یافته حداقل دارای دو مولفه‌ی  $I$  و  $J$  است. به دلیل همبند بودن وصله‌ی  $P$  وجههایی در همسایگی  $I$  و نیز در همسایگی  $J$  وجود دارد و لم (۷.۳.۴) باعث می‌شود که وجههایی در  $R$  باشند که همسایه‌ی  $I$  نباشند و وجههایی

نیز در  $R$  همسایه‌ی  $J$  نباشند. با استفاده از لم (۶.۳.۴) برای هر یک از مولفه‌های  $I$  و  $J$ ، نتیجه می‌گیریم که هر دو مولفه‌ی  $I$  و  $J$  دارای یال مقعر هستند که طبق لم (۷.۳.۴) این دو یال مقعر از هم مجزا هستند. بنابراین در وصله‌ی کاهش یافته، حداقل دو یال مقعر داریم که با تعریف  $\bar{\rho}_{(l+m)}$  تناقض دارد، پس فرض خلف باطل است و وصله‌ی  $P$  بعد از کاهش همبند است. □

**مشاهده ۹.۳.۴ [۱۳]** برای  $l, m \in N$  داده شده که  $l + m \geq 6$  باشد، هر وصله در  $\bar{\rho}_{(l+m)}$  می‌تواند به طور بازگشتی با شروع از یک پنج‌ضلعی ساده و یا یک شش‌ضلعی ساده ساخته شود.

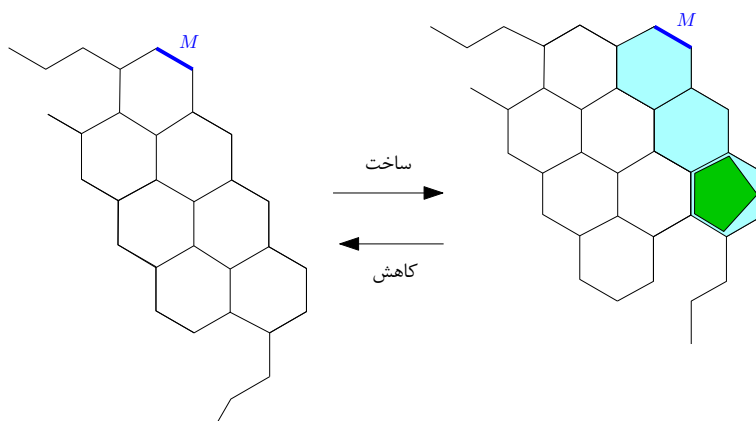
**اثبات.** با توجه به گزاره‌ی (۸.۳.۴) هر وصله در  $\bar{\rho}_{(l+m)}$  می‌تواند به عضو کوچک‌تری در  $\bar{\rho}_{(l+m)}$  با استفاده از قوانین کاهش تعریف شده، کاهش یابد که در نهایت به پنج‌ضلعی یا شش‌ضلعی می‌رسیم. □

مجموعه اعمال توسعه به صورت معکوس کاهش‌های ممکن تعریف می‌شوند. بعد از یک عمل توسعه روی وصله، نشان جدید روی اولین وجه جدید ایجاد شده قرار می‌گیرد و وصله جدید برای اعمال توسعه بعدی پذیرفته می‌شود، اگر و تنها اگر نشان در یک موقعیت متعارفی باشد. این موضوع باعث ایجاد یک عمل صحیح می‌شود؛ یعنی عمل ساختی که معکوس یک عمل کاهش روی یک وصله نشان‌دار متعارفی است.

یک قانون منحصر بفرد برای کاهش یک وصله، مجموعه‌ای از اعمال توسعه مختلف را ایجاد می‌کند؛ چون به هر روشی ممکن است وجه‌هایی را به یک وصله اضافه کنیم و تنها نکته‌ای که باید مد نظر داشته باشیم این است که وصله‌ی توسعه یافته، باید بعد از انجام عکس عمل توسعه انجام شده، به وصله‌ی قبلی تبدیل شود.

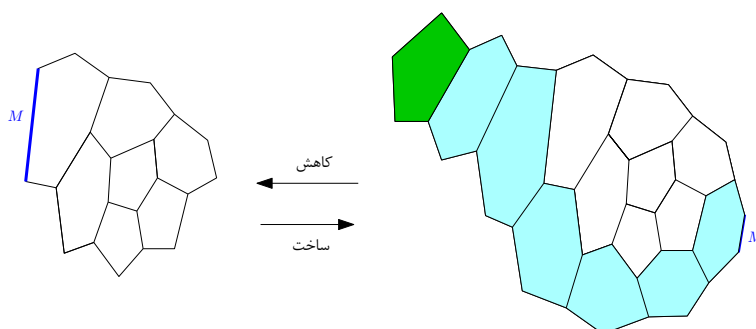
سه کلاس از اعمال مربوط به ویژگی‌های مرز وصله‌ی شروع و مرز وصله‌ی حاصل از اجرای عمل کاهش روی وصله‌ی اولیه وجود دارد: یک وصله‌ی شبه‌محدب ممکن است با اجرای یک قانون کاهش به یک وصله‌ی شبه‌محدب دیگر کاهش یابد و عمل کاهش روی یک وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب ممکن است وصله‌ی شبه‌محدب را نتیجه دهد و یا یک وصله تقریباً شبه‌محدب را تولید کند. برای به دست آوردن مجموعه‌ی کاملی از اعمال توسعه باید هر یک از کلاس‌های بیان شده، به طور مجزا در نظر گرفته شوند.

به عنوان مثال، یک نمونه عمل ساخت در شکل (۱۱.۴) نشان داده شده است که در آن یک لایه از شش‌ضلعی‌ها را روی قسمتی از مرز وصله که فاقد یال محدب و مقعر است اضافه می‌کنیم به گونه‌ای که ردیف اضافه شده در دو وجه شامل یال محدب، شروع می‌شود و پایان می‌یابد. آخرین وجه اضافه شده می‌تواند پنج‌ضلعی باشد. این توسعه را می‌توان برای توسعه وصله‌های شبه‌محدب و نیز وصله‌های تقریباً شبه‌محدب به کار برد. در این صورت وصله جدید در همان کلاس وصله قبلی باقی می‌ماند.



شکل ۱۱.۴: یک نمونه عمل ساخت که با وصله شبه‌محدب و تقریباً شبه‌محدب به کار می‌رود.

یک مثال دیگر برای عمل توسعه در شکل (۱۲.۴) نشان داده شده که فقط می‌تواند برای وصله‌های شبه‌محدبی به کار رود که دارای دقیقاً سه یال محدب باشد به گونه‌ای که دو یال محدب آن، با هم هم‌جوار باشند. از وجهی که دارای یک یال محدب است شروع می‌کنیم و شش ضلعی‌ها را اضافه می‌کنیم تا جایی که یال محدب بعدی را که هم‌جوار یک یال محدب دیگر است بیوشانند. به آخرین وجه جدید اضافه شده، به تعداد دلخواه شش ضلعی اضافه می‌کنیم. آخرین وجه اضافه شده می‌تواند پنج ضلعی باشد.



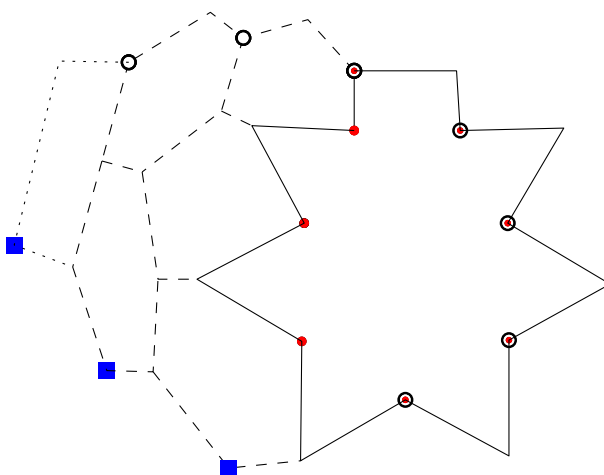
شکل ۱۲.۴: یک نمونه عمل ساخت که با وصله شبه‌محدبی که دارای دقیقاً سه یال محدب است، به کار می‌رود.

## ۴.۴ بهینه سازی الگوریتم ساخت

برای تسریع در فرایند ساخت، لازم است وصله‌هایی که منجر به تولید کلاهدک‌هایی با مرز به فرم مورد نظر در سریع‌ترین زمان نمی‌شوند را حذف کنیم. به همین منظور معیارهای گوناگونی را می‌توان تعریف کرد. در این بخش دو نمونه از این معیارها بیان می‌شود:

**معیار اول:** با توجه به این که با افزودن یک لایه از وجه‌ها، تعداد ۲-راس‌های موجود در مرز به طور یکنواخت افزایش می‌یابد، می‌توانیم معیاری را بر حسب تعداد ۲-راس‌ها در مرز که آن را  $b$  می‌نامیم بیان کنیم. یعنی به محض این که  $b > l + m$  شد عمل ساخت را متوقف می‌کنیم. یک مثال از یک معیار پیچیده‌تر به صورت زیر بیان می‌شود:

**معیار دوم:** اگر در وصله دقیقاً یک یال محدب و یک یال مقعر وجود داشته باشد، زمانی که پنج، پنج‌ضلعی در وصله وجود داشته باشد مراحل باقیمانده را می‌توان به طور منحصر به فرد تعیین کرد. در شکل (۱۳.۴) مشکی، ۳-راس‌های مرزی وصله‌ی اولیه، دایره‌های توخالی، ۳-راس‌های ایجاد شده از یال محدب جدید تا یال مقعر جدید و مربع‌ها ۲-راس‌های ایجاد شده بین یال مقعر جدید تا یال محدب جدید را نشان می‌دهند.



شکل ۱۳.۴: تولید وصله‌هایی با مرز  $(l, m)$  از وصله شامل پنج، پنج‌ضلعی که دارای یک یال محدب باشد.

$P \in \bar{\rho}(n)$  را وصله‌ای در نظر بگیرید که شامل یک یال محدب است و تعداد ۳-راس‌های روی مرز آن  $x$  تا است. فرض کنید می‌خواهیم وصله‌هایی با مرز  $(l, m)$  را تولید کنیم.

یک عملی که می‌توانیم در این حالت به کار ببریم اضافه کردن یک لایه ناقص از شش‌ضلعی‌ها است؛

یعنی لایه‌ای که شامل حداکثر  $x - 1$  شش ضلعی باشد. افزودن لایه‌ای با  $x$  شش ضلعی منجر به تولید وصله‌ی تقریباً شبه‌محدب می‌شود ولی در این جا در مورد آن بحث نمی‌شود.

لایه‌ی شش ضلعی در جایی وسط ردیف شش ضلعی‌ها اضافه می‌شود و افزودن شش ضلعی‌ها تا یال محدب ادامه می‌یابد که در نتیجه در شروع لایه‌ی جدید یک یال مقعر ایجاد می‌شود و آخرین شش ضلعی اضافه شده، شامل یک یال محدب خواهد بود. بر اساس لم (۳.۳.۴) باید در هر دو مسیر مرزی بین یال محدب و مقعر پنج ضلعی وجود داشته باشد و چون که با افزودن لایه‌های جدید فقط شش ضلعی‌ها بین یال‌های محدب و مقعر قرار می‌گیرند تنها روش برای افزودن پنج ضلعی قرار دادن آن در جایی است که مربوط به هر دو مسیر باشد که برای رسیدن به این حالت باید پنج ضلعی شامل یال محدب باشد، در نتیجه پنج ضلعی باید در آخرین لایه قرار بگیرد.

همان طور که در شکل (۱۳.۴) مشاهده می‌کنید در هر مرحله با افزودن لایه جدید، تعداد ۳-راس‌های روی مرز بین یال مقعر به وجود آمده تا یال محدب جدید در جهت ساعت‌گرد یک واحد کم می‌شود ولی در عوض تعداد ۳-راس‌ها از یال محدب جدید تا یال مقعر یک واحد افزایش می‌یابد. بنابراین در نهایت تعداد کل ۳-راس‌ها از یال محدب جدید تا یال مقعر به وجود آمده که نشان دهنده مقدار  $l$  است برابر تعداد کل ۳-راس‌های اولیه یعنی  $x$  است. پس برای ساختن یک وصله با مرز  $(l, m)$  پارامتر  $l$  باید برابر  $x$  باشد.

به علاوه بعد از افزودن تمام لایه‌ها تعداد ۲-راس‌ها از یال مقعر به وجود آمده تا یال محدب جدید که همان مقدار  $m$  در توصیف مرزی  $m(32)^l(23)$  است، برابر تعداد لایه‌های اضافه شده است. هم‌چنین در هر مرحله تعداد شش ضلعی‌هایی که می‌تواند اضافه شود یکی کم‌تر از تعداد شش ضلعی‌ها در لایه قبلی است و در نتیجه تعداد لایه‌های اضافه شده برابر تعداد شش ضلعی‌ها در اولین لایه‌ی اضافه شده است. پس در اولین لایه باید  $m$  تا شش ضلعی اضافه شود که در نتیجه  $m$  می‌تواند دارای مقدار بیشینه‌ی  $x - 1$  باشد. پس برای تولید کلاهی با پارامترهای داده شده  $(m, l)$  از وصله‌ای که شامل یک یال محدب و پنج، پنج ضلعی است، ابتدا بررسی می‌کنیم که  $l = x$  و  $m < x$  باشد و سپس به همان صورتی که در بالا توضیح داده شد لایه‌هایی از پنج ضلعی و شش ضلعی‌ها را به وصله اضافه می‌کنیم.

## ۵.۴ رد یگریختی

ممکن است زمانی که وصله‌های به دست آمده را به بدنه‌ی نیم‌لوله می‌چسبانیم، دو یا چند وصله‌ی نشان‌دار منجر به تولید نیم‌لوله‌های یگریخت گردند. برای این که به ازای هر نیم‌لوله تنها یک وصله به دست آید لازم است که مجموعه‌ای از معیارها را تعریف کنیم.

همان‌طور که در بخش (۲.۴) گفته شد، زمانی که  $m \neq 0$  است چنانچه وصله‌ای روی یکی از مسیرهای مرزی بین یال‌های محدب و مقعر، شامل پنج‌ضلعی نبود، می‌توان با حذف یک لایه از شش‌ضلعی‌های همجوار با این مسیر به یک کلاهدک با مرز مورد نظر دست یافت. پس در حالت  $m \neq 0$  وصله‌هایی که معیار داشتن حداقل یک پنج‌ضلعی در هر دو مسیر مرزی بین یال‌های محدب و مقعر دارند را وصله‌های کمینه می‌نامیم. در حالت  $m = 0$  لازم است که حداقل یک پنج‌ضلعی روی مرز باشد، پس در حالت  $m = 0$  وصله‌هایی که حداقل یک پنج‌ضلعی روی مرز دارند وصله‌های کمینه نامیده می‌شوند.

لم زیر در اثبات قضیه‌های این بخش مورد استفاده قرار می‌گیرد، از این رو ابتدا به اثبات این لم می‌پردازیم:

لم ۱.۵.۴ [۲] فرض کنید وصله‌ی  $P$  دارای  $p$  پنج‌ضلعی و  $h$  شش‌ضلعی است و  $v_i(P)$  تعداد رئوس موجود در وصله‌ی  $P$  با درجه‌ی  $i$  و  $v_{i,b}(P)$  تعداد رئوس مرزی وصله‌ی  $P$  با درجه‌ی  $i$  باشد، آنگاه داریم:

$$v_{2,b}(P) - v_{3,b}(P) = 6 - p.$$

اثبات. در وصله‌ی  $P$  تعداد راس‌ها را با  $v(P)$ ، تعداد یال‌ها را با  $e(P)$  و تعداد وجه‌ها را با  $f(P)$  نشان می‌دهیم.

اگر رئوس وجه‌ها را به طور مجزا با هم جمع کنیم، رئوس مرزی درجه‌ی ۲، یک بار، رئوس مرزی درجه‌ی ۳، دو بار و رئوس داخلی درجه‌ی ۳ هر یک سه بار محاسبه می‌شوند، پس داریم:

$$v(P) = \frac{(6h + 5p + v_{3,b}(P) + 2v_{2,b}(P))}{3} \quad (1-4)$$

حال اگر یال‌های وجه‌های داخلی را با هم جمع کنیم هر یک از یال‌های روی مرز یک بار و یال‌های داخلی هر یک دو بار به حساب می‌آیند، در نتیجه

$$e(P) = \frac{(6h + 5p + v_{3,b}(P) + v_{2,b}(P))}{2} \quad (2-4)$$

و می‌دانیم که

$$f(P) = p + h \quad (۳-۴)$$

طبق فرمول اوایلر

$$v(P) - e(P) + f(P) + ۱ = ۲$$

با قرار دادن عبارت‌های (۱-۴)، (۲-۴) و (۳-۴) در فرمول اوایلر داریم:

$$v_{۲,b}(P) - v_{۳,b}(P) = ۶ - p.$$

□

نتیجه ۲.۵.۴ [۲] اگر در وصله‌ای همه‌ی وجه‌ها شش‌ضلعی باشند، آن‌گاه دقیقاً شش یال محدب در وصله وجود دارد.

اثبات. با توجه به لم (۱.۵.۴) داریم  $v_{۲,b}(P) = ۶ + v_{۳,b}(P) - p$  و چون  $p = ۰$  است، در نتیجه  $v_{۲,b}(P) = ۶ + v_{۳,b}(P)$ .

از این رو تعداد ۲-راس‌ها در مرز شش تا بیش‌تر از تعداد ۳-راس‌های مرزی است. بنابراین مرز دارای شش جفت ۲-راس است، یعنی شش تا یال محدب روی مرز وجود دارد.

□ در قضیه‌ی بعد رابطه‌ی بین وصله‌های کمینه‌ی  $m = ۰$  که باعث تولید نیم‌لوله‌های یکرخت می‌شوند بیان شده است:

قضیه ۳.۵.۴ [۱۳] وقتی  $m = ۰$  است، دو یا چند کلاهِک نشان‌دار کمینه می‌توانند منجر به نیم‌لوله‌های یکرخت شوند، اگر و تنها اگر این کلاهِک‌ها با وصله‌های بدون نشان یکرخت باشند.

اثبات. به دلیل این که هر کلاهِک متعارفی در حالت  $m = ۰$  دارای مسیر زیگزاگ است و باید حداقل یک پنج‌ضلعی در مرزش داشته باشد، هیچ دو کلاهِکی نمی‌توانند کاملاً توسط یکدیگر در بر گرفته شوند. اگر مرزهای  $a$  و  $b$  از دو وصله‌ی نشان‌دار کمینه‌ی  $A$  و  $B$  متقاطع باشند، بر اساس قضیه خم‌ژوردان باید حداقل دو بار یکدیگر را قطع کنند. قسمتی از مرز  $B$  که خارج از وصله‌ی  $A$  است و در همجواری ناحیه نامتناهی است را  $b_۱$  می‌نامیم. وصله‌ی مرزی  $b_۱$  دارای دو نقطه‌ی انتهایی است که مرز  $A$  را به دو وصله‌ی مرزی  $a_۱$

و  $a_2$  تقسیم می‌کند. خم‌های  $b_1 \cup a_1$  و  $b_2 \cup a_2$  هر دو، خم ژوردان هستند و ناحیه داخلی یکی از آن‌ها مجزا از ناحیه داخلی  $A$  است. این ناحیه را  $C$  می‌نامیم که تنها شامل وجه‌های شش‌ضلعی است. با توجه به نتیجه‌ی (۲.۵.۴) ناحیه‌ی  $C$  شامل شش یال محدب است. هریک از دو تقاطع  $a$  و  $b$  می‌تواند حداکثر دو یال محدب را روی مرز  $C$  ایجاد کند. ولی یال محدب دیگری نمی‌تواند روی مرز  $C$  قرار داشته باشد. بنابراین ناحیه‌ی  $C$  نمی‌تواند وجود داشته باشد و یکریمت بودن کلاهی‌ها در حالت  $m = 0$  تنها زمانی اتفاق می‌افتد که کلاهی‌های نشان‌دار با وصله‌های غیر نشان‌دار یکریمت باشند.  $\square$

قضیه ۴.۵.۴ [۱۳] برای حالت  $m = 0$  یک بررسی متعارفی با پیچیدگی  $O(v)$  وجود دارد که  $v$  تعداد راس‌ها در کلاهی است.

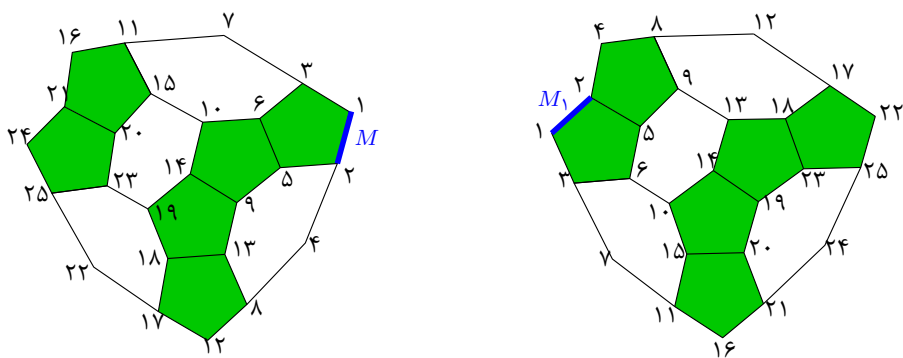
اثبات. در این جا نماینده نشان‌دار متعارفی را به روش زیر انتخاب می‌کنیم:

در وصله‌ی داده شده، ۲-راس روی یال نشان‌دار را با عدد ۱ برچسب‌گذاری می‌کنیم. سپس رئوس همجوار این راس در جهت ساعت‌گرد را با عددهای ۲ و ۳ برچسب‌گذاری می‌کنیم به طوری که یال جهت‌دار (۲، ۱) پنج‌ضلعی نشان‌دار را در سمت راست خودش داشته باشد. به همین ترتیب همه‌ی رئوس پیرامون راس نشان‌دار  $i$  را برچسب‌گذاری می‌کنیم و به راس  $i + 1$  می‌رویم و از همسایه‌ی  $i + 1$  با کوچک‌ترین برچسب شروع می‌کنیم و همه همسایه‌های راس  $i + 1$  را در جهت ساعت‌گرد بررسی می‌کنیم. راس همسایه‌ای که بدون برچسب باشد را با اولین عدد استفاده نشده‌ی بعدی، برچسب‌گذاری می‌کنیم و این فرایند را ادامه می‌دهیم تا همه رئوس برچسب‌گذاری شوند.

بعد از برچسب‌گذاری همه‌ی رئوس، با الحاق لیست همسایه‌هصفرای هر راس که هر لیست را با عدد از لیست بعدی جدا می‌کنیم، کد مربوط به نشان را ایجاد می‌کنیم. (به عنوان مثال به شکل (۴.۱۴) توجه کنید.) به این ترتیب برای هر نشانی یک کد ایجاد می‌کنیم و همه نشان‌های ممکن برای تصویر آینه‌ای وصله را نیز کدگذاری می‌کنیم. همه کدها را با هم مقایسه می‌کنیم و در نهایت وصله‌ی نشان‌داری پذیرفته می‌شود که دارای کدی با ترتیب لغت‌نامه‌ای کمینه در بین همه کدهای دیگر باشد.

برچسب‌گذاری به روش بالا در زمان خطی انجام می‌شود و چون حداکثر شش، پنج‌ضلعی می‌تواند در مرز وجود داشته باشد، پیچیدگی نهایی  $O(v)$  است.  $\square$





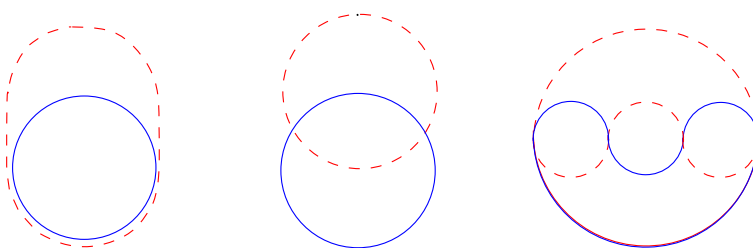
کد مربوط به مارک  $M$ :  $2, 3, 0, 4, 5, 1, 0, 1, 6, 7, 0, 8, 2, 0, 2, 9, 6, 0, 5, 10, 3, 0, 3, 11, 0, 12, 13, 4, 0, \dots$

کد مربوط به مارک  $M_1$ :  $2, 3, 0, 4, 5, 1, 0, 1, 6, 7, 0, 8, 2, 0, 2, 9, 6, 0, 5, 10, 3, 0, 3, 11, 0, 12, 9, 4, 0, \dots$

شکل ۱۴.۴: کدگذاری وصله‌ی نشان‌دار (وصله‌ای که با  $M_1$  نشان‌دار شده پذیرفته می‌شود).

قضیه ۵.۵.۴ [۱۳] در حالت  $m \neq 0$  یک بررسی متعارفی با پیچیدگی  $O(l^2 + v)$  وجود دارد که  $v$  تعداد راس‌ها در کلاهک نوع  $(l, m)$  است.

اثبات. همان‌طور که گفته شد در حالت  $m \neq 0$  وصله‌هایی که حداقل یک پنج‌ضلعی در هر دو مسیر مرزی بین یال‌های محدب و مقعر دارند را وصله‌های کمینه می‌نامیم. در حالت  $m \neq 0$  دو وصله در صورتی می‌توانند یکرخت باشند که از نیم‌لوله‌ی یکسانی جدا شده باشند. در بررسی متعارفی بودن به دنبال وصله‌ی کمینه‌ای هستیم که همه‌ی وصله‌های کمینه‌ی دیگر را در بر دارد. مسیرهای مرزی به فرم  $(23)^l(32)^m$  که چنین وصله‌های کمینه‌ای را در بر داشته باشند ممکن است در یکی از سه حالت نشان داده شده در شکل (۱۵.۴) یکدیگر را قطع کنند.



شکل ۱۵.۴: حالت‌هایی که دو مسیر به فرم  $(23)^l(32)^m$  ممکن است یکدیگر را قطع کنند.

چون وصله‌های کمینه در هر قسمت از مرز نشان بین یال محدب و مقعر حداقل یک پنج‌ضلعی دارند، می‌توان با شروع از هر یال پنج‌ضلعی در دور مرزی، همه‌ی وصله‌های یکرخت را به دست آورد. یک معیار دیگر برای این که یک وصله، متعارفی باشد این است که وصله در بین همه کلاهک‌های ممکن، دارای کوتاه‌ترین فاصله

بین یال محدب و یک پنج‌ضلعی موجود در فاصله‌ی  $m$  روی مرز بین یال مقعر تا یال محدب باشد. یعنی اگر از پنج‌ضلعی موجود در مسیر مرزی بین یال مقعر تا محدب شروع کنیم باید فاصله‌ی این پنج‌ضلعی تا یال محدب، بیشینه باشد. بنابراین تعداد بیشینه‌ی مسیر جستجو برابر  $m \times n_s$  است که  $n_s$  تعداد یال‌های شروع مسیر جستجو است که حداکثر  $30^\circ$  تا - تعداد یال‌های پنج‌ضلعی‌ها - است. چون هر مسیر دارای طول بیشینه‌ی  $m + l$  است، پیچیدگی برابر  $m \times (l + m)$  است که با توجه به این که  $l \geq m$  است با  $O(l^2)$  کران دار می‌شود.

چنانچه بعد از این مرحله باز هم چند وصله‌ی کمینه، باقی مانده باشد برای هر وصله‌ی نشان‌دار به روشی که در اثبات قضیه‌ی (۴.۵.۴) بیان شد یک کد اختصاص می‌دهیم و وصله‌ی نشان‌داری که کد آن دارای ترتیب لغت‌نامه‌ای کمینه است پذیرفته می‌شود. در حالت  $m = l$  برای تصویر آینه‌ای هم باید کدگذاری انجام شود. با محاسبه‌ی کد هر وصله، کد را راس به راس با کدی که دارای ترتیب لغت‌نامه‌ای کوچک‌تر است مقایسه می‌کنیم. همان‌طور که می‌دانیم محاسبه‌ی کد برای وصله در زمان خطی در تعداد رئوس آن وصله انجام می‌شود. بنابراین باید در هر حالت حداکثر  $v$  راس مورد بررسی قرار گیرند و در نتیجه پیچیدگی محاسبه و بررسی کدها برای وصله‌های یکرخت در زمان  $O(v)$  انجام می‌شود. در حالت  $m = l$  برای تصویرهای آینه‌ای نیز در همین زمان، محاسبه و بررسی را انجام می‌دهیم که در نتیجه پیچیدگی در این مرحله همان مقدار  $O(v)$  است. بنابراین کران بالا برای پیچیدگی کل  $O(l^2 + v)$  است.  $\square$

این فرایند را می‌توان برای وصله‌هایی که در آن‌ها  $m \neq 0$  را با استفاده از قضیه زیر بهینه‌سازی کرد:

قضیه ۶.۵.۴ [۱۳] یک وصله‌ی کمینه با یک یال پنج‌ضلعی به عنوان یال محدب، وصله‌ی کمینه‌ی منحصر به فرد است.

اثبات. با توجه به قضیه (۳.۵.۴) واضح است که اگر دو وصله‌ی  $A$  و  $B$  متقاطع باشند، ناحیه  $C$  وجود دارد که با یک بخش مرزی از  $A$  و یک بخش مرزی از  $B$  کراندار شده است و ناحیه  $C$  فقط شامل وجه‌های شش‌ضلعی است. بر اساس نتیجه‌ی (۲.۵.۴) ناحیه‌ی  $C$  باید حداقل دارای شش یال محدب باشد.

توجه کنید که در صورتی که یال مقعر وصله‌ی  $A$  همسایه وصله‌ی  $C$  باشد، یک یال محدب روی مرز وصله  $C$  وجود خواهد داشت. هم‌چنین هر یک از دو تقاطع  $a$  و  $b$  می‌توانند حداکثر دو یال محدب را روی مرز  $C$  ایجاد کنند که این یال‌ها قبلاً به عنوان یال مقعر یا محدب روی  $a$  و  $b$  نبوده‌اند. بنابراین وصله‌ی  $C$  باید حداقل دارای یک یال محدب دیگر باشد که آن یال هم یال محدب وصله‌ی  $B$  است. هم‌چنین اگر یال‌های محدب

وصله‌های  $A$  و  $B$  یال‌های پنج‌ضلعی هم باشند پس یال محدب  $B$  در ناحیه‌ی  $A \cap B$  است و نمی‌تواند در مرز  $C$  باشد. این یک تناقض ایجاد می‌کند، پس ناحیه  $C$  نمی‌تواند وجود داشته باشد، بنابراین فقط یک وصله‌ی کمینه با یک یال پنج‌ضلعی به عنوان یال محدب وجود دارد.  $\square$

## ۶.۴ نتایج

الگوریتمی که در این فصل بیان شد قادر به ساخت نیم‌لوله‌های با طول مرزی کاملاً بزرگ است. در جدول‌های (ب-۱) تا (ب-۶) در پیوست (ب) مثال‌هایی مربوط به نانولوله‌های  $m = 0$  و  $m = l$  که در شیمی مورد توجه هستند، آورده شده است. جدول‌ها از مرجع [۱۳] هستند.

زمان محاسبه روی ماشین لینوکس با پنتیوم II و پردازشگر  $35^\circ$  مگا هرتز به دست آمده است [۱۳].



پیوست آ

تعداد راس‌ها	فولرن‌ها (s) (باکی‌ژن)	فولجن (s)/ باکی‌ژن (s)	فولرن‌های IPR (s) (باکی‌ژن)	IPR(s) (فولجن)/ IPR(s) (باکی‌ژن)
۱۰۰	۴۲۳۵۸	۷/۳۰	۱۰۵	۰/۲۸
۱۴۰	۳۳۳۶۹	۷/۳۹	۷۸۹	۰/۴۶
۱۷۰	۲۱۲۶۸	۵/۶۳	۱۱۷۴	۰/۵۸
۲۰۰	۱۶۹۵۳	۵/۴۹	۱۶۳۰	۰/۸۰
۲۳۰	۱۲۵۹۷	۵/۱۳	۱۷۲۱	۰/۹۶
۲۶۰	۹۴۰۸	۴/۵۹	۱۶۳۲	۱/۰۳
۲۸۰	۷۷۳۵	۴/۴۳	۱۵۳۰	۱/۱۰
۳۰۰	۶۴۹۴	۴/۰۷	۱۴۲۵	۱/۱۶
۳۲۰	۵۵۰۲	۳/۶۷	۱۳۳۲	۱/۱۴
۲۰ – ۱۰۰	۱۵۹۳۶۵	۲۴/۹۶	۲۷۸	۰/۷۷
۱۰۲ – ۱۵۰	۱۵۷۷۳۶	۳۳/۰۴	۴۶۴۳	۲/۴۴
۱۵۲ – ۲۰۰	۱۱۵۶۲۵	۳۲/۰۸	۱۰۵۵۸	۴/۷۱
۲۰۲ – ۲۵۰	۸۲۸۱۳	۳۲/۰۹	۱۳۲۱۲	۶/۸۴

جدول آ-۱: نسبت‌های تولید برای فولرن‌ها.

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۳	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۴	۴	۱	۰	۰	۰
۶	۵	۱	۰	۰	۰
۸	۶	۱	۱	۰	۰
۱۰	۷	۴	۱	۰	۰
۱۲	۸	۸	۲	۰	۰
۱۴	۹	۱۱	۴	۰	۰
۱۶	۱۰	۲۳	۷	۰	۰
۱۸	۱۱	۳۴	۱۰	۰	۰
۲۰	۱۲	۵۴	۲۲	۱	۰
۲۲	۱۳	۸۳	۳۲	۰	۰
۲۴	۱۴	۱۲۵	۵۸	۱	۰
۲۶	۱۵	۱۷۴	۹۲	۱	۰
۲۸	۱۶	۲۶۷	۱۵۱	۲	۰
۳۰	۱۷	۳۶۵	۲۲۷	۳	۰
۳۲	۱۸	۵۰۹	۳۶۸	۶	۰
۳۴	۱۹	۷۰۶	۵۳۰	۶	۰
۳۶	۲۰	۹۶۳	۸۰۵	۱۵	۰
۳۸	۲۱	۱۲۷۰	۱۱۵۸	۱۷	۰
۴۰	۲۲	۱۷۰۸	۱۶۹۵	۴۰	۰
۴۲	۲۳	۲۲۰۴	۲۳۷۳	۴۵	۰
۴۴	۲۴	۲۸۷۶	۳۳۵۴	۸۹	۰
۴۶	۲۵	۳۶۹۵	۴۵۹۵	۱۱۶	۰
۴۸	۲۶	۴۷۰۸	۶۳۴۰	۱۹۹	۰
۵۰	۲۷	۵۹۲۵	۸۴۸۰	۲۷۱	۰
۵۲	۲۸	۷۴۹۱	۱۱۴۱۷	۴۳۷	۰
۵۴	۲۹	۹۲۵۵	۱۵۰۴۹	۵۸۰	۰

جدول آ-۲: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم با توجه به حداقل اندازه‌ی وجه، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است.

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۳	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	$IPR$ های فولرن
۵۶	۳۰	۱۱۴۶۳	۱۹۸۳۲	۹۲۴	۰
۵۸	۳۱	۱۴۰۸۳	۲۵۷۱۹	۱۲۰۵	۰
۶۰	۳۲	۱۷۲۲۳	۳۳۲۵۸	۱۸۱۲	۱
۶۲	۳۳	۲۰۸۵۷	۴۲۴۸۲	۲۳۸۵	۰
۶۴	۳۴	۲۵۳۰۴	۵۴۱۸۴	۳۴۶۵	۰
۶۶	۳۵	۳۰۲۷۳	۶۸۲۷۱	۴۴۷۸	۰
۶۸	۳۶	۳۶۳۴۷	۸۵۶۶۴	۶۳۳۲	۰
۷۰	۳۷	۴۳۲۲۵	۱۰۶۸۱۷	۸۱۴۹	۱
۷۲	۳۸	۵۱۲۲۹	۱۳۲۵۳۵	۱۱۱۹۰	۱
۷۴	۳۹	۶۰۴۲۶	۱۶۳۱۹۴	۱۴۲۴۶	۱
۷۶	۴۰	۷۱۳۲۶	۲۰۰۲۵۱	۱۹۱۵۱	۲
۷۸	۴۱	۸۳۱۸۲	۲۴۴۳۸۷	۲۴۱۰۹	۵
۸۰	۴۲	۹۷۴۲۶	۲۹۶۶۴۸	۳۱۹۲۴	۷
۸۲	۴۳	۱۱۳۲۳۹	۳۵۸۸۶۰	۳۹۷۱۸	۹
۸۴	۴۴	۱۳۱۴۲۵	۴۳۱۵۷۸	۵۱۵۹۲	۲۴
۸۶	۴۵	۱۵۱۸۲۶	۵۱۷۵۳۳	۶۳۷۶۱	۱۹
۸۸	۴۶	۱۷۵۳۰۲	۶۱۷۸۳۲	۸۱۷۳۸	۳۵
۹۰	۴۷	۲۰۰۸۲۹	۷۳۵۲۵۷	۹۹۹۱۸	۴۶
۹۲	۴۸	۲۳۱۰۴۲	۸۷۰۰۶۰	۱۲۶۴۰۹	۸۶
۹۴	۴۹	۲۶۳۵۵۳	۱۰۲۹۱۱۴	۱۵۳۴۹۳	۱۳۴
۹۶	۵۰	۳۰۰۶۰۲	۱۲۰۹۷۸۳	۱۹۱۸۳۹	۱۸۷
۹۸	۵۱	۳۴۱۹۶۰	۱۴۲۰۴۷۲	۲۳۱۰۱۷	۲۵۹
۱۰۰	۵۲	۳۸۸۶۷۳	۱۶۵۹۴۷۳	۲۸۵۹۱۴	۴۵۰
۱۰۲	۵۳	۴۳۸۷۹۵	۱۹۳۷۵۰۹	۳۴۱۶۵۸	۶۱۶
۱۰۴	۵۴	۴۹۶۹۶۱	۲۲۴۹۲۸۵	۴۱۹۰۱۳	۸۲۳
۱۰۶	۵۵	۵۵۹۳۴۸	۲۶۱۲۴۱۰	۴۹۷۵۲۹	۱۲۳۳
۱۰۸	۵۶	۶۲۹۸۰۷	۳۰۱۵۳۸۶	۶۰۴۲۱۷	۱۷۹۹

جدول آ-۳: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم با توجه به حداقل اندازه‌ی وجه، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه جدول (آ-۲)).



$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۳	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۱۱۰	۵۷	۷۰۶۹۳۰	۳۴۸۳۲۸۹	۷۱۳۳۱۹	۲۳۵۵
۱۱۲	۵۸	۷۹۲۷۰۳	۴۰۰۲۵۰۴	۸۶۰۱۶۱	۳۳۴۲
۱۱۴	۵۹	۸۸۵۱۳۷	۴۶۰۰۳۴۳	۱۰۰۸۴۴۴	۴۴۶۸
۱۱۶	۶۰	۹۹۰۹۲۹	۵۲۵۷۸۵۶	۱۲۰۷۱۱۹	۶۰۶۳
۱۱۸	۶۱	۱۱۰۲۶۰۹	۶۰۱۹۵۸۰	۱۴۰۸۵۵۳	۸۱۴۸
۱۲۰	۶۲	۱۲۲۷۰۴۳	۶۸۴۹۳۸۵	۱۶۷۴۱۷۱	۱۰۷۷۴
۱۲۲	۶۳	۱۳۶۳۸۲۵	۷۸۰۵۸۱۳	۱۹۴۲۹۲۹	۱۳۹۷۷
۱۲۴	۶۴	۱۵۱۳۶۱۲	۸۸۴۶۵۷۰	۲۲۹۵۷۲۱	۱۸۷۶۹
۱۲۶	۶۵	۱۶۷۳۵۶۸	۱۰۰۴۱۸۷۵	۲۶۵۰۸۶۶	۲۳۵۸۹
۱۲۸	۶۶	۱۸۵۳۹۲۸	۱۱۳۳۵۲۸۸	۳۱۱۴۲۳۶	۳۰۶۸۳
۱۳۰	۶۷	۲۰۴۵۱۵۴	۱۲۸۲۱۵۹۷	۳۵۸۰۶۳۷	۳۹۳۹۳
۱۳۲	۶۸	۲۲۵۵۹۷۲	۱۴۴۱۵۲۴۱	۴۱۸۲۰۷۱	۴۹۸۷۸
۱۳۴	۶۹	۲۴۸۵۳۶۳	۱۶۲۴۸۵۸۶	۴۷۸۷۷۱۵	۶۲۳۷۲
۱۳۶	۷۰	۲۷۳۲۱۰۶	۱۸۲۱۱۳۷۱	۵۵۶۶۹۴۹	۷۹۳۶۲
۱۳۸	۷۱	۲۹۹۸۸۵۰	۲۰۴۵۴۱۱۴	۶۳۴۴۶۹۸	۹۸۵۴۱
۱۴۰	۷۲	۳۲۹۵۰۹۰	۲۲۸۴۵۳۸۷	۷۳۴۱۲۰۴	۱۲۱۳۵۴
۱۴۲	۷۳	۳۶۰۶۱۰۲	۲۵۵۸۷۴۶۹	۸۳۳۹۰۳۳	۱۵۱۲۰۱
۱۴۴	۷۴	۳۹۴۴۹۲۳	۲۸۴۸۶۹۸۵	۹۶۰۴۴۱۱	۱۸۶۶۱۱
۱۴۶	۷۵	۴۳۱۶۹۹۹	۳۱۸۰۸۷۷۶	۱۰۸۶۷۶۳۱	۲۲۵۲۴۵
۱۴۸	۷۶	۴۷۱۱۰۳۸	۳۵۳۱۳۰۲۶	۱۲۴۶۹۰۹۲	۲۷۷۹۳۰
۱۵۰	۷۷	۵۱۳۵۷۹۴	۳۹۳۱۵۲۵۸	۱۴۰۵۹۱۷۴	۳۳۵۵۶۹
۱۵۲	۷۸	۵۵۹۹۰۶۵	۴۳۵۲۹۲۹۵	۱۶۰۶۶۰۲۵	۴۰۴۶۶۷
۱۵۴	۷۹	۶۰۹۱۴۳۴	۴۸۳۳۹۵۰۵	۱۸۰۶۰۹۷۹	۴۸۹۶۴۶
۱۵۶	۸۰	۶۶۲۱۰۱۳	۵۳۳۶۱۹۷۹	۲۰۵۵۸۷۶۷	۵۸۶۲۶۴
۱۵۸	۸۱	۷۱۹۸۹۲۶	۵۹۱۱۷۶۹۳	۲۳۰۳۷۵۹۴	۶۹۷۷۲۰
۱۶۰	۸۲	۷۸۰۰۹۶۰	۶۵۱۱۰۲۰۸	۲۶۱۴۲۸۳۹	۸۳۶۴۹۷

جدول آ-۴: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم با توجه به حداقل اندازه‌ی وجه، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه جدول (آ-۳)).

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۳	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	$IPR$ های فولرن‌ها
۱۶۲	۸۳	۸۴۶۰۷۷۶	۷۱۹۳۸۱۷۰	۲۹۲۰۲۵۴۳	۹۸۹۴۹۵
۱۶۴	۸۴	۹۱۶۸۳۳۳	۷۹۰۴۱۷۳۳	۳۳۰۲۲۵۷۳	۱۱۷۰۱۵۷
۱۶۶	۸۵	۹۹۱۷۷۷۲	۸۷۱۴۷۸۱۵	۳۶۷۹۸۴۳۳	۱۳۸۲۹۵۳
۱۶۸	۸۶	۱۰۷۱۱۶۰۳	۹۵۵۱۷۶۳۱	۴۱۴۷۸۳۴۴	۱۶۲۸۰۲۹
۱۷۰	۸۷	۱۱۵۹۰۶۸۰	۱۰۵۰۹۰۷۵۲	۴۶۰۸۸۱۵۷	۱۹۰۲۲۶۵
۱۷۲	۸۸	۱۲۴۹۱۷۳۴	۱۱۴۹۳۶۸۰۷	۵۱۸۰۹۰۳۱	۲۲۳۴۱۳۳
۱۷۴	۸۹	۱۳۴۷۹۰۰۳	۱۲۶۱۶۹۸۰۸	۵۷۴۱۷۲۶۴	۲۶۰۱۸۶۸
۱۷۶	۹۰	۱۴۵۱۸۸۸۲	۱۳۷۷۳۲۵۴۸	۶۴۳۵۳۲۶۹	۳۰۲۴۳۸۳

جدول آ-۵: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم با توجه به حداقل اندازه‌ی وجه، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه جدول (آ-۴)).

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۱۷۸	۹۱	۱۵۰۸۹۵۷۶۸	۷۱۱۶۳۴۵۲	۳۵۱۶۳۶۵
۱۸۰	۹۲	۱۶۴۳۴۳۸۴۰	۷۹۵۳۸۷۵۱	۴۰۷۱۸۳۲
۱۸۲	۹۳	۱۷۹۷۵۲۰۲۴	۸۷۷۳۸۳۱۱	۴۶۹۰۸۸۰
۱۸۴	۹۴	۱۹۵۴۲۰۷۶۰	۹۷۸۴۱۱۸۳	۵۴۲۴۷۷۷
۱۸۶	۹۵	۲۱۳۲۸۷۲۶۹	۱۰۷۶۷۹۷۱۷	۶۲۲۹۵۵۰
۱۸۸	۹۶	۲۳۱۴۸۹۶۱۴	۱۱۹۷۶۱۰۷۵	۷۱۴۴۰۹۱
۱۹۰	۹۷	۲۵۲۲۳۳۸۶۹	۱۳۱۵۶۱۷۴۴	۸۱۸۷۵۸۱
۱۹۲	۹۸	۲۷۳۲۲۶۰۶۹	۱۴۵۹۷۶۶۷۴	۹۳۶۴۹۷۵
۱۹۴	۹۹	۲۹۷۲۶۴۷۹۲	۱۵۹۹۹۹۴۶۲	۱۰۶۵۹۸۶۳
۱۹۶	۱۰۰	۳۲۱۴۵۰۵۵۴	۱۷۷۱۷۵۶۸۷	۱۲۱۶۳۲۹۸
۱۹۸	۱۰۱	۳۴۹۰۹۸۶۷۲	۱۹۳۸۱۴۶۵۸	۱۳۸۰۹۹۰۱
۲۰۰	۱۰۲	۳۷۶۹۹۹۸۶۹	۲۱۴۱۲۷۷۴۲	۱۵۶۵۵۶۷۲
۲۰۲	۱۰۳	۴۰۸۷۷۴۸۷۲	۲۳۳۸۴۶۴۶۳	۱۷۷۴۹۳۸۸
۲۰۴	۱۰۴	۴۴۰۶۲۷۷۲۶	۲۵۷۸۱۵۸۸۹	۲۰۰۷۰۴۸۶
۲۰۶	۱۰۵	۴۷۷۲۰۰۸۲۷	۲۸۱۰۰۶۳۲۵	۲۲۶۰۶۹۳۹
۲۰۸	۱۰۶	۵۱۳۶۳۲۳۸۰	۳۰۹۲۷۳۵۲۶	۲۵۵۳۶۵۵۷
۲۱۰	۱۰۷	۵۵۵۳۰۴۱۰۸	۳۳۶۵۰۰۸۳۰	۲۸۷۰۰۶۷۷
۲۱۲	۱۰۸	۵۹۶۹۷۴۰۷۲	۳۶۹۵۸۰۷۱۴	۳۲۲۳۰۸۶۱
۲۱۴	۱۰۹	۶۴۴۵۲۶۸۰۳	۴۰۱۵۳۵۹۵۵	۳۶۱۷۳۰۸۱
۲۱۶	۱۱۰	۶۹۱۷۸۶۸۲۸	۴۴۰۲۱۶۲۰۶	۴۰۵۳۶۹۲۲
۲۱۸	۱۱۱	۷۴۶۰۸۵۹۹۵	۴۷۷۴۲۰۱۷۶	۴۵۲۷۸۷۲۲
۲۲۰	۱۱۲	۷۹۹۶۴۸۷۳۹	۵۲۲۵۹۹۵۶۴	۵۰۶۵۱۷۹۹
۲۲۲	۱۱۳	۸۶۱۱۳۳۰۶۴	۵۶۵۹۰۰۱۸۱	۵۶۴۶۳۹۴۸
۲۲۴	۱۱۴	۹۲۲۰۸۲۲۱۶	۶۱۸۳۰۹۵۹۸	۶۲۸۸۷۷۷۵
۲۲۶	۱۱۵	۹۹۱۶۵۰۹۰۲	۶۶۸۶۶۲۶۹۸	۶۹۹۹۵۸۸۷
۲۲۸	۱۱۶	۱۰۶۰۲۰۸۵۵۰	۷۲۹۴۱۴۸۸۰	۷۷۸۳۱۳۲۳

جدول آ-۶: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم فاقد مثلث، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است.

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۲۳۰	۱۱۷	۱۱۳۹۲۳۹۹۴۷	۷۸۷۵۵۶۰۶۹	۸۶۲۳۸۲۰۶
۲۳۲	۱۱۸	۱۲۱۶۴۹۶۹۱۵	۸۵۷۹۳۴۰۱۶	۹۵۷۵۸۹۲۹
۲۳۴	۱۱۹	۱۳۰۵۳۰۶۹۳۶	۹۲۵۰۴۲۴۹۸	۱۰۵۹۶۵۳۷۳
۲۳۶	۱۲۰	۱۳۹۲۵۹۶۶۰۷	۱۰۰۶۰۱۶۵۲۶	۱۱۷۱۶۶۵۲۸
۲۳۸	۱۲۱	۱۴۹۲۵۲۵۰۹۱	۱۰۸۳۴۵۱۸۱۶	۱۲۹۴۷۶۶۰۷
۲۴۰	۱۲۲	۱۵۹۰۲۱۴۹۵۹	۱۱۷۶۶۳۲۲۴۷	۱۴۲۹۶۰۴۷۹
۲۴۲	۱۲۳	۱۷۰۲۹۹۸۱۲۴	۱۲۶۵۳۲۳۹۷۱	۱۵۷۴۰۲۷۸۱
۲۴۴	۱۲۴	۱۸۱۲۲۴۷۹۵۴	۱۳۷۲۴۴۰۷۸۲	۱۷۳۵۷۷۷۶۶
۲۴۶	۱۲۵	۱۹۳۸۳۵۶۹۷۵	۱۴۷۴۱۱۱۰۵۳	۱۹۰۸۰۹۶۲۸
۲۴۸	۱۲۶	۲۰۶۱۳۱۱۰۰۳	۱۵۹۶۴۸۲۲۳۲	۲۰۹۷۱۵۱۴۱
۲۵۰	۱۲۷	۲۲۰۲۲۰۲۳۰۸	۱۷۱۲۹۳۴۰۶۹	۲۳۰۲۷۲۵۵۹
۲۵۲	۱۲۸	۲۳۳۸۸۶۹۷۳۵	۱۸۵۲۷۶۲۸۷۵	۲۵۲۷۴۵۵۱۳
۲۵۴	۱۲۹	۲۴۹۷۲۵۷۵۲۷	۱۹۸۵۲۵۰۵۷۲	۲۷۶۵۹۹۷۸۷
۲۵۶	۱۳۰	۲۶۴۹۳۸۲۹۷۴	۲۱۴۴۹۴۳۶۵۵	۳۰۳۲۳۵۷۹۲
۲۵۸	۱۳۱	۲۸۲۵۳۶۱۰۱۴	۲۲۹۵۷۹۳۲۷۶	۳۳۱۵۱۶۹۸۴
۲۶۰	۱۳۲	۲۹۹۵۵۵۷۸۱۸	۲۴۷۷۰۱۷۵۵۸	۳۶۲۳۰۲۶۳۷
۲۶۲	۱۳۳	۳۱۹۱۲۹۲۸۲۱	۲۶۴۸۶۹۷۰۳۶	۳۹۵۶۰۰۳۲۵
۲۶۴	۱۳۴	۳۳۷۹۷۲۲۴۸۲	۲۸۵۴۵۳۶۸۵۰	۴۳۱۸۹۴۲۵۷
۲۶۶	۱۳۵	۳۵۹۸۵۴۲۶۶۱	۳۰۴۸۶۰۹۹۰۰	۴۷۰۲۵۶۴۴۴
۲۶۸	۱۳۶	۳۸۰۶۹۲۲۱۲۴	۳۲۸۲۲۰۲۹۴۱	۵۱۲۸۵۸۴۵۱
۲۷۰	۱۳۷	۴۰۴۹۰۸۷۴۲۴	۳۵۰۱۹۳۱۲۶۰	۵۵۷۷۴۵۶۷۰
۲۷۲	۱۳۸	۴۲۸۱۵۴۰۷۵۴	۳۷۶۵۴۶۵۳۴۱	۶۰۶۶۶۸۵۱۱
۲۷۴	۱۳۹	۴۵۴۹۲۵۹۵۱۰	۴۰۱۴۰۰۷۹۲۸	۶۵۹۱۴۰۲۸۷
۲۷۶	۱۴۰	۴۸۰۵۰۷۳۹۹۱	۴۳۱۱۶۵۲۳۷۶	۷۱۶۲۱۷۹۲۲
۲۷۸	۱۴۱	۵۱۰۳۴۵۷۷۰۳	۴۵۹۱۰۴۵۴۷۱	۷۷۶۱۶۵۱۸۸
۲۸۰	۱۴۲	۵۳۸۵۲۹۶۲۶۱	۴۹۲۶۹۸۷۳۷۷	۸۴۲۴۹۸۸۸۱

جدول آ-۷: لیستی از گراف‌های سطح ۳-منتظم فاقد مثلث، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های سطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه‌ی جدول (آ-۶)).

$nv$	$nf$	حداقل اندازه‌ی وجه: ۴	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۲۸۲	۱۴۳	۵۷۱۳۷۲۸۸۹۳	۵۲۴۱۵۴۸۲۷۰	۹۱۲۲۷۴۵۴۰
۲۸۴	۱۴۴	۶۰۲۶۵۴۸۲۳۸	۵۶۱۸۴۴۵۷۸۷	۹۸۷۸۷۴۰۹۵
۲۸۶	۱۴۵	۶۳۸۸۲۸۵۷۲۹	۵۹۷۲۴۲۶۸۳۵	۱۰۶۸۵۰۷۷۸۸
۲۸۸	۱۴۶	۶۷۳۱۴۸۵۹۷۵	۶۳۹۵۹۸۱۱۳۱	۱۱۵۶۱۶۱۳۰۷
۲۹۰	۱۴۷	۷۱۳۲۷۳۴۹۸۵	۶۷۹۱۷۶۹۰۸۲	۱۲۴۷۶۸۶۱۸۹
۲۹۲	۱۴۸	۷۵۰۸۶۹۹۰۳۸	۷۲۶۷۲۸۳۶۰۳	۱۳۴۸۸۳۲۳۶۴
۲۹۴	۱۴۹	۷۹۴۸۹۹۴۱۳۱	۷۷۱۰۷۸۲۹۹۱	۱۴۵۴۳۵۹۸۰۶
۲۹۶	۱۵۰	۸۳۶۵۳۰۴۴۲۳	۸۲۴۱۷۱۹۷۰۶	۱۵۶۸۷۶۸۵۲۴
۲۹۸	۱۵۱	۸۸۴۷۶۷۹۵۲۰	۸۷۳۸۲۳۶۵۱۵	۱۶۹۰۲۱۴۸۳۶
۳۰۰	۱۵۲	۹۳۰۲۰۴۲۳۷۰	۹۳۳۲۰۶۵۸۱۱	۱۸۲۱۷۶۶۸۹۶
۳۰۲	۱۵۳	۹۸۳۵۸۶۲۱۰۳	۹۸۸۴۶۰۴۷۶۷	۱۹۵۸۵۸۱۵۸۸
۳۰۴	۱۵۴	۱۰۳۳۲۱۰۲۶۲۵	۱۰۵۴۸۲۱۸۷۵۱	۲۱۰۹۲۷۱۲۹۰
۳۰۶	۱۵۵	۱۰۹۱۵۰۲۰۰۴۱	۱۱۱۶۴۵۴۲۷۶۲	۲۲۶۶۱۳۸۸۷۱
۳۰۸	۱۵۶	۱۱۴۶۲۱۳۳۷۵۸	۱۱۹۰۲۰۱۵۷۲۴	۲۴۳۵۸۴۸۹۷۱
۳۱۰	۱۵۷	۱۲۰۹۸۸۲۵۱۴۵	۱۲۵۸۸۹۹۸۸۶۲	۲۶۱۴۵۴۴۳۹۱
۳۱۲	۱۵۸	۱۲۶۹۴۵۱۹۲۲۴	۱۳۴۱۰۳۳۰۴۸۲	۲۸۰۸۵۱۰۱۴۱
۳۱۴	۱۵۹	۱۳۳۹۶۲۰۷۲۴۷	۱۴۱۷۱۳۴۴۷۹۷	۳۰۰۹۱۲۰۱۱۳
۳۱۶	۱۶۰	۱۴۰۴۳۴۰۲۴۹۷	۱۵۰۸۵۱۶۴۵۷۱	۳۲۲۹۷۳۱۶۳۰

جدول آ-۸: لیستی از گراف‌های مسطح ۳-منتظم فاقد مثلث، زمانی که حداکثر اندازه‌ی وجه‌ها ۶ است. گراف‌های مسطح ۳-منتظم شامل وجه‌هایی با حداکثر اندازه‌ی ۶ و حداقل اندازه‌ی ۵، گراف‌های فولرن هستند.  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه‌ی جدول (آ-۷)).

<i>nv</i>	<i>nf</i>	فولرن‌ها	فولرن‌های <i>IPR</i>
۳۱۸	۱۶۱	۱۵۹۳۰۶۱۹۳۰۴	۳۴۵۸۱۴۸۰۱۶
۳۲۰	۱۶۲	۱۶۹۴۲۰۱۰۴۵۷	۳۷۰۴۹۳۹۲۷۵
۳۲۲	۱۶۳	۱۷۸۸۰۲۳۲۳۸۳	۳۹۶۴۱۵۳۲۶۸
۳۲۴	۱۶۴	۱۹۰۰۲۰۵۵۵۳۷	۴۲۴۴۷۰۶۷۰۱
۳۲۶	۱۶۵	۲۰۰۳۷۳۴۶۴۰۸	۴۵۳۳۴۶۵۷۷۷
۳۲۸	۱۶۶	۲۱۲۸۰۵۷۱۳۹۰	۴۸۵۰۸۷۰۲۶۰
۳۳۰	۱۶۷	۲۲۴۲۶۲۵۳۱۱۵	۵۱۷۸۱۲۰۴۶۹
۳۳۲	۱۶۸	۲۳۷۹۶۶۲۰۳۷۸	۵۵۳۱۷۲۷۲۸۳
۳۳۴	۱۶۹	۲۵۰۶۳۲۲۷۴۰۶	۵۹۰۰۳۶۹۸۳۰
۳۳۶	۱۷۰	۲۶۵۷۷۹۱۲۰۸۴	۶۲۹۹۸۸۰۵۷۷
۳۳۸	۱۷۱	۲۷۹۷۰۰۳۴۸۲۶	۶۷۰۹۵۷۴۶۷۵
۳۴۰	۱۷۲	۲۹۶۴۲۲۶۲۲۲۹	۷۱۵۸۹۶۳۰۷۳
۳۴۲	۱۷۳	۳۱۱۷۷۴۷۴۹۹۶	۷۶۲۰۴۴۶۹۳۴
۳۴۴	۱۷۴	۳۳۰۱۴۲۲۵۳۱۸	۸۱۱۸۴۸۱۲۴۲
۳۴۶	۱۷۵	۳۴۷۰۵۲۵۴۲۸۷	۸۶۳۶۲۶۲۷۸۹
۳۴۸	۱۷۶	۳۶۷۲۸۲۶۶۴۳۰	۹۱۹۶۹۲۰۲۸۵
۳۵۰	۱۷۷	۳۸۵۸۰۶۲۶۷۵۹	۹۷۶۸۵۱۱۱۴۷
۳۵۲	۱۷۸	۴۰۸۰۶۳۹۵۶۶۱	۱۰۳۹۶۰۴۰۶۹۶
۳۵۴	۱۷۹	۴۲۸۴۲۱۹۹۷۵۳	۱۱۰۳۷۶۵۸۰۷۵
۳۵۶	۱۸۰	۴۵۲۷۸۶۱۶۵۸۶	۱۱۷۳۰۵۳۸۴۹۶
۳۵۸	۱۸۱	۴۷۵۱۳۶۷۹۰۵۷	۱۲۴۴۶۴۴۶۴۱۹
۳۶۰	۱۸۲	۵۰۱۸۹۰۳۹۸۶۸	۱۳۲۲۱۷۵۱۵۰۲
۳۶۲	۱۸۳	۵۲۶۲۸۸۳۹۴۴۸	۱۴۰۱۰۵۱۵۳۸۱
۳۶۴	۱۸۴	۵۵۵۶۲۵۰۶۸۸۶	۱۴۸۷۴۷۵۳۵۶۸
۳۶۶	۱۸۵	۵۸۲۳۶۲۷۰۴۵۱	۱۵۷۵۴۹۴۰۹۵۹
۳۶۸	۱۸۶	۶۱۴۳۷۷۰۰۷۸۸	۱۶۷۰۵۳۳۴۴۵۴
۳۷۰	۱۸۷	۶۴۳۶۳۶۷۰۶۷۸	۱۷۶۸۳۶۴۳۲۷۳

جدول آ-۹: تعدادی از فولرن‌ها و فولرن‌های *IPR*. *nv* تعداد راس‌ها و *nf* تعداد وجه‌ها است.

$nv$	$nf$	فولرن‌ها	فولرن‌های $IPR$
۳۷۲	۱۸۸	۶۷۸۶۸۱۴۹۲۱۵	۱۸۷۴۴۲۹۲۹۱۵
۳۷۴	۱۸۹	۷۱۰۵۲۷۱۸۴۴۱	۱۹۸۱۶۲۸۹۲۸۱
۳۷۶	۱۹۰	۷۴۸۸۴۵۳۹۹۸۷	۲۰۹۹۲۴۲۵۸۲۵
۳۷۸	۱۹۱	۷۸۳۶۴۰۳۹۷۷۱	۲۲۱۸۶۴۱۳۱۳۹
۳۸۰	۱۹۲	۸۲۵۳۲۹۹۰۵۵۹	۲۳۴۷۵۰۷۹۲۷۲
۳۸۲	۱۹۳	۸۶۳۲۹۶۸۰۹۹۱	۲۴۷۹۵۸۹۸۳۸۸
۳۸۴	۱۹۴	۹۰۸۸۱۱۵۲۱۱۷	۲۶۲۲۷۱۹۷۴۵۳
۳۸۶	۱۹۵	۹۵۰۰۱۲۹۷۵۶۵	۲۷۶۷۰۸۶۲۵۵۰
۳۸۸	۱۹۶	۹۹۹۶۳۱۴۷۸۰۵	۲۹۲۵۴۰۳۶۷۱۱
۳۹۰	۱۹۷	۱۰۴۴۵۳۵۹۷۹۹۲	۳۰۸۵۲۹۵۰۹۸۶
۳۹۲	۱۹۸	۱۰۹۸۳۷۳۱۰۰۲۱	۳۲۵۸۱۳۶۶۲۹۵
۳۹۴	۱۹۹	۱۱۴۷۲۲۹۸۸۶۲۳	۳۴۳۴۵۱۷۳۸۹۴
۳۹۶	۲۰۰	۱۲۰۵۸۵۲۶۱۱۴۳	۳۶۲۵۹۲۱۲۶۴۱
۳۹۸	۲۰۱	۱۲۵۸۷۳۳۲۵۵۸۸	۳۸۱۷۹۷۷۷۴۷۳
۴۰۰	۲۰۲	۱۳۲۲۴۷۹۹۹۳۲۸	۴۰۲۸۶۱۵۳۰۲۴

جدول آ-۱۰: تعدادی از فولرن‌ها و فولرن‌های  $IPR$ .  $nv$  تعداد راس‌ها و  $nf$  تعداد وجه‌ها است (ادامه‌ی جدول (آ-۹)).





پیوست ب

تعداد ساختار در هر ثانیه	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد کلاهک‌ها	l
-	-	۱	۵
-	-	۱۸	۶
-	-	۱۴۵	۷
۴۲۳/۷	۱/۹	۸۰۵	۸
۳۴۶/۲	۸/۸	۳۰۴۷	۹
۲۸۹/۲	۳۲/۳	۹۳۴۲	۱۰
۲۳۰/۹	۱۰۴/۸	۲۴۱۹۵	۱۱
۱۹۸/۲	۲۸۳/۱	۵۶۱۱۸	۱۲
۱۶۶/۴	۷۱۱/۷	۱۱۸۴۲۹	۱۳
۱۳۱/۴	۱۷۷۷/۰	۲۳۳۴۰۹	۱۴
۱۱۲/۴	۳۸۵۲/۰	۴۳۳۱۱۹	۱۵
۱۰۳/۰	۷۴۴۷/۰	۷۶۶۷۹۹	۱۶
۸۶/۱	۱۵۱۲۰/۴	۱۳۰۱۵۳۱	۱۷
۷۷/۶	۲۷۴۹۲/۲	۲۱۳۴۵۲۱	۱۸
۶۶/۶	۵۰۹۴۰/۵	۳۳۹۲۶۸۵	۱۹
۵۶/۱	۹۳۵۵۱/۰	۵۲۵۲۲۰۷	۲۰
۵۰/۱	۱۵۸۳۹۴/۵	۷۹۳۶۱۵۷	۲۱
۴۴/۰	۲۶۶۹۰۵/۱	۱۱۷۴۳۴۱۷	۲۲
۳۹/۱	۴۳۵۶۱۰/۷	۱۷۰۴۳۵۷۳	۲۳
۳۰/۸	۷۹۰۱۸۴/۹	۲۴۳۱۸۲۸۸	۲۴
۳۱/۹	۱۰۶۹۴۰۵/۸	۳۴۱۵۱۲۳۱	۲۵

جدول ب-۱: تعدادی نیم‌لوله با پنج ضلعی‌های مجزا با پارامتر (l, l).

l	تعداد کلاهک‌ها	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد ساختار در هر ثانیه
۳	۱	-	-
۴	۱۲	-	-
۵	۷۳	-	-
۶	۳۴۸	-	-
۷	۱۲۲۳	۱/۶	۷۶۴/۴
۸	۳۷۳۱	۶/۷	۵۵۶/۹
۹	۹۷۸۷	۲۲/۹	۴۲۷/۴
۱۰	۲۳۳۱۶	۶۹/۴	۳۳۶/۰
۱۱	۵۰۷۰۲	۱۸۸/۵	۲۶۹/۰
۱۲	۱۰۳۲۸۴	۴۷۴/۶	۲۱۷/۶
۱۳	۱۹۷۸۲۳	۱۰۹۴/۷	۱۸۰/۷
۱۴	۳۶۱۴۴۰	۲۳۴۸/۰	۱۵۳/۹
۱۵	۶۳۱۸۹۲	۵۲۱۰/۶	۱۲۱/۳
۱۶	۱۰۶۶۰۲۳	۱۰۱۹۰/۴	۱۰۴/۶
۱۷	۱۷۳۹۶۶۴	۲۰۵۵۱/۷	۸۴/۶
۱۸	۲۷۶۱۲۷۸	۳۸۶۳۳/۰	۷۱/۵
۱۹	۴۲۷۰۴۹۴	۷۲۲۲۲/۶	۵۹/۱
۲۰	۶۴۵۹۴۰۶	۱۳۰۴۸۰/۳	۴۹/۵

جدول ب-۲: تعدادی نیم‌لوله با پارامتر (l, l).

l	تعداد کلاهک‌ها	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد ساختار در هر ثانیه
۵	۰	-	-
۶	۰	-	-
۷	۰	-	-
۸	۰	-	-
۹	۱	-	-
۱۰	۷	-	-
۱۱	۳۱	-	-
۱۲	۱۲۴	-	-
۱۳	۳۴۷	-	-
۱۴	۸۸۹	-	-
۱۵	۱۹۶۳	-	-
۱۶	۴۰۳۲	۱/۴	۲۸۸۰/۰
۱۷	۷۶۱۷	۲/۹	۲۶۲۶/۶
۱۸	۱۳۷۵۴	۶/۰	۲۲۹۲/۳
۱۹	۲۳۴۷۳	۱۰/۹	۲۱۵۳/۵
۲۰	۳۸۷۷۷	۱۷/۱	۲۲۶۷/۷
۲۱	۶۱۶۳۹	۳۳/۴	۱۸۴۵/۵
۲۲	۹۵۵۱۵	۵۸/۲	۱۶۴۱/۲
۲۳	۱۴۳۸۶۱	۸۶/۹	۱۶۵۵/۵
۲۴	۲۱۲۴۳۳	۱۴۵/۲	۱۴۶۳/۰
۲۵	۳۰۶۸۰۵	۲۳۱/۱	۱۳۲۷/۶
۲۶	۴۳۶۰۴۹	۳۶۹/۵	۱۱۸۰/۱
۲۷	۶۰۸۹۵۳	۵۳۵/۸	۱۱۳۶/۵
۲۸	۸۳۹۰۸۳	۶۶۱/۹	۱۲۶۷/۷
۲۹	۱۱۳۹۷۱۱	۱۰۹۹/۷	۱۰۳۶/۴
۳۰	۱۵۳۰۷۱۰	۱۲۴۰/۸	۱۲۳۳/۶
۳۱	۲۰۳۱۲۷۵	۲۲۰۹/۵	۹۱۹/۳
۳۲	۲۶۶۹۶۵۶	۳۰۹۹/۲	۸۶۱/۴

جدول ب-۳: تعدادی نیم‌لوله با پنج ضلعی‌های مجزا با پارامتر (l, °).

l	تعداد کلاهک‌ها	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد ساختار در هر ثانیه
۳۳	۳۴۷۳۱۷۵	۴۱۲۸/۴	۸۴۱/۳
۳۴	۴۴۸۰۷۷۵	۵۵۹۶/۸	۸۰۴/۵
۳۵	۵۷۳۰۳۷۵	۷۵۳۸/۶	۷۶۰/۱
۳۶	۷۲۷۴۹۱۲	۱۰۱۰۰/۶	۷۲۰/۲
۳۷	۹۱۶۵۶۲۹	۱۳۳۹۵/۱	۶۸۴/۳
۳۸	۱۱۴۷۳۱۲۷	۱۷۵۶۸/۹	۶۵۳/۰
۳۹	۱۴۲۶۵۸۳۵	۲۲۸۹۹/۱	۶۲۳/۰
۴۰	۱۷۶۳۶۰۴۲	۲۹۵۰۸/۵	۵۹۷/۷
۴۱	۲۱۶۷۳۶۰۷	۳۴۵۷۱/۲	۶۲۶/۹
۴۲	۲۶۴۹۷۹۳۲	۴۲۰۲۷/۷	۶۳۰/۵
۴۳	۳۲۲۲۴۹۱۹	۵۲۲۳۹/۵	۶۱۶/۹
۴۴	۳۹۰۰۷۰۰۳	۶۶۲۱۴/۷	۵۸۹/۱
۴۵	۴۶۹۹۲۳۲۳	۸۳۱۵۳/۳	۵۶۵/۱
۴۶	۵۶۳۷۲۷۵۳	۱۰۵۷۶۴/۴	۵۳۳/۰
۴۷	۶۷۳۳۵۳۷۵	۱۳۰۵۶۴/۲	۵۱۵/۷
۴۸	۸۰۱۱۹۸۰۱	۱۶۳۶۹۰/۰	۴۸۹/۵
۴۹	۹۴۹۵۹۲۵۷	۲۰۲۷۶۹/۶	۴۶۸/۳
۵۰	۱۱۲۱۵۰۰۳۷	۲۵۰۲۶۴/۸	۴۴۸/۱

جدول ب-۴: تعدادی نیم‌لوله با پنج ضلعی‌های مجزا با پارامتر (l, °) (ادامه‌ی جدول (ب-۳)).

l	تعداد کلاهک‌ها	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد ساختار در هر ثانیه
۵	۱	-	-
۶	۵	-	-
۷	۱۳	-	-
۸	۴۲	-	-
۹	۱۰۶	-	-
۱۰	۲۵۸	-	-
۱۱	۵۵۲	-	-
۱۲	۱۱۵۳	-	-
۱۳	۲۱۹۹	-	-
۱۴	۴۰۸۳	۱/۱	۳۷۱۱/۸
۱۵	۷۱۵۷	۲/۱	۳۴۰۸/۱
۱۶	۱۲۲۰۸	۴/۰	۳۰۵۲/۰
۱۷	۱۹۹۸۴	۷/۱	۲۸۱۴/۶
۱۸	۳۱۹۹۸	۱۲/۲	۲۶۲۲/۸
۱۹	۴۹۶۳۲	۲۱/۲	۲۳۴۱/۱
۲۰	۷۵۵۵۸	۳۶/۱	۲۰۹۳/۰
۲۱	۱۱۲۲۵۱	۵۱/۰	۲۲۰۱/۰
۲۲	۱۶۴۰۸۷	۷۹/۷	۲۰۵۸/۸
۲۳	۲۳۵۲۱۳	۱۲۱/۷	۱۹۳۲/۷
۲۴	۳۳۲۵۸۵	۱۸۶/۹	۱۷۷۹/۵
۲۵	۴۶۲۷۲۶	۲۸۸/۵	۱۶۰۳/۹
۲۶	۶۳۶۲۴۰	۴۳۷/۲	۱۴۵۵/۳
۲۷	۸۶۳۱۴۰	۵۸۸/۴	۱۴۶۶/۹
۲۸	۱۱۵۸۹۵۰	۸۴۶/۱	۱۳۶۹/۸
۲۹	۱۵۳۸۴۹۵	۱۲۱۲/۹	۱۲۶۸/۴
۳۰	۲۰۲۴۰۵۱	۱۶۶۶/۸	۱۲۱۴/۳
۳۱	۲۶۳۶۸۰۱	۲۴۳۴/۷	۱۰۸۳/۰
۳۲	۳۴۰۷۹۰۸	۳۱۸۲/۲	۱۰۷۰/۹

جدول ب-۵: تعدادی نیم‌لوله با پارامتر  $(l, \circ)$ .

$l$	تعداد کلاهک‌ها	زمان محاسبه (ثانیه)	تعداد ساختار در هر ثانیه
۳۳	۴۳۶۷۱۲۲	۴۴۸۳/۱	۹۷۴/۱
۳۴	۵۵۵۶۹۴۴	۶۱۹۰/۳	۸۹۷/۷
۳۵	۷۰۱۸۲۲۶	۷۶۱۲/۱	۹۲۲/۰
۳۶	۸۸۰۸۱۱۱	۱۰۴۱۵/۴	۸۴۵/۷
۳۷	۱۰۹۸۱۴۳۱	۱۳۵۱۱/۱	۸۱۲/۸
۳۸	۱۳۶۱۳۷۱۹	۱۸۲۱۹/۰	۷۴۷/۲
۳۹	۱۶۷۷۷۶۳۵	۲۳۰۲۷/۵	۷۲۸/۶
۴۰	۲۰۵۷۱۳۰۸	۲۹۲۳۶/۱	۷۰۳/۶

جدول ب-۶: تعدادی نیم‌لوله با پارامتر  $(l, 0)$  (ادامه‌ی جدول (ب-۵)).

## واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

<i>k</i> -vertex.....	<i>k</i> -راس
Partition.....	افراز
Body.....	بدنه
Trivial.....	بدیهی
Cut.....	برش
<i>k</i> -edge cut.....	برش <i>k</i> -یالی
Edge cut.....	برش یالی
Cyclically <i>k</i> -edge connected.....	به طور دوری همبند <i>k</i> -یالی
Canonical parent.....	پدر متعارفی
Flag.....	پرچم
Bridge.....	پل
Mirror image.....	تصویر آینه‌ای
Almost pseudoconvex.....	تقریباً شبه‌محدب
Expansion.....	توسیع
Canonical expansion.....	توسیع متعارفی
Embedding.....	جانشانی
Automorphism.....	خودریختی
Degree.....	درجه
Cycle.....	دور
Cyclic.....	دوری
Relationship.....	رابطه
Vertex colouring.....	رنگ‌آمیزی راسی
Canonical construction path method.....	روش ساخت مسیر متعارفی
Three regular.....	سه منظم
Three connected.....	سه همبند
Representing triples.....	سه‌تایی‌های نماینده
Folding nets.....	شبکه‌های تاشو
Pseudoconvex.....	شبه‌محدب
Bend.....	شکست
Loop.....	طوقه
Length.....	طول
Non degenerate.....	غیر منحط
Canonical child.....	فرزند متعارفی



<i>Patch</i> .....	قطعه
<i>Reduction</i> .....	کاهش
<i>Canonical reduction</i> .....	کاهش متعارفی
<i>Cap</i> .....	کلاهک
<i>Dual graph</i> .....	گراف دوگان
<i>Simple graph</i> .....	گراف ساده
<i>Plane graph</i> .....	گراف صفحه‌ای
<i>Planar graph</i> .....	گراف مسطح
<i>Connected graph</i> .....	گراف همبند
<i>Group</i> .....	گروه
<i>Automorphism group</i> .....	گروه خودریختی
<i>Walk</i> .....	گشت
<i>Lexicographically</i> .....	لغت‌نامه‌ای
<i>Spiral</i> .....	مارپیچ
<i>Canonical</i> .....	متعارفی
<i>Triangulations</i> .....	مثلث بندی
<i>Adjacent</i> .....	همجوار
<i>Path</i> .....	مسیر
<i>Degenerate</i> .....	منحط
<i>Parallel</i> .....	موازی
<i>Nanotube</i> .....	نانولوله
<i>End points</i> .....	نقاط انتهایی
<i>Half tube</i> .....	نیم لوله
<i>Face</i> .....	وجه
<i>Outer face</i> .....	وجه خارجی
<i>Inner face</i> .....	وجه داخلی
<i>Equivalent</i> .....	هم‌ارزی
<i>k-edge connected</i> .....	همبند $k$ -یالی
<i>Convex edge</i> .....	یال محدب
<i>Concave edge</i> .....	یال مقعر
<i>Isomorphism</i> .....	یکریختی
<i>Orientation preserving isomorphism</i> .....	یکریختی حفظ‌کننده‌ی جهت
<i>Orientation reversing isomorphism</i> .....	یکریختی معکوس‌کننده‌ی جهت



## مراجع

- [1] T.Yu. Astakhova, G.A. Vinogradov, and E. Osawa. *Numerical generation of nanotube caps ii. exact results up to (10, 10)*. Fullerene science and technology, 7(5):769–779, 1999.
- [2] J. Bornhöft, G. Brinkmann, and J. Greinus. *Pentagon–hexagon-patches with short boundaries*. European Journal of Combinatorics, 24(5):517–529, 2003.
- [3] G. Brinkmann and A.W.M. Dress. *A constructive enumeration of fullerenes*. Journal of Algorithms, 23(2):345–358, 1997.
- [4] G. Brinkmann and P.W. Fowler. *A catalogue of growth transformations of fullerene polyhedra*. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 43(6):1837–1843, 2003.
- [5] G. Brinkmann, P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos, and A.H.R. Palser. *A census of nanotube caps*. Chemical Physics Letters, 315(5):335–347, 1999.
- [6] G. Brinkmann, D. Franceus, P.W. Fowler, and J.E. Graver. *Growing fullerenes from seed: Growth transformations of fullerene polyhedra*. Chemical physics letters, 428(4):386–393, 2006.
- [7] G. Brinkmann, D. Franceus, P.W. Fowler, and J.E. Graver. *Growing fullerenes from seed: Growth transformations of fullerene polyhedra*. Chemical Physics Letters, 428(4):386–393, 2006.
- [8] G. Brinkmann, J. Goedgebeur, and B.D. McKay. *The generation of fullerenes*. Journal of Chemical Information and Modeling, 52(11):2910–2918, 2012.
- [9] G. Brinkmann, J. Goedgebeur, and B.D. McKay. *The smallest fullerene without a spiral*. Chemical Physics Letters, 522:54–55, 2012.

- [10] G. Brinkmann, J.E. Graver, and C. Justus. *Numbers of faces in disordered patches*. Journal of Mathematical Chemistry, 45(2):263–278, 2009.
- [11] G. Brinkmann and B.D. McKay. *Fast generation of planar graphs*. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 58(2):323–357, 2007.
- [12] G. Brinkmann, B.D. McKay, and U. von Nathusius. *Backtrack search and look-ahead for the construction of planar cubic graphs with restricted face sizes*. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 48:163–177, 2003.
- [13] G. Brinkmann, U.v. Nathusius, and A.H.R. Palser. *A constructive enumeration of nanotube caps*. Discrete Applied Mathematics, 116(1):55–71, 2002.
- [14] R. Diestel. *Graph theory, volume 173 of graduate texts in mathematics*, 2005.
- [15] R. Diestel. *Graph Theory. Electronic library of mathematics*. Springer, 2006.
- [16] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P.C. Eklund. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes: their properties and applications*. Academic Press, 1996.
- [17] J. Greinus. *Patches mit minimaler randlänge*. Diplomarbeit, Bielefeld, 2000.
- [18] J. Greinus and G. Brinkmann. *Patches with minimal boundary length*. Electronic Notes in Discrete Mathematics, 3:55–59, 1999.
- [19] M. Hasheminezhad, H. Fleischner, and B.D. McKay. *A universal set of growth operations for fullerenes*. Chemical Physics Letters, 464(1):118–121, 2008.
- [20] S. Iijima et al. *Helical microtubules of graphitic carbon*. Nature, 354(6348):56–58, 1991.
- [21] A. Itai and Y. Shiloach. *Maximum flow in planar networks*. SIAM Journal on Computing, 8(2):135–150, 1979.
- [22] F. Kardoš and R. Škrekovski. *Cyclic edge-cuts in fullerene graphs*. Journal of Mathematical Chemistry, 44(1):121–132, 2008.
- [23] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O’Brien, R.F. Curl, and R.E. Smalley. *C<sub>60</sub>: buckminsterfullerene*. Nature, 318(6042):162–163, 1985.

- [24] X. Liu, D.J. Klein, T.G. Schmalz, and W.A. Seitz. *Generation of carbon-cage polyhedra*. Journal of Computational Chemistry, 12(10):1252–1259, 1991.
- [25] D.E. Manolopoulos and P.W. Fowler. *Molecular graphs, point groups, and fullerenes*. The Journal of Chemical Physics, 96:7603, 1992.
- [26] D.E. Manolopoulos and P.W. Fowler. *A fullerene without a spiral*. Chemical Physics Letters, 204(1):1–7, 1993.
- [27] D.E. Manolopoulos, J.C. May, and S.E. Down. *Theoretical studies of the fullerenes: C<sub>34</sub> to: C<sub>70</sub>*. Chemical Physics Letters, 181(2):105–111, 1991.
- [28] B.D. McKay. *Isomorph-free exhaustive generation*. Journal of Algorithms, 26(2):306–324, 1998.
- [29] C.H. Sah. *Combinatorial construction of fullerene structures*. Croatica Chemica Acta, 66(1):1–12, 1993.
- [30] M. Yoshida and E. Osawa. *Formalized drawing of fullerene nets. 1. algorithm and exhaustive generation of isomeric structures*. Bulletin of the Chemical Society of Japan, 68(7):2073–2081, 1995.



## *Abstract*

*The graphs corresponding to fullerene molecules are three connected, three regular planar graphs that all of their faces are pentagons or hexagons. The latest algorithm for producing the corresponding graphs with fullerenes was developed in 2012. The implementation of this algorithm is more than 3.5 times faster than the previously fastest generator for fullerenes - fullgen - and the first program since fullgen to be useful for fullerenes with more than 100 vertices. This algorithm is investigated in this thesis.*

*Nanotube which is a special type of fullerene has a cylindrical structure is composed of a body and a cap. The nanotube body structure depends on its cap structure, Thus in this thesis we investigate the profit of an efficient algorithm for the production of the caps of nanotubes. The recent algorithm was developed by Brinkmann in 1999.*





*Yazd University*

*Faculty of Mathematics*

*Department of Computer Science*

*Thesis submitted*

*for the degree of Master of Science*

*Title:*

*The Generation of Graphs  
Corresponding to Fullerenes*

*Supervisor:*

*Dr. Mahdieh Hasheminezhad*

*Advisor:*

*Dr. Mohammad Farshi*

*By:*

*Mohaddeseh Khaksari Ashkezari*

*March, 2014*

