

## Метод поиска выпуклых полиэдров с заданной точечной группой симметрии

Войтеховский Ю.Л.<sup>1,2</sup>, Степенщиков Д.Г.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский горный университет, [voytekhovskiy\\_yul@pers.spmi.ru](mailto:voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru)

<sup>2</sup> Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, [stepen@geoksc.apatity.ru](mailto:stepen@geoksc.apatity.ru)

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

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

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

Voytekhovsky Y.L.<sup>1,2</sup>, Stepenshchikov D.G.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Saint-Petersburg Mining University, [voytekhovskiy\\_yul@pers.spmi.ru](mailto:voytekhovskiy_yul@pers.spmi.ru)

<sup>2</sup> Geological Institute of KSC RAS, Apatity, [stepen@geoksc.apatity.ru](mailto:stepen@geoksc.apatity.ru)

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

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

### Введение

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

### Метод

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

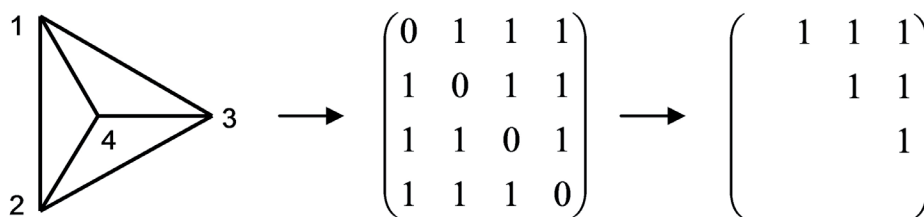


Рис. 1. Алгоритм нахождения имени (численного кода) выпуклого полиэдра через его рёберный граф и матрицу смежности вершин.

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

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

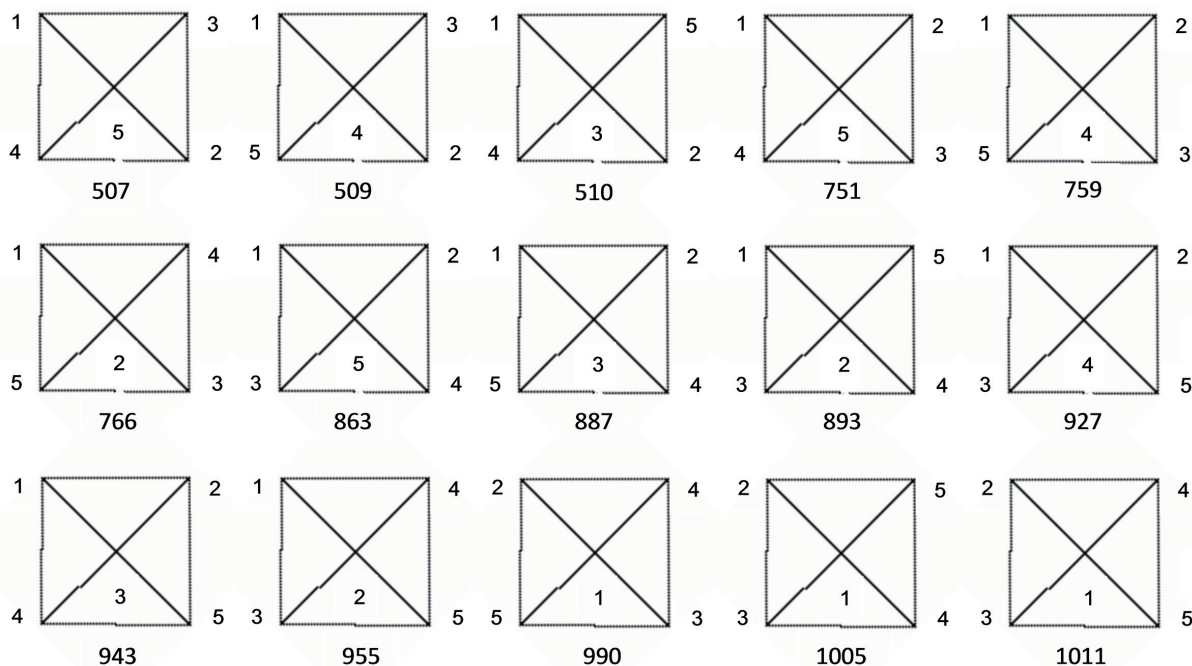


Рис. 2. Имена тетрагональной пирамиды, получаемые при различных нумерациях вершин.

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

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

### **Заключение**

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

### **Литература**

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