

7个苯环生成的六角系统的自由度与反自由度

徐正权, 邓凯*

(北方民族大学数学与信息科学学院, 宁夏 银川 750021)

摘要: 设 M 是图 G 的一个完美匹配, $S \subseteq M$, $S' \subseteq E(G) \setminus M$. 若 S 不被 G 中除 M 以外的其它完美匹配所包含, 则称 S 是 M 的一个强迫集. 包含边数最少的强迫集的势称为 M 的强迫数, 图 G 中所有完美匹配强迫数的和称作图 G 的自由度. 若 M 是 G 删去 S' 中边得到的图 $G \setminus S'$ 中唯一的完美匹配, 则称 S' 是 M 的一个反强迫集. 包含边数最少的反强迫集的势称为 M 的反强迫数, 图 G 中所有完美匹配反强迫数的和称作图 G 的反自由度. 通过计算强迫和反强迫多项式, 得到了由 7 个苯环生成的所有有完美匹配的六角系统的自由度和反自由度.

关键词: 完美匹配; 强迫数; 反强迫数; 六角系统

中图分类号: O157 **文献标志码:** A

引用格式: 徐正权, 邓凯. 7 个苯环生成的六角系统的自由度与反自由度[J]. 山东大学学报(理学版), 2026, 61(2): 115-126.

Degree of freedom and anti-degree of freedom of a hexagonal system generated by seven benzene rings

XU Zhengquan, DENG Kai*

(School of Mathematics and Information Sciences, North Minzu University, Yinchuan 750021, Ningxia, China)

Abstract: Let M be a perfect matching of a graph G , $S \subseteq M$, $S' \subseteq E(G) \setminus M$. If S is not included in any perfect matching of G except for M , then S is called a forcing set of M . The cardinality of a forcing set of M which has the least number of edges is called the forcing number of M , the sum of forcing numbers of all perfect matchings of G is called the degree of freedom of G . If M is the unique perfect matching of the graph $G \setminus S'$ obtained by deleting the edges of S' from G , then S' is called an anti-forcing set of M . The cardinality of an anti-forcing set of M which has the least number of edges is called the anti-forcing number of M , the sum of anti-forcing numbers of all perfect matchings of G is called the anti-degree of freedom of G . By calculating the forcing and anti-forcing polynomials, the degrees of freedom and anti-degrees of freedom of all hexagonal systems with a perfect matching generated by seven benzene rings are obtained.

Key words: perfect matching; forcing number; anti-forcing number; hexagonal system

1 引言与预备

设 G 是一个简单无向图, 分别用 $V(G)$ 和 $E(G)$ 表示图 G 的顶点集和边集. 如果图 G 的一个边子集 $M \subseteq E(G)$ 中任意两条边都不邻接, 那么称 M 为图 G 的一个匹配. 匹配 M 中边所关联的顶点称作被 M 覆盖, 覆盖图中所有顶点的匹配称作是图的完美匹配. 完美匹配是刻画和解决资源分配、人员安排和理论化学中 Kekulé 结构等问题的有效模型, 文献[1]系统地介绍了匹配理论的研究背景和发展.

设 M 是图 G 的一个完美匹配, S 是 M 的子集. 若 S 不包含于 G 中除 M 以外的其它完美匹配, 则称 S 是 M 的一个强迫集. M 的一个包含边数最小的强迫集, 称作 M 的最小强迫集. M 的最小强迫集的势叫做 M

收稿日期: 2024-04-27; 网络出版时间: 2025-06-11

基金项目: 国家自然科学基金(12161002); 宁夏高等教育一流学科建设基金项目(NXYLXK2017B09)

第一作者: 徐正权(1999—), 男, 硕士研究生, 研究方向为图论及其应用. E-mail: xuzhengquan2024@163.com

* 通信作者: 邓凯(1980—), 男, 副教授, 硕士生导师, 研究方向为图论及其应用. E-mail: dengkai04@126.com

的强迫数,记作 $f(G, M)$ 。特别地,当 $f(G, M) = 1$ 时,仅需图 G 中一条边就可以强迫 M , 这样的边叫作图 G 的强迫边。完美匹配的强迫数最早由 Harary 等^[2]提出,其背景来源于 Klein 和 Randić^[3-4]在理论化学研究中提出的 Kekulé 结构的内自由度概念。图 G 中所有完美匹配的强迫数的最小和最大值,分别叫作图的最小和最大强迫数,分别记作 $f(G)$ 和 $F(G)$ 。Adams 等^[5]证明求解最大度为 3 的二部图中单个完美匹配的强迫数是 NP-完全的, Afshani^[6]等进一步证明求解最大度为 4 的二部图的最小强迫数也是 NP-完全的。

图中完美匹配数目通常是指数级的,实际上一般图的完美匹配计数问题是 #P-完全的^[1]。图 G 中所有完美匹配的强迫数之和称作图的自由度,记作 $IDF(G)$ 。苯类碳氢化合物分子图的自由度被认为是反映分子稳定性的图不变量^[4,7]。为研究图中所有完美匹配的强迫数的分布,Adams 等^[5]提出图 G 的强迫谱,它是 G 中所有完美匹配强迫数的集合。进一步考虑强迫谱中强迫数的重数,张和平等^[8]定义图 G 的强迫多项式

$$F(G, x) = \sum_{i=f(G)}^{F(G)} \omega(G, i) x^i, \quad (1)$$

其中 $\omega(G, i)$ 表示图 G 中强迫数等于 i 的完美匹配数目。

设 $\mathcal{M}(G)$ 表示图 G 中所有完美匹配的集合,则式(1)可改写为

$$F(G, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}(G)} x^{f(G, M)}. \quad (2)$$

设 $\Phi(G)$ 表示 G 中完美匹配的个数,则 $F(G, x)|_{x=1} = \Phi(G)$, $IDF(G) = \frac{d}{dx} F(G, x)|_{x=1}$ 。早期 Klein 和

Randić^[4]利用转移矩阵方法得到 Zigzag 六角链的自由度计算公式。最近一些图类的强迫多项式和自由度得到了精确的计算结果,例如 cata-型六角系统^[8]、平行四边形六角系统^[9]、特殊方格子图^[10-11]、线性亚苯基系统^[12]等。

Vukićević 等^[13]提出图的反强迫数,随后 Lei 等^[14]进一步提出单个完美匹配的反强迫概念。设 M 是图 G 的一个完美匹配, $S' \subseteq E(G) \setminus M$, 如果 M 是图 $G \setminus S'$ 中唯一的完美匹配,则称 S' 是 M 的反强迫集。 M 的最小反强迫集的势称作 M 的反强迫数,记作 $af(G, M)$ 。图 G 中所有完美匹配的反强迫数的最小和最大值,分别叫作图的最小和最大反强迫数,分别记作 $af(G)$ 和 $Af(G)$ 。文献[15]证明求解最大度为 4 的二部图中单个完美匹配的反强迫数是 NP-完全的。

Hwang 等^[16]引入图的反强迫多项式

$$Af(G, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}(G)} x^{af(G, M)}. \quad (3)$$

式(3)可改写为

$$Af(G, x) = \sum_{i=af(G)}^{AF(G)} \nu(G, i) x^i, \quad (4)$$

其中 $\nu(G, i)$ 表示图 G 中反强迫数为 i 的完美匹配的个数。

显然, $Af(G, 1) = \Phi(G)$ 。 $\frac{d}{dx} Af(G, x)|_{x=1}$ 是图 G 中所有完美匹配的反强迫数之和,也称为图 G 的反自由度,记为 $ADF(G)$ 。一些图类的反强迫多项式和反自由度得到了精确的计算结果,例如特殊方格子图^[10-11]、线性亚苯基系统^[12]、芘系统^[17]、有强迫边的六角系统^[18]等。

六角系统是一个 2-连通平面二部图,其所有内面边界都是全等的正六边形或苯环,仅有外部面的边界可以是非六边形。理论化学中将苯类碳氢化合物的碳原子和氢原子看作图中的顶点,2 个原子之间的化学键作为图中的边,然后去掉氢原子,得到的苯类碳氢化合物的碳原子骨架或分子图就是一个六角系统。苯类碳氢化合物中碳碳双键的集合恰好与其分子图中的完美匹配相对应,化学中称其为 Kekulé 结构,理论化学研究表明稳定的苯类碳氢化合物中都有 Kekulé 结构^[19]。

六角系统可划分为 cata-型和 peri-型 2 类。如果一个六角系统的内对偶图是一棵树,即没有 3 个六边形共用一个顶点,那么称其为 cata-型六角系统。特别地,若 cata-型六角系统内对偶图是一条路,则叫做六角链;若 cata-型六角系统内对偶图有 3 度顶点,即存在一个六边形与另外 3 个六边形相邻,则称为是分叉的。除了 cata-型其余都是 peri-型,即有 3 个六边形共用一个顶点。

由给定数目的苯环生成的非同构的六角系统的计数是经典的细胞生长问题和苯类碳氢化合物同分异构体

研究的主要内容,该计数问题目前仍然是公开的^[20-21]。由 7 个苯环生成的所有不同六角系统的数目是 331 个,其中有完美匹配的是 190 个^[21],cata-型有 118 个^[22]。附录图 1 是由 7 个苯环生成的所有不同的 118 个 cata-型六角系统。附录图 2 是由 7 个苯环生成的所有不同的 72 个有完美匹配的 peri-型六角系统,其中图 H_{190} 称作是六苯并苯。如果六角系统 H 中的一条边属于其某个完美匹配,那么称这条边是 H 中的一条允许边,否则称其为禁止边。附录图 2 中从 H_{119} 到 H_{140} 都是有禁止边的,其中的虚线边是禁止边。 H 中所有允许边导出的子图的连通分支称作 H 的基本分支。本文将计算 7 个苯环生成的所有六角系统的自由度和反自由度。

2 7 个苯环生成的六角系统的自由度

设 M 是图 G 的一个完美匹配,如果 G 中的一个圈 C 的边在 M 和 $E(G) \setminus M$ 中交替出现那么称 C 是 M -交错圈。令 $c(M)$ 表示图 G 中互不相交或者独立的 M -交错圈的最大个数,则有下面的极大极小定理。

定理 1^[23] 设 G 是平面二部图, M 是 G 的一个完美匹配,则 $f(G, M) = c(M)$ 。

平面图的一个面的边界称作是面圈,对于平面二部图有下面的结论。

引理 1^[24] 设 M 是平面基本二部图 G 的一个完美匹配, C 是 G 中一个 M -交错圈,则 C 的内部存在一个 M -交错面圈。

定理 2 设 H 是一个由 7 个苯环生成的六角系统,且 H 不是六苯并苯(见附录图 $2H_{190}$), M 是 H 的一个完美匹配,则 $f(H, M) = h(H, M)$,其中 $h(H, M)$ 是 H 中独立的 M -交错六边形的最大个数。

证明 设 \mathcal{A} 是 H 中一个势最大的独立 M -交错圈的集合,且 \mathcal{A} 中包含尽可能多的 M -交错六边形。假设 \mathcal{A} 中包含一个非六边形圈 C ,则由引理 1 知 C 的内部包含一个 M -交错六边形 h 。观察附录图 1、2,除 H_{190} 外, H 中每一个六边形都至少有一条边在 H 的外面边界上,因此 \mathcal{A} 中任意 2 个独立的 M -交错圈不能相互嵌套,即一个包含在另一个的内部。这表明 h 与 C 一定有公共边,且 h 与 $\mathcal{A} \setminus \{C\}$ 中的 M -交错圈都不相交。令 $\mathcal{A}' = (\mathcal{A} \setminus \{C\}) \cup \{h\}$,则 \mathcal{A}' 仍是一个独立 M -交错圈的集合,且 $|\mathcal{A}'| = |\mathcal{A}|$,但是 \mathcal{A}' 中的 M -交错六边形比 \mathcal{A} 中多一个,这与 \mathcal{A} 中包含 M -交错六边形个数的最大性矛盾。因此 \mathcal{A} 中只有 M -交错六边形,根据定理 1 有 $h(H, M) \leq f(H, M) = |\mathcal{A}| \leq h(H, M)$ 。故 $f(H, M) = h(H, M)$ 。

利用文献[18]给出的递推公式,可以得到 7 个苯环生成的所有 118 个 cata-型六角系统的自由度,见表 1。为了讨论 7 个苯环生成的 peri-型六角系统,首先引入定理 3。

表 1 7 个苯环生成的六角系统的自由度列表

Table 1 List of degrees of freedom of hexagonal systems generated by seven benzene rings

强迫多项式	IDF	强迫多项式	IDF
$F(H_1, x) = 8x$	8	$F(H_{121}, x) = 12x^3 + 3x^2$	42
$F(H_2, x) = 12x^2 + x$	25	$F(H_{123}, x) = 16x^3 + 4x^2$	56
$F(H_3, x) = 15x^2 + x$	31	$F(H_{125}, x) = 24x^3$	72
$F(H_4, x) = 17x^2$	34	$F(H_{127}, x) = 9x^2$	18
$F(H_6, x) = 16x^2 + x$	33	$F(H_{130}, x) = 16x^2$	32
$F(H_7, x) = 19x^2$	38	$F(H_{132}, x) = 12x^2$	24
$F(H_9, x) = 16x^3 + 6x^2$	60	$F(H_{134}, x) = 18x^3 + 3x^2$	60
$F(H_{11}, x) = 16x^3 + 7x^2$	62	$F(H_{138}, x) = 12x^3 + 6x^2$	48
$F(H_{15}, x) = 16x^3 + 4x^2$	56	$F(H_{139}, x) = 15x^2$	30
$F(H_{17}, x) = 18x^3 + 5x^2$	64	$F(H_{141}, x) = 16x^3 + 2x^2 + x$	53
$F(H_{19}, x) = 22x^3 + 3x^2$	72	$F(H_{142}, x) = 22x^3 + x$	67
$F(H_{23}, x) = 18x^3 + 7x^2$	68	$F(H_{143}, x) = 24x^4 + 4x^3 + 2x^2$	112
$F(H_{26}, x) = 18x^3 + 6x^2$	66	$F(H_{144}, x) = 24x^4 + 4x^3 + 3x^2$	114
$F(H_{28}, x) = 24x^3 + 3x^2$	78	$F(H_{145}, x) = 24x^4 + 5x^2$	106
$F(H_{32}, x) = 28x^3 + x^2$	86	$F(H_{146}, x) = 16x^4 + 8x^3 + 4x^2$	96
$F(H_{38}, x) = 16x^4 + 12x^3 + x^2$	102	$F(H_{147}, x) = 18x^3 + 5x^2$	64
$F(H_{41}, x) = 22x^3 + 4x^2$	74	$F(H_{148}, x) = 16x^3 + 7x^2$	62
$F(H_{45}, x) = 16x^4 + 14x^3 + x^2$	108	$F(H_{149}, x) = 16x^4 + 12x^3 + x^2$	102

表1(续)

强迫多项式	IDF	强迫多项式	IDF
$F(H_{53}, x) = 30x^3$	90	$F(H_{150}, x) = 24x^3 + x$	73
$F(H_{59}, x) = 16x^4 + 18x^3$	118	$F(H_{152}, x) = 24x^3 + 2x^2$	76
$F(H_{68}, x) = 20x^3 + x$	61	$F(H_{153}, x) = 16x^3 + 4x^2 + x$	57
$F(H_{69}, x) = 24x^3 + x$	73	$F(H_{154}, x) = 16x^3 + 5x^2$	58
$F(H_{70}, x) = 20x^3 + 4x^2$	68	$F(H_{156}, x) = 22x^3 + 2x^2$	70
$F(H_{73}, x) = 24x^3 + 2x^2$	76	$F(H_{157}, x) = 16x^4 + 10x^3 + x$	95
$F(H_{75}, x) = 24x^4 + 4x^3 + 2x^2$	112	$F(H_{159}, x) = 16x^4 + 8x^3 + 3x^2$	94
$F(H_{76}, x) = 27x^3 + 2x^2$	85	$F(H_{160}, x) = 22x^3 + 3x^2$	72
$F(H_{77}, x) = 27x^3 + x$	82	$F(H_{163}, x) = 16x^4 + 10x^3 + 2x^2$	98
$F(H_{78}, x) = 24x^4 + 4x^3 + 4x^2$	116	$F(H_{168}, x) = 12x^3 + 9x^2$	54
$F(H_{84}, x) = 24x^4 + 10x^3$	126	$F(H_{169}, x) = 17x^2$	34
$F(H_{89}, x) = 24x^4 + 6x^3 + 3x^2$	120	$F(H_{171}, x) = 20x^3 + 4x^2$	68
$F(H_{90}, x) = 24x^4 + 8x^3 + x^2$	122	$F(H_{176}, x) = 16x^3 + 6x^2$	60
$F(H_{95}, x) = 31x^3$	93	$F(H_{178}, x) = 20x^3 + 3x^2$	66
$F(H_{98}, x) = 24x^4 + 6x^3 + 2x^2$	118	$F(H_{181}, x) = 14x^2 + x$	29
$F(H_{100}, x) = 24x^4 + 4x^3 + 3x^2$	114	$F(H_{182}, x) = 12x^3 + 6x^2 + x$	49
$F(H_{101}, x) = 24x^4 + 12x^3$	132	$F(H_{183}, x) = 13x^2 + x$	27
$F(H_{106}, x) = 32x^5 + 8x^3 + x^2$	186	$F(H_{184}, x) = 8x^3 + 7x^2 + x$	39
$F(H_{109}, x) = 32x^4 + 3x^2$	134	$F(H_{185}, x) = 8x^3 + 10x^2$	44
$F(H_{111}, x) = 32x^4 + 4x^3 + x^2$	142	$F(H_{186}, x) = 22x^3 + x$	67
$F(H_{114}, x) = 32x^4 + 6x^3$	146	$F(H_{187}, x) = 20x^3 + x^2 + x$	63
$F(H_{116}, x) = 16x^4 + 19x^3$	121	$F(H_{188}, x) = 16x^4 + 4x^3 + 5x^2$	86
$F(H_{118}, x) = 32x^5 + 8x^3$	184	$F(H_{189}, x) = 12x^3 + 8x^2$	52
$F(H_{119}, x) = 16x^4 + 8x^3 + x^2$	90	$F(H_{190}, x) = 15x^3 + 5x^2$	55

定理3^[8] 设 G_1, G_2, \dots, G_k 是图 G 的连通分支或者基本分支, 则 $F(G, x) = \prod_{i=1}^k F(G_i, x)$ 。

例1 附录图2中 H_{138} 有禁止边, 删去禁止边后, 得到其2个基本分支, 即由六边形 h_4, h_5, h_6, h_7 生成的一个平行四边形六角系统 $P_{2 \times 2}$ 和六边形 h_1, h_2 构成的一个六角链 L_2 。根据定理3, 结合文献[9]的结论, 可得

$$F(H_{138}, x) = F(P_{2 \times 2}, x) \times F(L_2, x) = (4x^2 + 2x) \times 3x = 12x^3 + 6x^2。$$

因此 $\Phi(H_{138}) = F(H_{138}, 1) = 18$, $IDF(H_{138}) = \frac{d}{dx} F(H_{138}, x) |_{x=1} = 48$ 。

例2 附录图2中 H_{182} 无禁止边, 根据六边形 h_4 的边 e 是否属于某个完美匹配, 可以把 $\mathcal{M}(H_{182})$ 划分成2个子集: $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{182}) : e \notin M\}$ 和 $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{182}) : e \in M\}$ 。设 $M \in \mathcal{M}_1$, 则边 e 的2条邻接边都是强迫边, 因此这样的 M 仅有一个, 且 $f(H_{182}, M) = 1$ 。若 $M \in \mathcal{M}_2$, 把六边形 $h_1, h_2, h_3, h_5, h_6, h_7$ 构成的六角链记为 L_6 , 则 M 在 L_6 上的限制是 L_6 的一个完美匹配, 且 H_{182} 中任一包含最多独立 M -交错六边形的集合都不包含 h_4 。根据定理2, \mathcal{M}_2 中所有完美匹配对强迫多项式的贡献是 $F(L_6, x) = 12x^3 + 6x^2$, 由式(2)知

$$F(H_{182}, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{f(H_{182}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{f(H_{182}, M)} = 12x^3 + 6x^2 + x。$$

可得 $\Phi(H_{182}) = F(H_{182}, 1) = 19$, $IDF(H_{182}) = \frac{d}{dx} F(H_{182}, x) |_{x=1} = 49$ 。

例3 附录图2中 H_{185} 无禁止边, 不难验证六边形 h_4 的2条竖直边 e_1 和 f_1 中有且仅有一条属于某个完美匹配, 把 $\mathcal{M}(H_{185})$ 划分成2个子集: $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : e_1 \in M\}$ 和 $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : f_1 \in M\}$ 。根据边 e_2, e_3 是否属于某个完美匹配, 可将 \mathcal{M}_1 进一步划分为4个子集: $\mathcal{M}_{11} = \{M \in \mathcal{M}_1 : e_2, e_3 \in M\}$, $\mathcal{M}_{12} = \{M \in \mathcal{M}_1 : e_2, e_3 \notin M\}$, $\mathcal{M}_{13} = \{M \in \mathcal{M}_1 : e_2 \in M, e_3 \notin M\}$, $\mathcal{M}_{14} = \{M \in \mathcal{M}_1 : e_2 \notin M, e_3 \in M\}$ 。若 $M \in \mathcal{M}_{11}$, 则 $\{h_1, h_4, h_7\}$ 是 H_{185} 中一个最大独立 M -交错六边形集合, 且这样的完美匹配有4个。根据定理2, \mathcal{M}_{11} 中完美匹配对强迫多项式的贡献是 $4x^3$ 。若 $M \in \mathcal{M}_{12}$, 则 $\{h_3, h_6\}$ 是一个最大独立 M -交错六边形集合, 且这样的完美匹配只有1个。因此 \mathcal{M}_{12} 中完美匹配对强迫多项式的贡献是 x^2 。若 $M \in \mathcal{M}_{13}$, 则 $\{h_3, h_7\}$ 是一个最大独

立 M -交错六边形集合,且这样的完美匹配只有 2 个。于是 \mathcal{M}_{13} 中完美匹配对强迫多项式的贡献是 $2x^2$ 。由 e_2 和 e_3 的对称性知, \mathcal{M}_{14} 中完美匹配对强迫多项式的贡献也是 $2x^2$ 。因此

$$\sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{f(H_{185}, M)} = \sum_{M \in \mathcal{M}_{11}} x^{f(H_{185}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_{12}} x^{f(H_{185}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_{13}} x^{f(H_{185}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_{14}} x^{f(H_{185}, M)} = 4x^3 + 5x^2。$$

再由 e_1 和 f_1 的对称性,可得 $F(H_{185}, x) = 2 \times (4x^3 + 5x^2) = 8x^3 + 10x^2$ 。故 $\Phi(H_{185}) = F(H_{185}, 1) = 18$,

$$\text{IDF}(H_{185}) = \frac{d}{dx} F(H_{185}, x) \Big|_{x=1} = 44。$$

文献[8]通过枚举得到了 $F(H_{190}, x) = 15x^3 + 5x^2$ 。除六苯并苯 H_{190} 以外,利用定理 2、3,类似于例 1、2 和 3 的计算方法,可以得到 7 个苯环生成的所有六角系统的自由度,见表 1,其中下面同一括号内六角系统的强迫多项式相等: $\{H_4, H_5\}$ 、 $\{H_7, H_8\}$ 、 $\{H_9, H_{10}\}$ 、 $\{H_{11}, H_{12}, H_{13}, H_{14}\}$ 、 $\{H_{15}, H_{16}\}$ 、 $\{H_{17}, H_{18}\}$ 、 $\{H_{19}, H_{20}, H_{21}, H_{22}\}$ 、 $\{H_{23}, H_{24}, H_{25}\}$ 、 $\{H_{26}, H_{27}\}$ 、 $\{H_{28}, H_{29}, H_{30}, H_{31}, H_{71}, H_{72}\}$ 、 $\{H_{32}, H_{33}, H_{34}, H_{35}, H_{36}, H_{37}, H_{67}\}$ 、 $\{H_{38}, H_{39}, H_{40}\}$ 、 $\{H_{41}, H_{42}, H_{43}, H_{44}\}$ 、 $\{H_{45}, H_{46}, H_{47}, H_{48}, H_{49}, H_{50}, H_{51}, H_{52}\}$ 、 $\{H_{53}, H_{54}, H_{55}, H_{56}, H_{57}, H_{58}, H_{80}, H_{81}, H_{82}, H_{83}\}$ 、 $\{H_{59}, H_{60}, H_{61}, H_{62}, H_{63}, H_{64}, H_{65}, H_{66}\}$ 、 $\{H_{73}, H_{74}\}$ 、 $\{H_{78}, H_{79}\}$ 、 $\{H_{84}, H_{85}, H_{86}, H_{87}, H_{88}\}$ 、 $\{H_{90}, H_{91}\}$ 、 $\{H_{89}, H_{92}, H_{93}, H_{94}\}$ 、 $\{H_{95}, H_{96}, H_{97}\}$ 、 $\{H_{98}, H_{99}\}$ 、 $\{H_{101}, H_{102}, H_{103}, H_{104}, H_{105}, H_{107}, H_{108}\}$ 、 $\{H_{109}, H_{110}\}$ 、 $\{H_{111}, H_{112}, H_{113}\}$ 、 $\{H_{114}, H_{115}\}$ 、 $\{H_{116}, H_{117}\}$ 、 $\{H_{119}, H_{120}\}$ 、 $\{H_{121}, H_{122}\}$ 、 $\{H_{123}, H_{124}\}$ 、 $\{H_{125}, H_{126}\}$ 、 $\{H_{127}, H_{128}, H_{129}\}$ 、 $\{H_{130}, H_{131}\}$ 、 $\{H_{132}, H_{133}\}$ 、 $\{H_{134}, H_{135}, H_{136}, H_{137}\}$ 、 $\{H_{139}, H_{140}\}$ 、 $\{H_{146}, H_{151}\}$ 、 $\{H_{152}, H_{155}\}$ 、 $\{H_{154}, H_{175}, H_{180}\}$ 、 $\{H_{156}, H_{158}\}$ 、 $\{H_{159}, H_{161}, H_{162}, H_{167}\}$ 、 $\{H_{160}, H_{165}, H_{166}\}$ 、 $\{H_{163}, H_{164}\}$ 、 $\{H_{168}, H_{170}\}$ 、 $\{H_{171}, H_{172}, H_{173}, H_{174}\}$ 、 $\{H_{176}, H_{177}\}$ 、 $\{H_{178}, H_{179}\}$ 。

3 7 个苯环生成的六角系统的反自由度

设 M 是图 G 的一个完美匹配,若图 G 中的 2 个 M -交错圈不交或仅交于 M 中边,则称这 2 个 M -交错圈是相容的。令 $c'(M)$ 表示 G 中相容 M -交错圈的最大个数,对平面二部图有下面的极大极小定理。

定理 4^[14] 设 M 是平面二部图 G 中的一个完美匹配,则 $af(G, M) = c'(M)$ 。

设 M 是平面图 G 中的一个完美匹配, M -交错圈集 \mathcal{C} 称作是相容的,如果 \mathcal{C} 中任意 2 个 M -交错圈都是相容的。相容 M -交错圈集 \mathcal{C} 中 2 个圈 C_1 和 C_2 称作是交叉的,如果 C_1 和 C_2 有一条 M 中的公共边 e ,且 C_1 经由边 e 从 C_2 外部进入 C_2 的内部。如果 \mathcal{C} 中任意 2 个圈都不是交叉的,那么称其为非交叉的相容 M -交错圈集。

图 3(a) 是三亚苯的分子图,其中粗边集合 M 是一个完美匹配。注意到 M -交错圈 $C_1 = v_1 v_2 v_3 v_4 v_9 u_9 u_4 u_3 u_2 u_1 v_1$ 和 $C_2 = v_3 v_4 v_5 v_6 v_7 v_8 v_9 u_9 u_8 u_7 u_6 u_5 u_4 u_3 v_3$ 是 2 个交叉的相容 M -交错圈,而三亚苯的边界和六边形 h_2 是 2 个非交叉的相容 M -交错圈。实际上,平面二部图中任一相容交错圈集都可以转化为势相同的非交叉相容交错圈集,结合定理 4,有下面的推论。

推论 1^[14] 设 M 是平面二部图 G 的一个完美匹配,则存在势最大的非交叉相容 M -交错圈集 \mathcal{B} 使得 $af(G, M) = |\mathcal{B}|$ 。

设 \mathcal{B} 是六角系统 H 中依赖于完美匹配 M 的非交叉相容 M -交错圈集,对任意的 M -交错圈 $C \in \mathcal{B}$,用 $I(C)$ 表示 C 内部包含的六边形个数,定义指标 $I(\mathcal{B}) = \sum_{C \in \mathcal{B}} I(C)$ 。为了叙述方便,下面将图 3(a) 中三亚苯的边界构成的交错圈称为 T_3 -型交错圈。

定理 5 设 H 是一个由 7 个苯环生成的六角系统, M 是 H 的一个完美匹配,则存在一个势最大的非交叉相容 M -交错圈集 \mathcal{B} 使得 \mathcal{B} 中的 M -交错圈要么是交错六边形,要么是 T_3 -型交错圈。

证明 设 \mathcal{B} 是 H 中一个势最大的非交叉相容 M -交错集,而 $I(\mathcal{B})$ 最小。根据文献[15]中引理 3.2, \mathcal{B} 包含 H 中的任一 M -交错六边形。

设 $C \in \mathcal{B}$ 是一个非六边形圈,则由引理 1 知 C 的内部包含一个 M -交错六边形 h 。因为 \mathcal{B} 包含 H 中的任一 M -交错六边形,所以 C 与 h 相容。假设 C 与 h 不交,则 C 的内部至少要包含 7 个六边形,这表明 H 是六苯并苯 H_{190} (见附录图 2)。此时 C 是 H_{190} 的外部面边界, h 是 h_7 ,而由 h_1, h_3, h_5, h_7 生成的三亚苯的边界是 T_3 -型交错圈 T 。注意到 $\mathcal{B}' = (\mathcal{B} \setminus \{C\}) \cup \{T\}$ 也是一个势最大的非交叉相容的 M -交错圈的集合,但 $I(\mathcal{B}') < I(\mathcal{B})$,矛盾。因此 C 与 h 必有公共边,且 $E(C) \cap E(h) \subseteq M$ 。又因为 M -交错六角形 h 恰好包含 3

条匹配边,所以 $1 \leq |E(C) \cap E(h)| \leq 3$ 。

当 $|E(C) \cap E(h)| = 1$ 时, C 的内部至少包含 6 个六边形,如图 3(b) 所示。因此 H 与 H_{186} 到 H_{190} 其中的一个六角系统同构(见附录图 2)。注意到 C 与 H 中任一 M -交错六边形都相容,可以验证 C 必是 T_3 -型交错圈。

当 $|E(C) \cap E(h)| = 2$ 时, C 的内部至少包含 5 个六边形,如图 3(c) 所示。因此 H 与 H_{141} 到 H_{166} 以及 H_{186} 到 H_{190} 其中的一个六角系统同构(见附录图 2),可以验证 C 必是 T_3 -型交错圈。

当 $|E(C) \cap E(h)| = 3$ 时, C 的内部至少包含 4 个六边形,如图 3(d) 所示。因此 H 与包含三亚苯作为子图的一个六角系统同构,即 H_{68} 到 H_{118} , H_{141} 到 H_{167} 以及 H_{186} 到 H_{190} 其中的一个(见附录图 2),可以验证 C 必是 T_3 -型交错圈。

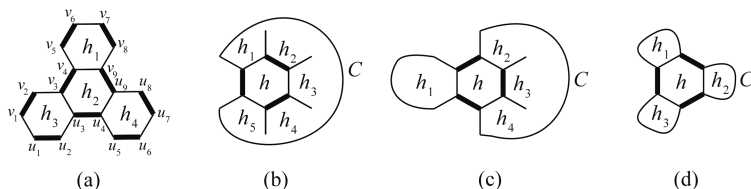


图 3 三亚苯中的 T_3 -型交错圈和定理 5 的证明示意图

Fig.3 T_3 -type alternating cycle in triphenylene and the illustrations for the proof of Theorem 5

根据推论 1 与定理 5,有推论 2。

推论 2 设 M 是 7 个苯环生成的六角系统 H 中的一个完美匹配,则 M 的反强迫数等于 H 中所有 M -交错六边形和 T_3 -型交错圈的总个数。

类似于定理 3,计算有禁止边的六角系统的反自由度,有定理 6。

定理 6^[25] 设图 G 有分支或基本分支 G_1, G_2, \dots, G_k 。那么 $Af(G, x) = \prod_{i=1}^k Af(G_i, x)$ 。

利用推论 2 和定理 6 容易得到六角链的反强迫多项式及其反自由度,见表 2。实际上,文献[16]给出计算六角链的反强迫多项式的递推公式。下面主要讨论有分叉的 cata-型六角系统和 peri-型六角系统。

表 2 7 个苯环生成的六角系统的反自由度列表

Table 2 List of anti-degrees of freedom of hexagonal systems generated by seven benzene rings

反强迫多项式	ADF	反强迫多项式	ADF
$Af(H_1, x) = 6x^5 + 2x$	14	$Af(H_{119}, x) = x^6 + 6x^5 + 11x^4 + 6x^3 + x^2$	100
$Af(H_2, x) = 9x^3 + 3x^2 + x$	34	$Af(H_{121}, x) = x^5 + 5x^4 + 7x^3 + 2x^2$	50
$Af(H_3, x) = 3x^4 + 9x^3 + 3x^2 + x$	46	$Af(H_{123}, x) = 2x^5 + 8x^4 + 8x^3 + 2x^2$	70
$Af(H_4, x) = 4x^4 + 8x^3 + 5x^2$	50	$Af(H_{125}, x) = x^6 + 4x^5 + 9x^4 + 10x^3$	92
$Af(H_6, x) = 4x^4 + 9x^3 + 3x^2 + x$	50	$Af(H_{127}, x) = x^4 + 4x^3 + 4x^2$	24
$Af(H_7, x) = 6x^4 + 8x^3 + 5x^2$	58	$Af(H_{130}, x) = 4x^4 + 8x^3 + 4x^2$	48
$Af(H_9, x) = 2x^5 + 10x^4 + 6x^3 + 4x^2$	76	$Af(H_{132}, x) = 2x^4 + 6x^3 + 4x^2$	34
$Af(H_{11}, x) = 3x^5 + 8x^4 + 9x^3 + 3x^2$	80	$Af(H_{134}, x) = 3x^5 + 9x^4 + 7x^3 + 2x^2$	76
$Af(H_{15}, x) = 12x^4 + 4x^3 + 4x^2$	68	$Af(H_{138}, x) = 2x^5 + 6x^4 + 6x^3 + 4x^2$	60
$Af(H_{17}, x) = 3x^5 + 11x^4 + 5x^3 + 4x^2$	82	$Af(H_{139}, x) = 3x^4 + 8x^3 + 4x^2$	44
$Af(H_{19}, x) = 5x^5 + 9x^4 + 9x^3 + 2x^2$	92	$Af(H_{141}, x) = 2x^5 + 7x^4 + 7x^3 + 3x^2$	65
$Af(H_{23}, x) = 5x^5 + 8x^4 + 9x^3 + 3x^2$	90	$Af(H_{142}, x) = 4x^5 + 9x^4 + 9x^3 + x^2$	85
$Af(H_{26}, x) = 4x^5 + 10x^4 + 6x^3 + 4x^2$	86	$Af(H_{143}, x) = 2x^6 + 10x^5 + 14x^4 + 4x^3$	130
$Af(H_{28}, x) = x^6 + 5x^5 + 10x^4 + 9x^3 + 2x^2$	102	$Af(H_{144}, x) = 3x^6 + 9x^5 + 15x^4 + 4x^3$	135
$Af(H_{32}, x) = 2x^6 + 4x^5 + 12x^4 + 10x^3 + x^2$	112	$Af(H_{145}, x) = x^6 + 11x^5 + 13x^4 + 4x^3$	125
$Af(H_{38}, x) = x^6 + 10x^5 + 7x^4 + 10x^3 + x^2$	116	$Af(H_{146}, x) = 2x^6 + 6x^5 + 12x^4 + 6x^3 + 2x^2$	112
$Af(H_{41}, x) = 6x^5 + 8x^4 + 10x^3 + 2x^2$	96	$Af(H_{147}, x) = 4x^5 + 9x^4 + 7x^3 + 3x^2$	83
$Af(H_{45}, x) = 3x^6 + 6x^5 + 13x^4 + 8x^3 + x^2$	126	$Af(H_{148}, x) = 4x^5 + 7x^4 + 9x^3 + 3x^2$	81
$Af(H_{53}, x) = 2x^6 + 6x^5 + 10x^4 + 12x^3$	118	$Af(H_{149}, x) = 2x^6 + 8x^5 + 10x^4 + 8x^3 + x^2$	118
$Af(H_{59}, x) = x^7 + 2x^6 + 8x^5 + 14x^4 + 9x^3$	142	$Af(H_{150}, x) = x^6 + 4x^5 + 10x^4 + 9x^3 + x^2$	95
$Af(H_{67}, x) = 2x^6 + 4x^5 + 12x^4 + 10x^3 + x^2$	112	$Af(H_{152}, x) = x^6 + 5x^5 + 9x^4 + 10x^3 + x^2$	99
$Af(H_{68}, x) = 13x^4 + 7x^3 + x^2$	75	$Af(H_{153}, x) = 2x^5 + 9x^4 + 7x^3 + 3x^2$	73
$Af(H_{69}, x) = 4x^5 + 13x^4 + 7x^3 + x^2$	95	$Af(H_{156}, x) = x^6 + 3x^5 + 10x^4 + 8x^3 + 2x^2$	89

表 2(续)

反强迫多项式	ADF	反强迫多项式	ADF
$Af(H_{70}, x) = 3x^5 + 10x^4 + 10x^3 + x^2$	87	$Af(H_{157}, x) = 2x^6 + 4x^5 + 15x^4 + 5x^3 + x^2$	109
$Af(H_{71}, x) = 6x^5 + 11x^4 + 9x^3 + x^2$	103	$Af(H_{158}, x) = 5x^5 + 8x^4 + 10x^3 + x^2$	89
$Af(H_{73}, x) = 5x^5 + 12x^4 + 8x^3 + x^2$	99	$Af(H_{159}, x) = x^6 + 8x^5 + 9x^4 + 8x^3 + x^2$	108
$Af(H_{75}, x) = 14x^5 + 10x^4 + 6x^3$	128	$Af(H_{160}, x) = x^6 + 4x^5 + 9x^4 + 9x^3 + 2x^2$	93
$Af(H_{76}, x) = x^6 + 7x^5 + 12x^4 + 8x^3 + x^2$	115	$Af(H_{163}, x) = 2x^6 + 6x^5 + 12x^4 + 8x^3$	114
$Af(H_{77}, x) = x^6 + 6x^5 + 13x^4 + 7x^3 + x^2$	111	$Af(H_{168}, x) = 3x^5 + 6x^4 + 7x^3 + 5x^2$	70
$Af(H_{78}, x) = 2x^6 + 11x^5 + 14x^4 + 4x^3 + x^2$	137	$Af(H_{169}, x) = 5x^4 + 6x^3 + 6x^2$	50
$Af(H_{80}, x) = 2x^6 + 5x^5 + 13x^4 + 10x^3$	119	$Af(H_{171}, x) = x^6 + 3x^5 + 8x^4 + 9x^3 + 3x^2$	86
$Af(H_{84}, x) = 3x^6 + 12x^5 + 13x^4 + 6x^3$	148	$Af(H_{175}, x) = 3x^5 + 7x^4 + 7x^3 + 4x^2$	72
$Af(H_{85}, x) = 4x^6 + 10x^5 + 14x^4 + 6x^3$	148	$Af(H_{176}, x) = 4x^5 + 5x^4 + 10x^3 + 3x^2$	76
$Af(H_{89}, x) = 3x^6 + 10x^5 + 15x^4 + 4x^3 + x^2$	142	$Af(H_{178}, x) = x^6 + 2x^5 + 9x^4 + 8x^3 + 3x^2$	82
$Af(H_{95}, x) = 2x^6 + 7x^5 + 12x^4 + 10x^3$	125	$Af(H_{181}, x) = 3x^4 + 7x^3 + 4x^2 + x$	42
$Af(H_{98}, x) = 2x^6 + 12x^5 + 12x^4 + 6x^3$	138	$Af(H_{182}, x) = 2x^5 + 5x^4 + 9x^3 + 2x^2 + x$	62
$Af(H_{100}, x) = x^6 + 13x^5 + 11x^4 + 6x^3$	133	$Af(H_{183}, x) = 3x^4 + 5x^3 + 5x^2 + x$	38
$Af(H_{101}, x) = x^7 + 3x^6 + 11x^5 + 15x^4 + 6x^3$	158	$Af(H_{184}, x) = x^5 + 4x^4 + 6x^3 + 4x^2 + x$	48
$Af(H_{106}, x) = x^7 + 6x^6 + 27x^5 + 6x^4 + x^3$	205	$Af(H_{185}, x) = 2x^5 + 4x^4 + 6x^3 + 6x^2$	56
$Af(H_{109}, x) = 5x^6 + 9x^5 + 19x^4 + 2x^3$	157	$Af(H_{186}, x) = x^6 + 3x^5 + 9x^4 + 9x^3 + x^2$	86
$Af(H_{111}, x) = x^7 + 4x^6 + 11x^5 + 18x^4 + 3x^3$	167	$Af(H_{187}, x) = x^6 + 2x^5 + 8x^4 + 9x^3 + 2x^2$	79
$Af(H_{114}, x) = x^7 + 5x^6 + 11x^5 + 18x^4 + 3x^3$	173	$Af(H_{188}, x) = x^6 + 6x^5 + 11x^4 + 6x^3 + x^2$	100
$Af(H_{116}, x) = x^7 + 3x^6 + 7x^5 + 17x^4 + 7x^3$	149	$Af(H_{189}, x) = 3x^5 + 5x^4 + 8x^3 + 4x^2$	67
$Af(H_{118}, x) = 8x^6 + 24x^5 + 8x^4$	200	$Af(H_{190}, x) = x^6 + 8x^4 + 6x^3 + 5x^2$	66

例 4 附录图 1 中 H_{84} 是有分叉的 cata-型六角系统。将其完美匹配的集合 $\mathcal{M}(H_{84})$ 划分成 3 个子集:

$$\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{84}) : a \in M\}, \mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{84}) : a, b \notin M\} \text{ 和 } \mathcal{M}_3 = \{M \in \mathcal{M}(H_{84}) : b \in M\}.$$

设 $M \in \mathcal{M}_1$, 则 h_1 是 M -交错六边形。把由六边形 h_3, h_4 和 h_5, h_6, h_7 构成的六角链分别记为 L_2 和 L_3 , 则 h_1, L_2 和 L_3 是相对于 M 的 3 个基本分支, 其中 M 在 h_1 上的限制是固定的。根据定理 6, 可得 \mathcal{M}_1 中的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $x \times Af(L_2, x) \times Af(L_3, x) = x \times (2x + x^2) \times (x + 3x^2 + x^3) = x^6 + 5x^5 + 7x^4 + 2x^3$ 。

设 $M \in \mathcal{M}_2$, 根据边 e 和 f 是否都属于某个完美匹配, 可将 \mathcal{M}_2 进一步划分为 2 个子集, $\mathcal{M}_{21} = \{M \in \mathcal{M}(H_{84}) : e, f \in M\}$ 和 $\mathcal{M}_{22} = \{M \in \mathcal{M}(H_{84}) : e, f \text{ 至少有一个不属于 } M\}$ 。注意到 \mathcal{M}_{21} 中仅有一个完美匹配 M , 恰有 h_2, h_6, h_7 是 M -交错六边形, h_1, h_2, h_3, h_5 生成的三亚苯的边界是一个 T_3 -型交错圈, 由推论 2 知 $af(H, M) = 4$, 故 \mathcal{M}_{21} 中的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 x^4 。 \mathcal{M}_{22} 中恰好有 3 个完美匹配, 且仅有 h_2, h_6, h_7 是交错六边形, 没有 T_3 -型交错圈, 故 \mathcal{M}_{22} 中的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $3x^3$ 。因此 \mathcal{M}_2 中完美匹配对反强迫多项式的总贡献为 $x^4 + 3x^3$ 。

类似于上述 2 种情况的讨论, 可计算得到 \mathcal{M}_3 中完美匹配对反强迫多项式的总贡献为 $2x^6 + 7x^5 + 5x^4 + x^3$ 。因此

$$Af(H_{84}, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{af(H_{84}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{af(H_{84}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_3} x^{af(H_{84}, M)} = 3x^6 + 12x^5 + 13x^4 + 6x^3.$$

完美匹配数 $\Phi(H_{84}) = Af(H_{84}, 1) = 34$, $ADF(H_{84}) = \frac{d}{dx} Af(H_{84}, x) |_{x=1} = 148$ 。

类似于例 4 的计算方法, 可以得到其余 cata-型六角系统的反强迫多项式及其反自由度, 见表 2。

例 5 附录图 2 中 H_{119} 是 peri-型六角系统, 其中虚线边是 H_{119} 的禁止边, 由六边形 h_1, h_2, h_3 和 h_5, h_6, h_7 分别生成 2 个同构的 cata-型基本分支。根据定理 6 可得

$$Af(H_{119}, x) = (x^3 + 3x^2 + x)^2 = x^6 + 6x^5 + 11x^4 + 6x^3 + x^2.$$

因此 $\Phi(H_{119}) = Af(H_{119}, 1) = 25$, $ADF(H_{119}) = \frac{d}{dx} Af(H_{119}, x) |_{x=1} = 100$ 。

例 6 附录图 2 中 H_{143} 是 peri-型六角系统, 其包含三亚苯作为它的子图。注意到边 a 和 b 不能同时属于 H_{143} 的某个完美匹配, 可以把 $\mathcal{M}(H_{143})$ 划分成 3 个子集: $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{143}) : a \in M\}$, $\mathcal{M}_2 = \{M \in$

$\mathcal{M}(H_{143}) : a, b \notin M$ 和 $\mathcal{M}_3 = \{M \in \mathcal{M}(H_{143}) : b \in M\}$ 。

设 $M \in \mathcal{M}_1$, 则 h_1 是 M -交错六边形。将六边形 h_3, h_4, h_5, h_6, h_7 构成的 cata-型六角系统记为 G_2 , 于是 h_1 和 G_2 是相对于 M 的两个基本分支, 其中 M 在 h_1 上的限制是固定的。根据定理 6, 可得 \mathcal{M}_1 中的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $x \times Af(G_2, x) = x \times (x^5 + 4x^4 + 8x^3 + x^2) = x^6 + 4x^5 + 8x^4 + x^3$ 。

设 $M \in \mathcal{M}_2$, 则 h_2 和 h_5 是 M -交错六边形, 且 h_1, h_2, h_3, h_6 生成的三亚苯产生一个 T_3 -型交错圈。由推论 2 知 $af(H_{143}, M) = 3$, 注意到这样的 M 恰有 2 个, 故 \mathcal{M}_2 中的完美匹配对反强迫多项式的总贡献为 $2x^3$ 。

设 $M \in \mathcal{M}_3$, 则 h_1 仍是 M -交错六边形, 且 h_1 和六边形 h_3, h_4, h_5, h_6, h_7 构成的 cata-型六角系统 G_2 是相对于 M 的 2 个基本分支。注意到, 当边 c 和 d 同时属于 M 时会产生新的 M -交错六边形 h_2 , 此时 h_1, h_2, h_3, h_6 是固定的 4 个 M -交错六边形, h_5 是有 2 种选择的 M -交错六边形, 且没有 T_3 -型交错圈。根据推论 2, 所有这样的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $2x^5$ 。当 c, d 至少有一个不属于 M 时, h_2 一定不是 M -交错六边形, 所有这样的完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $x \times (Af(G_2, x) - 2x^3) = x \times (x^5 + 4x^4 + 8x^3 + x^2 - 2x^3) = x^6 + 4x^5 + 6x^4 + x^3$, 其中 $Af(G_2, x) - 2x^3$ 表示从 G_2 中减去 c 和 d 同时属于 G_2 的某个完美匹配的情形。故 \mathcal{M}_3 中所有完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $x^6 + 6x^5 + 6x^4 + x^3$ 。综上所述,

$$Af(H_{143}, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{af(H_{143}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{af(H_{143}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_3} x^{af(H_{143}, M)} = 2x^6 + 10x^5 + 14x^4 + 4x^3。$$

$$\text{完美匹配数 } \Phi(H_{143}) = Af(H_{143}, 1) = 30, \text{ ADF}(H_{143}) = \frac{d}{dx} Af(H_{143}, x) |_{x=1} = 130。$$

例 7 附录图 2 中 H_{185} 是 peri-型六角系统, 其不包含三亚苯作为它的子图。根据推论 2, H_{185} 的任一完美匹配 M 的反强迫数等于 M -交错六边形的个数。可以把 $\mathcal{M}(H_{185})$ 划分成 2 个子集: $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : a \notin M\}$ 和 $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : a \in M\}$ 。

若 $M \in \mathcal{M}_1$, 则 h_3 是固定的 M -交错六边形, 由六边形 h_6, h_7 构成的线性六角链 L_2 是相应于 M 的基本分支。根据定理 6, \mathcal{M}_1 中所有完美匹配对反强迫多项式的贡献为 $x \times Af(L_2, x) = x \times (2x + x^2) = 2x^2 + x^3$ 。

若 $M \in \mathcal{M}_2$, 根据边 b 和 e_2 是否同时属于某个完美匹配, 可将 \mathcal{M}_2 进一步划分为 2 个子集, $\mathcal{M}_{21} = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : b, e_2 \in M\}$ 和 $\mathcal{M}_{22} = \{M \in \mathcal{M}(H_{185}) : b, e_2 \text{ 至少有一个不属于 } M\}$ 。设 $M \in \mathcal{M}_{21}$, 则 h_1, h_3 是固定的 M -交错六边形, 由六边形 h_6, h_7 构成的六角链是相应于 M 的基本分支。因此 \mathcal{M}_{21} 中仅有 3 个完美匹配, 容易验证 \mathcal{M}_{21} 中的完美匹配对反强迫多项式的总贡献为 $x^5 + x^4 + x^3$ 。设 $M \in \mathcal{M}_{22}$, 则 $h_1, h_2, h_4, h_5, h_6, h_7$ 生成的 peri-型六角系统 H' 是相应于 M 的基本分支。不难计算得 $Af(H', x) = x^5 + 4x^4 + 5x^3 + 5x^2$, 再减去边 b 和 e_2 同时属于 H' 的某个完美匹配的情形, 即 \mathcal{M}_{22} 中所有完美匹配对反强迫多项式的总贡献为 $x^5 + 4x^4 + 5x^3 + 5x^2 - (x^4 + x^3 + x^2) = x^5 + 3x^4 + 4x^3 + 4x^2$ 。由式(3)知

$$Af(H_{185}, x) = \sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{af(H_{185}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{af(H_{185}, M)} = 2x^5 + 4x^4 + 6x^3 + 6x^2。$$

$$\text{完美匹配数 } \Phi(H_{185}) = Af(H_{185}, 1) = 18, \text{ ADF}(H_{185}) = \frac{d}{dx} Af(H_{185}, x) |_{x=1} = 56。$$

类似于上述例子中的讨论, 利用推论 2 和定理 6, 可以计算得到所有 7 个苯环生成的六角系统的反自由度, 见表 2, 其中下面同一括号内六角系统的反强迫多项式相等: $\{H_4, H_5\}, \{H_7, H_8\}, \{H_9, H_{10}\}, \{H_{11}, H_{12}, H_{13}, H_{14}\}, \{H_{15}, H_{16}\}, \{H_{17}, H_{18}\}, \{H_{19}, H_{20}, H_{21}, H_{22}\}, \{H_{23}, H_{24}, H_{25}\}, \{H_{26}, H_{27}\}, \{H_{28}, H_{29}, H_{30}, H_{31}\}, \{H_{32}, H_{33}, H_{34}, H_{35}, H_{36}, H_{37}\}, \{H_{38}, H_{39}, H_{40}\}, \{H_{41}, H_{42}, H_{43}, H_{44}\}, \{H_{45}, H_{46}, H_{47}, H_{48}, H_{49}, H_{50}, H_{51}, H_{52}\}, \{H_{53}, H_{54}, H_{55}, H_{56}, H_{57}, H_{58}\}, \{H_{59}, H_{60}, H_{61}, H_{62}, H_{63}, H_{64}, H_{65}, H_{66}\}, \{H_{71}, H_{72}\}, \{H_{73}, H_{74}\}, \{H_{78}, H_{79}\}, \{H_{80}, H_{81}, H_{82}, H_{83}\}, \{H_{85}, H_{86}, H_{87}, H_{88}\}, \{H_{89}, H_{90}, H_{91}, H_{92}, H_{93}, H_{94}\}, \{H_{95}, H_{96}, H_{97}\}, \{H_{98}, H_{99}\}, \{H_{101}, H_{102}, H_{103}, H_{104}, H_{105}, H_{107}, H_{108}\}, \{H_{109}, H_{110}\}, \{H_{111}, H_{112}, H_{113}\}, \{H_{114}, H_{115}\}, \{H_{116}, H_{117}\}, \{H_{119}, H_{120}\}, \{H_{121}, H_{122}\}, \{H_{123}, H_{124}\}, \{H_{125}, H_{126}\}, \{H_{127}, H_{128}, H_{129}\}, \{H_{130}, H_{131}\}, \{H_{132}, H_{133}\}, \{H_{134}, H_{135}, H_{136}, H_{137}\}, \{H_{139}, H_{140}\}, \{H_{146}, H_{151}\}, \{H_{152}, H_{155}\}, \{H_{153}, H_{154}\}, \{H_{159}, H_{161}, H_{162}, H_{167}\}, \{H_{160}, H_{165}, H_{166}\}, \{H_{163}, H_{164}\}, \{H_{168}, H_{170}\}, \{H_{171}, H_{172}, H_{173}, H_{174}\}, \{H_{175}, H_{180}\}, \{H_{176}, H_{177}\}, \{H_{178}, H_{179}\}。$

参考文献:

- [1] LOVÁSZ L, PLUMMER M D. Matching theory[M]. Providence: AMS Chelsea Publishing, 2009.
- [2] HARARY F, KLEIN D J, ZIVKOVIC T P. Graphical properties of polyhexes: perfect matching vector and forcing[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 1991, 6(1):295-306.
- [3] RANDIĆ M, KLEIN D J. Kekulé valence structures revisited. Innate degrees of freedom of π -electron couplings [J]. Mathematical and Computational Concepts in Chemistry, 1985:274-282.
- [4] KLEIN D J, RANDIĆ M. Innate degree of freedom of a graph[J]. Journal of Computational Chemistry, 1987, 8(4):516-521.
- [5] ADAMS P, MAHDIAN M, MAHMOODIAN E S. On the forced matching numbers of bipartite graphs[J]. Discrete Mathematics, 2004, 281(1/2/3):1-12.
- [6] AFSHANI P, HATAMI H, MAHMOODIAN E S. On the spectrum of the forced matching number of graphs[J]. Australasian Journal of Combinatorics, 2004, 30:147-160.
- [7] KLEIN D J, ROSENFELD V. Forcing, freedom and uniqueness in graph theory and chemistry[J]. Croatica Chemica Acta, 2014, 81:49-59.
- [8] ZHANG Heping, ZHAO Shuang, LIN Ruizhi. The forcing polynomial of catacondensed hexagonal systems[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2015, 73:473-490.
- [9] ZHAO Shuang, ZHANG Heping. Forcing polynomials of benzenoid parallelogram and its related benzenoids[J]. Applied Mathematics and Computation, 2016, 284:209-218.
- [10] ZHAO Shuang, ZHANG Heping. Forcing and anti-forcing polynomials of perfect matchings for some rectangle grids[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2019, 57:202-225.
- [11] DENG Kai, LÜ Huazhong, WU Tingzeng. Forcing and anti-forcing polynomials of a type of polyomino graphs[J]. Computational and Applied Mathematics, 2023, 42(2):91.
- [12] 邓凯. 线性亚苯基系统的强迫和反强迫多项式[J]. 高校应用数学学报 A 辑, 2022, 37(4):491-500.
DENG Kai. Forcing and anti-forcing polynomials of linear phenylene systems[J]. Applied Mathematics A Journal of Chinese Universities (Ser.A), 2022, 37(4):491-500.
- [13] VUKIČEVIĆ D, TRINAJSTIĆ N. On the anti-forcing number of benzenoids[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2007, 42:575-583.
- [14] LEI H C, YEH Y N, ZHANG H P. Anti-forcing numbers of perfect matchings of graphs[J]. Discrete Applied Mathematics, 2016, 202:95-105.
- [15] DENG Kai, ZHANG Heping. Anti-forcing spectra of perfect matchings of graphs[J]. Journal of Combinatorial Optimization, 2017, 33:660-680.
- [16] HWANG H K, LEI H, YEH Y N, et al. Distribution of forcing and anti-forcing numbers of random perfect matchings on hexagonal chains and crowns[EB/OL]. [2015-01-21] (2023-12-07). https://algo.stat.sinica.edu.tw/hk/wp-content/files/2015/01/distribution_of_the_forcing_and_anti-forcing_numbers.pdf.
- [17] DENG Kai, LIU Saihua, ZHOU Xiangqian. Forcing and anti-forcing polynomials of perfect matchings of a pyrene system[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2021, 85:27-46.
- [18] ZHAO Shuang, ZHANG Heping. Anti-forcing polynomials for benzenoid systems with forcing edges[J]. Discrete Applied Mathematics, 2018, 250:342-356.
- [19] CYVIN S J, GUTMAN I. Kekulé structures in benzenoid hydrocarbons[M]. Berlin: Springer, 1988:17.
- [20] DIAS J R. Isomer enumeration of practical benzenoids[J]. Journal of Mathematical Chemistry, 2008, 44:711-724.
- [21] BRUNVOLL J, CYVIN S J, CYVIN B N. Enumeration and classification of benzenoid hydrocarbons [J]. Journal of Computational Chemistry, 1987, 8(3):189-197.
- [22] KNOP J V, SZYMANSKI K, JERICEVIC Z, et al. On the total number of polyhexes[J]. MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 1984, 16:119-134.
- [23] PACHTER L, KIM P. Forcing matchings on square grids[J]. Discrete Mathematics, 1998, 190:290.
- [24] ZHANG Heping, ZHANG Fuji. Plane elementary bipartite graphs[J]. Discrete Applied Mathematics, 2000, 105(1/2/3):294.
- [25] 赵爽. 关于一些图类的强迫与反强迫多项式的研究[D]. 兰州:兰州大学, 2018.
ZHAO Shuang. Research on forcing and anti-forcing polynomials for some classes of graphs[D]. Lanzhou: Lanzhou University, 2018.

附录:

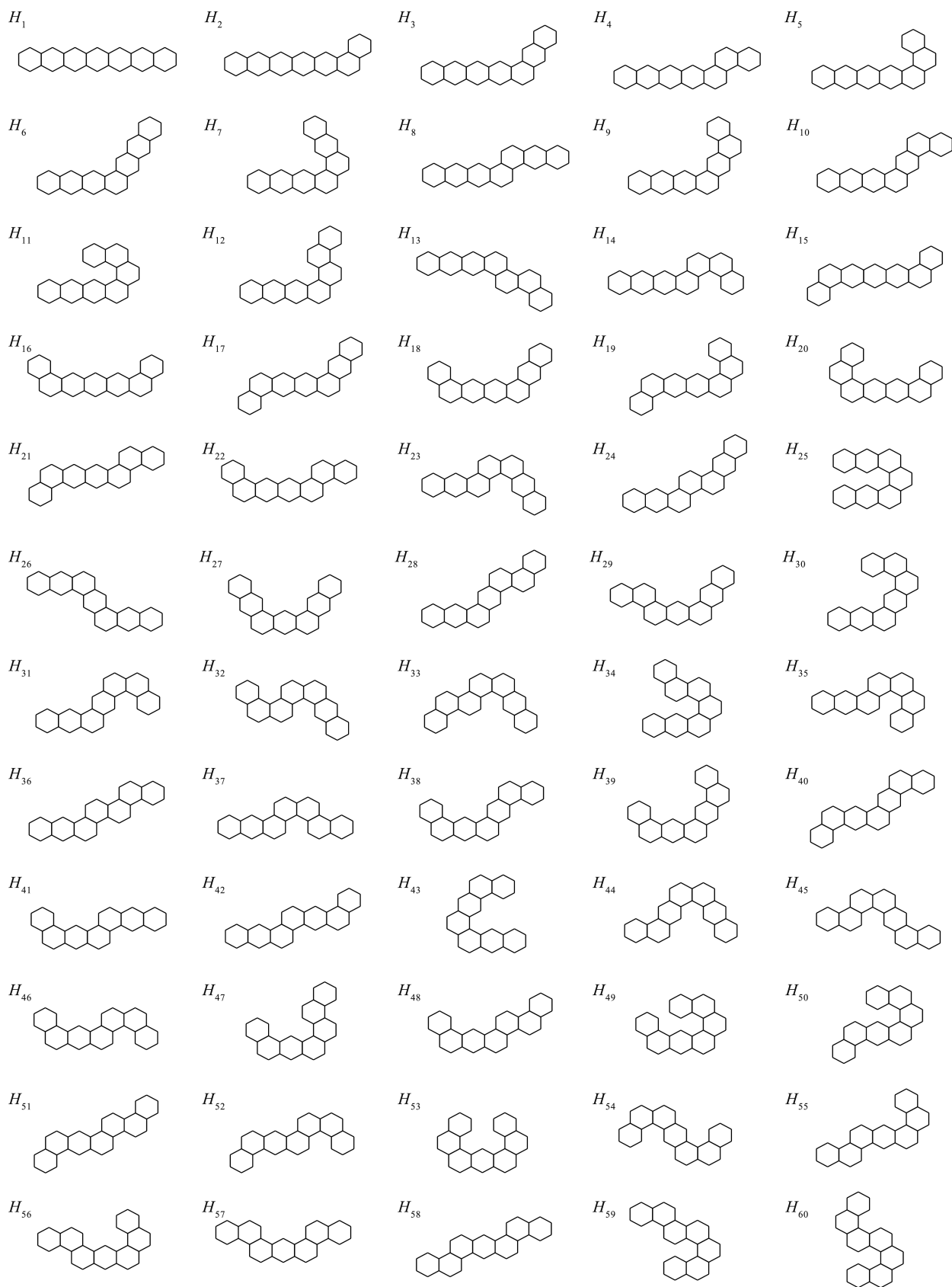


图1 7个苯环生成的 cata-型六角系统

Fig.1 Cata-condensed hexagonal systems generated by seven benzene rings

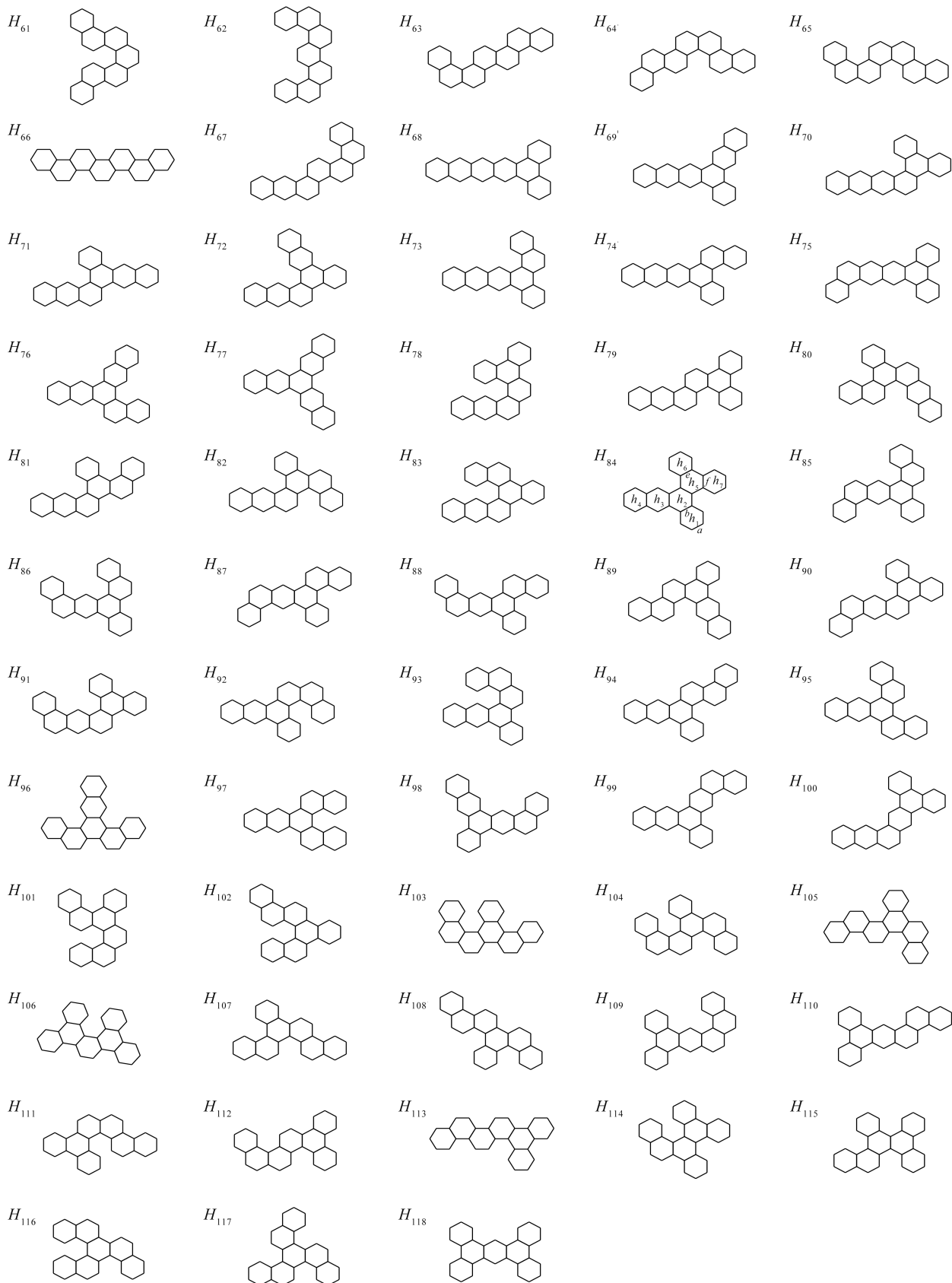


图 1 (续) 7 个苯环生成的 cata-型六角系统
 Fig.1 (continued) Cata-condensed hexagonal systems generated by seven benzene rings

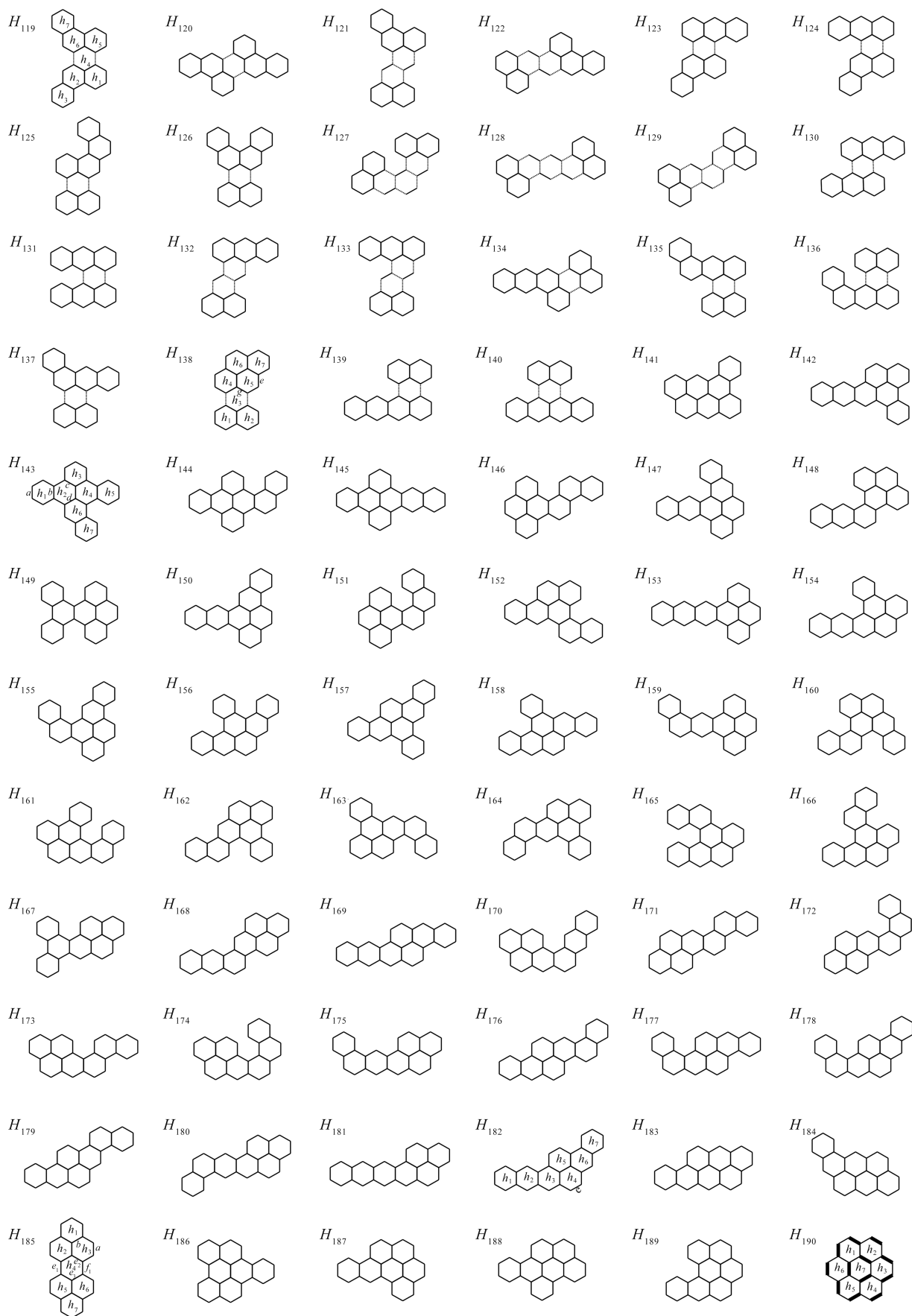


图2 7个苯环生成的 peri-型六角系统

Fig.2 Peri-condensed hexagonal systems generated by seven benzene rings

(编辑:祁业卿)