

Теорема о 4-красках, шестимерные многообразия и комбинаторика фуллеренов

В. М. Бухштабер

МИАН имени В. А. Стеклова,
МГУ имени М. В. Ломоносова,
ИППИ имени А. А. Харкевича

XVI Летняя школа «Современная математика»
Ратмино, июль 2016 г.

- 1 Проблема 4-красок. Постановка проблемы, её история и результаты.
- 2 Конструкция, сопоставляющая гладкое шестимерное многообразие $M(P)$ каждому простому трёхмерному многограннику P , грани которого раскрашены в 4 цвета.
- 3 Проблема классификации односвязных гладких шестимерных многообразий с точностью до диффеоморфизма.
- 4 **Фуллерены** — широкий специальный класс простых трёхмерных многогранников, результаты о комбинаторике которых имеют нетривиальные приложения в квантовой химии, квантовой физике и нанотехнологиях.
- 5 **Теорема.** Два фуллерена P_1 и P_2 комбинаторно эквивалентны тогда и только тогда, когда существует диффеоморфизм многообразий $M(P_1)$ и $M(P_2)$.

- V. M. Buchstaber, T. E. Panov, *Toric Topology*, Mathematical Surveys and Monographs, v. 204, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2015; 518 pp.
- С. П. Новиков, И. А. Тайманов, *Современные геометрические структуры и поля.*, МЦНМО, Москва, 2005, 580 стр.
- Г. М. Циглер, *Теория многогранников.*, Перевод с английского под редакцией Н.П.Долбилина, МЦНМО, Москва, 2014, 419 стр.
- В. М. Бухштабер, Н. Ю. Ероховец, Т. Е. Панов *Алгебра и комбинаторика выпуклых многогранников.*, Приложение к книге Г.Циглера “Теория многогранников”, МЦНМО, Москва, 2014, 420–518, 553–556.

- Э. Э. Лорд, Ф. Л. Маккей, С. Ранганатан, *Новая геометрия для новых материалов*, пер. с англ. Л. П. Мезенцевой под ред. В. Я. Шевченко, В. Е. Дмитриенко, М., Физматлит, 2010, 264 с.
- Е. А. Кац, *Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры*, М., ЛИБРОКОМ, 2014. 296 с.

- 1 Теорема о четырех красках.
- 2 Трехмерные выпуклые многогранники.
- 3 Двойственность Гейла.
- 4 Момент-угол многообразия.
- 5 Кваситорические многообразия.
- 6 Приложение теоремы о четырех красках.
- 7 Фуллерены.

Правильная раскраска карты

- **Картой** области на плоскости будем называть разбиение области на подобласти, каждая из которых имеет ненулевую площадь.
- Раскраска карты называется **правильной**, если любые две области, имеющие границу ненулевой длины, раскрашены в разные цвета.



Картой на двумерной сфере будем называть разбиение ее поверхности на области, каждая из которых имеет ненулевую площадь.

Решение проблемы правильной раскраски любой области на плоскости в k цветов дает решение аналогичной проблемы на двумерной сфере.

Задача

Дана карта на сфере. Найдите условие, при котором ее можно правильно раскрасить в **три** цвета.



Задача*

Докажите, что любую карту на сфере можно правильно раскрасить в **пять** цветов.

Теорема

Любую карту на плоскости можно правильно раскрасить в четыре цвета.

Следствие

Любую карту на двумерной сфере можно правильно раскрасить в четыре цвета.

Теорема о четырех красках была впервые сформулирована 23 октября 1852 года математиком и ботаником Франциском Гутри (Francis Guthrie), который заметил, что ему удалось раскрасить карту графств Англии только **в четыре цвета** так, что никакие два графства, имеющие общий отрезок границы, не были раскрашены в один цвет.



Проблема четырех красок получила широкое признание в 1878 году, когда знаменитый английский математик Артур Кейли (Arthur Cayley) выступил на заседании Лондонского математического общества с докладом, в котором он заявил, что ему не удалось ее решить.

В 1976 году математики Кеннет Аппель (Kenneth Appel) и Вольфганг Хакен (Wolfgang Haken) доказали теорему о четырех красках.

Это была первая крупная проблема в математике, доказательство которой существенно использовало компьютер. На первом шаге авторы, используя логические рассуждения, доказали, что теорема верна для всех карт, если она верна для конкретного конечного набора карт.

Набор включал в себя 1936 случая! Для раскраски этого набора карт и был использован компьютер.

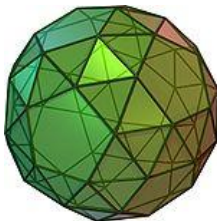
Часть информации и иллюстрации на этих слайдах взяты с сайта Математических Этюдов:
<http://www.etudes.ru/ru/sketches/#iarea>.

Трёхмерные выпуклые многогранники

Выпуклым трёхмерным многогранником называется **ограниченное** множество вида

$$P = \{x \in \mathbb{R}^3 : a_i x + b_i \geq 0, i = 1, \dots, m\}$$

Будем считать, что такое описание **неприводимо**, т. е. удаление любого неравенства изменяет множество P . В этом случае каждая гиперплоскость $\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^3 : a_i x + b_i = 0\}$ определяет двумерную **грань** $F_i = P \cap \mathcal{H}_i$.



Мы будем отождествлять **комбинаторно эквивалентные** многогранники.

Формула Эйлера

Пусть f_0 — число вершин, f_1 — число рёбер и f_2 — число двумерных граней трёхмерного многогранника. Тогда имеет место **формула Эйлера** (1707–1783)

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2$$

Задача

Доказать формулу Эйлера, используя **формулу включения-исключения**:

$$\chi(W_1 \cup W_2) = \chi(W_1) + \chi(W_2) - \chi(W_1 \cap W_2),$$

где $\chi(W) = f_0(W) - f_1(W) + f_2(W)$.

Теорема (Штейниц, 1906 г.)

Целочисленный вектор (f_0, f_1, f_2) является вектором граней **трехмерного** многогранника тогда и только тогда, когда

$$f_0 - f_1 + f_2 = 2, \quad f_2 \leq 2f_0 - 4, \quad f_0 \leq 2f_2 - 4$$

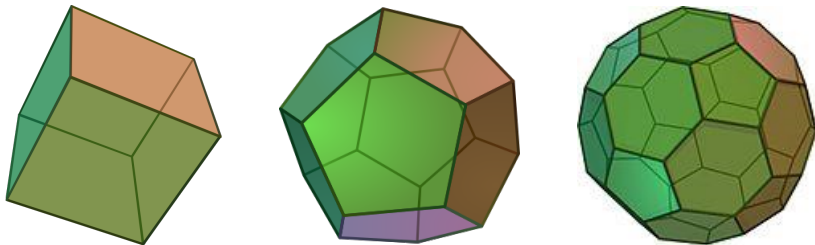
Следствие

$$f_2 + 4 \leq 2f_0 \leq 4f_2 - 8$$

Для многогранников **размерности 4** до сих пор **неизвестны** условия, характеризующие вектор (f_0, f_1, f_2, f_3) его граней.

Определение

Трёхмерный многогранник называется **простым**, если каждая его вершина простая, то есть в ней сходится ровно три ребра.



Из 5 Платоновых тел 3 простых.

Из 13 Архимедовых тел 7 простых.

Следствия формулы Эйлера для простых мн-ков

Пусть p_k — число k -угольных граней многогранника.

Следствие формулы Эйлера

Для любого **простого** многогранника P выполняется **соотношение между числами k -угольников**

$$3p_3 + 2p_4 + p_5 = 12 + \sum_{k \geq 7} (k - 6)p_k$$

Следствие

Если $p_k = 0$ для $k \neq 5, 6$, то $p_5 = 12$.

Не существует простого многогранника только с шестиугольными гранями.

$$f_0 = 2\left(\sum_k p_k - 2\right) \quad f_1 = 3\left(\sum_k p_k - 2\right) \quad f_2 = \sum_k p_k \implies f_0 = 2(f_2 - 2)$$

Диаграммы Шлегеля (Виктор Шлегель, 1843–1905)

Определение

Диаграммой Шлегеля (1886) выпуклого трёхмерного многогранника P называется его **проекция** на плоскость выбранной двумерной грани из точки вне многогранника, близкой к этой грани. Диаграмма зависит от выбора грани.

- Диаграмма Шлегеля представляет собой разбиение выбранной грани на многоугольники.
- Граф рёбер на диаграмме является **полным комбинаторным инвариантом** многогранника P .

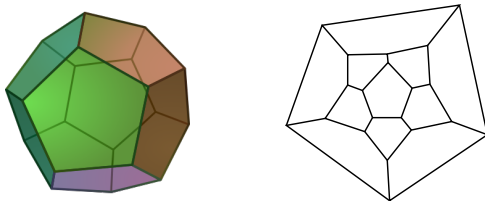


Диаграмма Шлегеля додекаэдра

Набор векторов в \mathbb{R}^n имеет **ранг** r , если порожденное ими линейное подпространство имеет размерность r .

Определение

Пусть $\mathcal{A} = \{a_1, \dots, a_m\} \subset \mathbb{R}^3$ набор ранга 3 и $\mathcal{G} = \{\gamma_1, \dots, \gamma_m\} \subset \mathbb{R}^{m-3}$ набор ранга $m - 3$. Запишем набор \mathcal{A} в виде $(3 \times m)$ -матрицы A и набор \mathcal{G} в виде $((m - 3) \times m)$ -матрицы G .

Наборы \mathcal{A} и \mathcal{G} называются **двойственными по Гейлу**, если $GA^T = 0$.

Пример

Наборы $\mathcal{A} = \{e_1, e_2, e_3, -(e_1 + e_2 + e_3)\} \subset \mathbb{R}^3$ и $\mathcal{G} = \{1, 1, 1, 1\} \subset \mathbb{R}^1$ двойственные по Гейлу, где e_1, e_2, e_3 – вектора стандартного базиса.

Задача

Пусть \mathcal{A} и \mathcal{G} наборы, двойственные по Гейлу. Описать, с какой точностью матрицы A и G определяют друг друга.

От многогранников к квадратам

Рассмотрим многогранник

$$P = \{x \in \mathbb{R}^3 : a_i x + b_i \geq 0, i = 1, \dots, m\}.$$

Выберем набор $\mathcal{G} = \{\gamma_1, \dots, \gamma_m\} \subset \mathbb{R}^{m-3}$, двойственный по Гейлу набору $\mathcal{A} = \{a_1, \dots, a_m\} \subset \mathbb{R}^3$ и положим

$$\mathcal{Z}_P = \{z \in \mathbb{C}^m : \sum_{k=1}^m \gamma_{jk} |z_k|^2 = \delta_j, j = 1, \dots, m-3\}$$

где $\delta = \Gamma b$.

Пересечение эрмитовых квадратик $\mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}^m$ эквивариантно относительно стандартного действия на \mathbb{C}^m стандартного тора

$$\mathbb{T}^m = \{z \in \mathbb{C}^m : |z_k|^2 = 1, k = 1, \dots, m\}.$$

$$P = \{x \in \mathbb{R}^3 : a_i x + b_i \geq 0, i = 1, \dots, m\};$$

$$\mathcal{Z}_P = \{z \in \mathbb{C}^m : \sum_{k=1}^m \gamma_{jk} |z_k|^2 = \delta_j, j = 1, \dots, m-3\}.$$

Теорема

$\mathcal{Z}_P / \mathbb{T}^m = P$. Эквивариантное вложение $\mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}^m$ задает вложение

$$j_P : P \subset \mathbb{R}_{\geq}^m; j_P(x) = (y_1, \dots, y_m),$$

где $y_i = a_i x + b_i$.

Момент-угол многообразием простого многогранника $P \subset \mathbb{R}^3$ будем называть многообразие \mathcal{Z}_P .

Теорема

Следующие условия эквивалентны:

- 1 Многогранник P является простым.
- 2 Пересечение квадратик \mathcal{Z}_P является гладким многообразием размерности $m + 3$.
- 3 Вложение $\mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}^m$ имеет \mathbb{T}^m -эквивариантное тривиальное нормальное расслоение, \mathbb{T}^m -оснащение которого задается матрицей Γ .

Теорема

Представление простого многогранника

$$P = \{x \in \mathbb{R}^3 : a_i x + b_i \geq 0, i = 1, \dots, m\}$$

задает момент-угол многообразие

$$\mathcal{Z}_P = \{z \in \mathbb{C}^m : \sum_{k=1}^m \gamma_{jk} |z_k|^2 = \delta_j, j = 1, \dots, m-3\}$$

однозначно с точностью до линейного изоморфизма пространства \mathbb{R}^n , где набор $\mathcal{G} = \{\gamma_j\}$ является двойственным по Гейлу набору $\mathcal{A} = \{a_j\}$.

Пересечение квадратик \mathcal{Z}_P задает представление простого многогранника P однозначно с точностью до линейного изоморфизма пространства \mathbb{R}^3 .

- 1 Проекция $\pi_Z: \mathcal{Z}_P \rightarrow P = \mathcal{Z}_P/\mathbb{T}^m$ обладает каноническим сечением

$$s_Z: P \rightarrow \mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}^m, s_Z(x) = (z_1, \dots, z_m),$$

где $z_k = \sqrt{a_k x + b_k}$.

- 2 Отображение

$$f_Z: P \times \mathbb{T}^m \rightarrow \mathcal{Z}_P : f_Z(x, t) = t s_Z(x)$$

является эквивариантным и разлагается в композицию с гомеоморфизмом

$$P \times \mathbb{T}^m / \sim \rightarrow \mathcal{Z}_P,$$

где $(x_1, t_1) \sim (x_2, t_2) \Leftrightarrow x_1 = x_2 = x$ и $t_1 s_Z(x) = t_2 s_Z(x)$.

В случае

$$P = \Delta^3 = \{x \in \mathbb{R}^3; x_i \geq 0, i = 1, 2, 3, -(x_1 + x_2 + x_3) + 1 \geq 0\}$$

мы получаем:

$$\mathcal{Z}_P = \{z \in \mathbb{C}^4 : \sum_{k=1}^4 |z_k|^2 = 1\} = S^7.$$

Задача

Описать гомеоморфизм $\Delta^3 \times \mathbb{T}^4 / \sim \rightarrow S^7$.

Задача

Для любого простого трехмерного многогранника P диагональная окружность $S^1 = \{(z, \dots, z) \in \mathbb{T}^m\}$ действует свободно на многообразии \mathcal{Z}_P .

Следствие

Имеет место гладкое многообразие $P\mathcal{Z}_P \subset \mathbb{C}P^{m-1}$.

Задача

Доказать, что для любого простого трехмерного многогранника P существует каноническое гладкое многообразие W_P такое, что $\partial W_P = \mathcal{Z}_P$.

Рассмотрим куб

$$I^3 = \{x \in \mathbb{R}^3; x_i \geq 0, -x_i + 1 \geq 0, i = 1, 2, 3\}.$$

Задача

Описать многообразие $\mathcal{Z}_{I^3} \subset \mathbb{C}^6$.

Задача

Описать гомеоморфизм $I^3 \times \mathbb{T}^6 / \sim \rightarrow \mathcal{Z}_{I^3}$.

Комбинаторные квазиторические данные (P, Λ) состоят из:

- ориентированного простого многогранника P ;
- целочисленной $(3 \times m)$ -матрицы Λ , определяющей так называемое **характеристическое отображение**

$$\ell: \{F_1, \dots, F_m\} \rightarrow \mathbb{Z}^3$$

такое, что для каждой вершины $v = F_{i_1} \cap F_{i_2} \cap F_{i_3}$ столбцы

$$\lambda_{i_1} = \ell(F_{i_1}), \lambda_{i_2} = \ell(F_{i_2}), \lambda_{i_3} = \ell(F_{i_3})$$

матрицы Λ образуют базис группы $\mathbb{Z}^3 \subset \mathbb{R}^3$.

Квазиторические многообразия

Пусть дано характеристическое отображение

$$\ell: \{F_1, \dots, F_m\} \rightarrow \mathbb{Z}^3.$$

Без ограничения общности можно считать что

$$F_1 \cap F_2 \cap F_3 \neq \emptyset, \Lambda = (I_3, \Lambda_*),$$

где I_3 — единичная матрица. Тогда матрица $S = (-\Lambda, I_{m-3})$ задает $(m-3)$ -мерную подгруппу

$$K(\Lambda) = \{(e^{2\pi i \psi_1}, \dots, e^{2\pi i \psi_m}) \in \mathbb{T}^m\}, \quad i = \sqrt{-1},$$

где

$$\psi_k = -\sum_{j=4}^m \lambda_{k,j} \varphi_j, \quad k = 1, 2, 3, \quad \psi_{3+k} = \varphi_k, \quad k = 1, \dots, m-3.$$

Лемма

Группа $K(\Lambda)$ действует свободно на $(m + 3)$ -мерном многообразии \mathcal{Z}_P .

Определение

Квазиторическим многообразием $M = M(P, \Lambda)$ будем называть пространство орбит $\mathcal{Z}_P/K(\Lambda)$.

Это b -мерное гладкое многообразие с гладким действием 3-мерного тора $T^3 = \mathbb{T}^m/K(\Lambda)$.

Задача

Описать матрицы Λ_{Δ^3} и Λ_{I^3} , задающие характеристические отображения для симплекса Δ^3 и куба I^3 .

Задача

Описать квазиторические многообразия $M(P, \Lambda_P)$ для $P = \Delta^3$ и I^3 .

Имеет место последовательность отображений

$$\pi = \pi_2 \cdot \pi_1: \mathcal{Z}_P \rightarrow M(P, \Lambda) \rightarrow P,$$

где π_1 является эквивариантным относительно проекции $\mathbb{T}^m \rightarrow T^3$. Проекция π_2 обладает сечением $s_2 = \pi_1 s_{\mathcal{Z}}$.

Следствие

Имеет место непрерывное T^3 -эквивариантное отображение

$$f_2: P \times T^3 \rightarrow M(P, \Lambda) : f_2(x, t) = t s_2(x),$$

которое задает гомеоморфизм

$$P \times T^3 / \sim \rightarrow M(P, \Lambda),$$

где $(x_1, t_1) \sim (x_2, t_2) \Leftrightarrow x_1 = x_2 = x$ и $t_1 s_2(x) = t_2 s_2(x)$.

Пусть P — некоторый простой трехмерный многогранник. Граница ∂P гомеоморфна сфере S^2 разбитой на многогранники F_1, \dots, F_m , т.е. задает карту.

Из условия простоты многогранника следует, что если $F_i \cap F_j \neq \emptyset$, то $F_i \cap F_j$ является ребром. Следовательно, при любой правильной раскраске карты ∂P и любой вершины $v_k = F_{i_1} \cap F_{i_2} \cap F_{i_3}$ грани $F_{i_1}, F_{i_2}, F_{i_3}$ раскрашены в различные цвета.

Приложение теоремы о четырех красках

Согласно теореме о четырех красках, существует правильная раскраска карты ∂P , т.е. функция

$$\varphi: \{F_1, \dots, F_m\} \rightarrow \{1, 2, 3, 4\}.$$

Возьмем набор $E = \{e_k \mid k = 1, \dots, 4\}$ векторов, где e_k при $k = 1, 2, 3$ представляет собой стандартный вектор решетки $\mathbb{Z}^3 \subset \mathbb{R}^3$ и $e_4 = e_1 + e_2 + e_3$.

Любые 3 вектора из набора E образуют базис в \mathbb{Z}^3 .

Следствие

Для любого простого трехмерного многогранника P функция

$$\ell: \{F_1, \dots, F_m\} \rightarrow \mathbb{Z}^3$$

такая, что $\ell(F_i) = e_{\varphi(F_i)}$, является характеристическим отображением многогранника P .

Теорема

Любой простой трехмерный многогранник P имеет характеристическую функцию, и, следовательно, у него имеется квазиторическое шестимерное многообразие $M^6 = M(P, \Lambda)$.

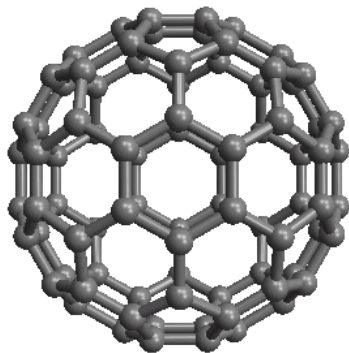
Задача

Докажите, что в любом наборе $\{e_1, \dots, e_5\} \subset \mathbb{Z}^3$ существуют три вектора $e_{i_1}, e_{i_2}, e_{i_3}$, которые *не образуют* базис в \mathbb{Z}^3 .

Фуллереном называется молекула углерода, которая топологически имеет форму сферы и каждый атом которой принадлежит ровно трём углеродным кольцам, состоящим из пяти и шести атомов.



Фуллерен C_{60}



Фуллерен C_{80}

Бакминстерфуллерен C_{60} был открыт химиками-теоретиками Робертом Кёрлом, Гарольдом Крото и Ричардом Смолли в 1985 (Нобелевская премия 1996 года по химии «за открытие фуллеренов»).

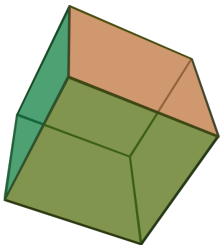


Биосфера Фуллера
Павильон США, Экспо-67
Монреаль, Канада

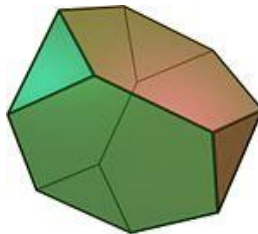
Фуллерены были названы в честь Ричарда Бакминстера Фуллера (1895-1983) — известного американского архитектора и философа. В 1954 году он запатентовал архитектурную конструкцию в форме многогранного купола для перекрытия больших площадей.

Определение

Простой многогранник называется **флаговым**, если любой его набор попарно пересекающихся гиперграней F_{i_1}, \dots, F_{i_k} : $F_{i_s} \cap F_{i_t} \neq \emptyset$, $s, t = 1, \dots, k$, имеет непустое пересечение $F_{i_1} \cap \dots \cap F_{i_k} \neq \emptyset$.



Флаговый многогранник



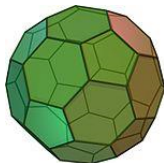
Нефлаговый многогранник

Определение

(Математическим) фуллереном называется простой трёхмерный многогранник, у которого все двумерные грани являются пятиугольниками или шестиугольниками.



Фуллерен C_{60}



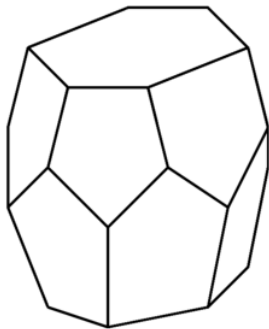
Усечённый икосаэдр

Для любого фуллерена $p_5 = 12$,

$$f_0 = 2(10 + p_6), \quad f_1 = 3(10 + p_6), \quad f_2 = (10 + p_6) + 2$$

Существуют фуллерены с любым значением $p_6 \neq 1$.

Диаграммы Шлегеля фуллеренов



Фуллерен «бочка»

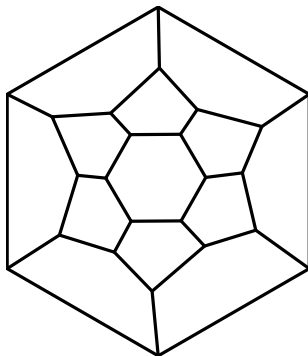
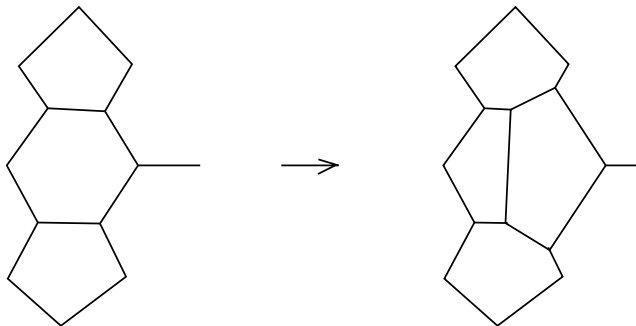
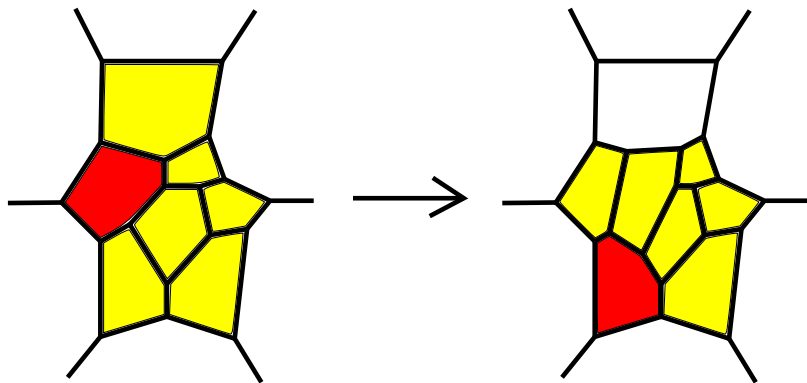


Диаграмма Шлегеля «бочки»

Операция Эндо-Крото



- Операция Эндо-Крото увеличивает число p_6 на 1.



- Операция Эндо-Крото превращает фрагмент слева во фрагмент с такой же границей, состоящий из предыдущего фрагмента и дополнительного (белого) шестиугольника.

Число комбинаторных типов фуллеренов

Комбинаторно неэквивалентные фуллерены с одинаковым числом p_6 называются **комбинаторными изомерами**.

Пусть $F(p_6)$ – число комбинаторных изомеров с данным p_6 . Известно, что $F(p_6) = O(p_6^9)$.

Имеется эффективный алгоритм перечисления комбинаторных типов фуллеренов при помощи суперкомпьютера (Бринкман, Дресс, 1997).

Следующая информация взята из источника House of Graphs, Fullerenes (<http://hog.grinvin.org/Fullerenes>)

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	75
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	46.088.157

Определение

IPR-фуллереном (Isolated Pentagon Rule) называется фуллерен, у которого нет смежных пятиугольников.

- Пусть P – IPR-фуллерен. Тогда $p_6 \geq 20$.
- IPR-фуллерен с $p_6 = 20$ комбинаторно эквивалентен бакминстерфуллерену C_{60} .

Число $F_{IPR}(p_6)$ комбинаторных изомеров IPR-фуллеренов как функция от p_6 .

p_6	20	21	22	23	24	25	26	27	28	...	97
F_{IPR}	1	0	0	0	0	1	1	1	2	...	36.173.081

Гипотеза (Бринкман, Дресс)

Функции $F(p_6)$ и $F_{IPR}(p_6 + 24)$ в некотором смысле являются хорошими асимптотическими приближениями друг друга.

p_6	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	73
$F(p_6)$	1	0	1	1	2	3	6	6	15	...	36.798.433
$F_{IPR}(p_6 + 24)$	0	1	1	1	2	5	7	9	24	...	36.173.081

Теорема

- Каждому фуллерену P соответствует момент-угол многообразие \mathcal{Z}_P размерности $(15 + P_6)$ с действием стандартного тора \mathbb{T}^N , где $N = 12 + P_6$.
- Каждой раскраске Λ карты ∂P , где P – фуллерен, соответствует шестимерное квазиторическое многообразие $M(P, \Lambda)$.

- Комбинаторные свойства многогранников, отличающие фуллерен от произвольного трехмерного многогранника;
- Алгебраические и алгебротопологические методы описания комбинаторики многогранников;
- Результаты, дающие алгебротопологические критерии комбинаторной эквивалентности фуллеренов;
- Результаты, дающие алгебротопологические критерии диффеоморфности гладких односвязных шестимерных многообразий.