

XI. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2006. március 24-25.

APERIODIKUS SEJTRENDSZEREK TOPOLOGIAI JELLEMZÉSE

Bitay Enikő, Réti Tamás

Abstract

Based on the concept of the combinatorial curvature of infinite plan graphs, the topological properties of planar aperiodic cellular systems are investigated. As a result of our investigations the following conjecture is formulated: Let G be an infinite graph obtained by a plan tessellation. Let us assume that the combinatorial curvature $\Phi(X)$ is a non-negative number for each vertex X of G , and the graph G contains vertices of positive combinatorial curvature, as well. Then for the sum of $\Phi(X)$, the inequality $1/6 \leq \sum \Phi(X) < 2$ holds.

Összefoglaló

A kombinatorikus görbület fogalmára alapozott vizsgálati módszereket kiterjesztettük síkbeli aperiodikus celluláris rendszerek topológiai szerkezetének elemzésére. A vizsgálatok eredményeként a következő sejtést fogalmaztuk meg: Legyen G a sík tesszelációjával előállított végtelen gráf. Tételezzük fel továbbá, hogy a G valamennyi X csúcsában a $\Phi(X)$ kombinatorikus görbület nem-negatív szám, és a G gráfnak léteznek olyan csúcsai is, amelyeknek kombinatorikus görbülete pozitív. Ekkor a kombinatorikus görbületek összegére érvényes az $1/6 \leq \sum \Phi(X) < 2$ egyenlőtlenség.

1. Bevezetés

Az elmúlt évtizedben az anyagtudomány számos területén előtérbe került az ún. aperiodikus sejtrendszerek vizsgálata, különös tekintettel a kvázikristályok és nanocsövek mikroszerkezeti modellezésére és szimulációjára. Az esetek többségében a 2-és 3-dimenziós végtelen kiterjedésű sejtrendszereket konvex sokszögek illetve konvex poliéderek (ún. sejtek vagy csempék) egy véges vagy végtelen halmazából konstruálják oly módon, hogy a sejtekkel (csempékkel) a 2- illetve 3-dimenziós teret hézagmentesen és egyrétűen fedik le. A következőkben 2-D, azaz síkbeli végtelen sejtrendszerek topológiai szerkezetének jellemzésére irányuló vizsgálataink néhány eredményét ismertetjük. A vizsgálatokban központi jelentőségű a beágyazott gráfok lokális topológiai jellemzőjeként számon tartott ún. kombinatorikus görbület.

Mint ismeretes, egy tesszelációval generált síkbeli végtelen sejtrendszernek egyértelműen megfeleltethető egy G végtelen síkbeli gráf, az ún. tesszelációs gráf, amellyel kapcsolatban a következő feltételek teljesülését követeljük meg [1-7]:

- (i) A G gráf csúcsai megszámlálható végtelen számosságú halmazt alkotnak;
- (ii) A kombinatorikus poligonokkal reprezentált sejtek (lapok) mindegyike a körlemezzel homeomorf (azaz a körlemezzel topológiailag ekvivalens);
- (iii) A kombinatorikus poligonok (lapok) oldalszáma véges, azaz teljesül a $2 \leq n(f) < \infty$ összefüggés, ahol $n(f)$ egy tetszőleges f lap oldalszáma;
- (iv) Minden él pontosan két sejt (lap) közös éle;
- (v) Minden X csúcs fokszáma véges, vagyis fenn áll a $3 \leq r(X) < \infty$ egyenlőtlenség, ahol az $r(X)$ fokszám az X csúcsra illeszkedő élek számát jelenti.

A síkbeli sejtrendszerek alapvetően két fő csoportba sorolhatók: periodikus sejtrendszerek és aperiodikus sejtrendszerek. Ez utóbbiak további két alcsoportra bonthatók, megkülönböztetve kvázi-periodikus és szabálytalan aperiodikus sejtrendszereket (tesszelációs gráfokat). Mivel a periodikus és kvázi-periodikus sejtrendszerek egyértelműen definiáltak, ebből adódóan egy aperiodikus sejtrendszert szabálytalannak akkor nevezünk, ha az nem periodikus és nem kvázi-periodikus. A további elemzések középpontjában az aperiodikus szabálytalan sejtrendszerek topológiai jellemzése áll, különös tekintettel az ún. kombinatorikus görbületnek, mint lokális topológiai invariánsnak a vizsgálatára.

A következőkben megmutatjuk, hogy az aperiodikus sejtrendszerek számszerű topológiai jellemzésére és kvantitatív kritériumok szerinti minősítésére előnyösen használható a kombinatorikus görbület, illetve ezek függvényeként származtatott mennyiségek.

2. A kombinatorikus görbület értelmezése

Jelölje f a G tesszelációs gráf egy lapját (sejtjét), X egy tetszőleges csúcsát, $r(X)$ pedig az X csúcs fokszámát. Szokásos módon az X csúcs $\Phi(X, G)$ kombinatorikus görbületét

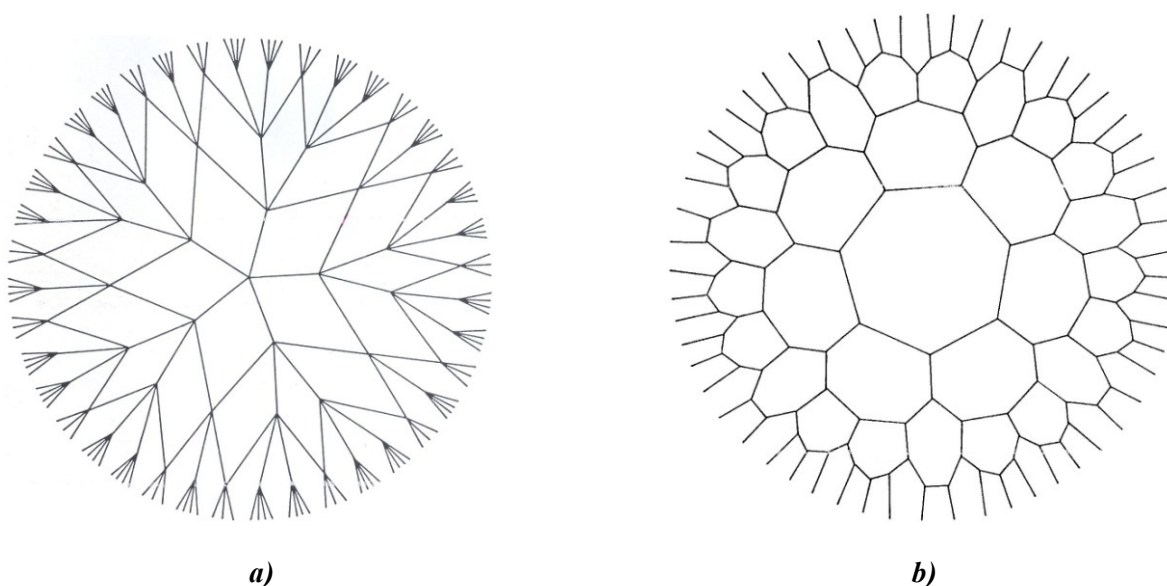
$$\Phi(X, G) = 1 - \frac{r(X)}{2} + \sum_{f \in F(X)} \frac{1}{n(f)}$$

képlettel definiáljuk, ahol $F(X)$ az X csúcsra illeszkedő lapok (sejtek) véges halmaza [1-7]. Tetszőleges G gráfra értelmezhető az $S(G)$ ún. kumulatív görbület

$$S(G) = \sum_{X \in V(G)} \Phi(X, G)$$

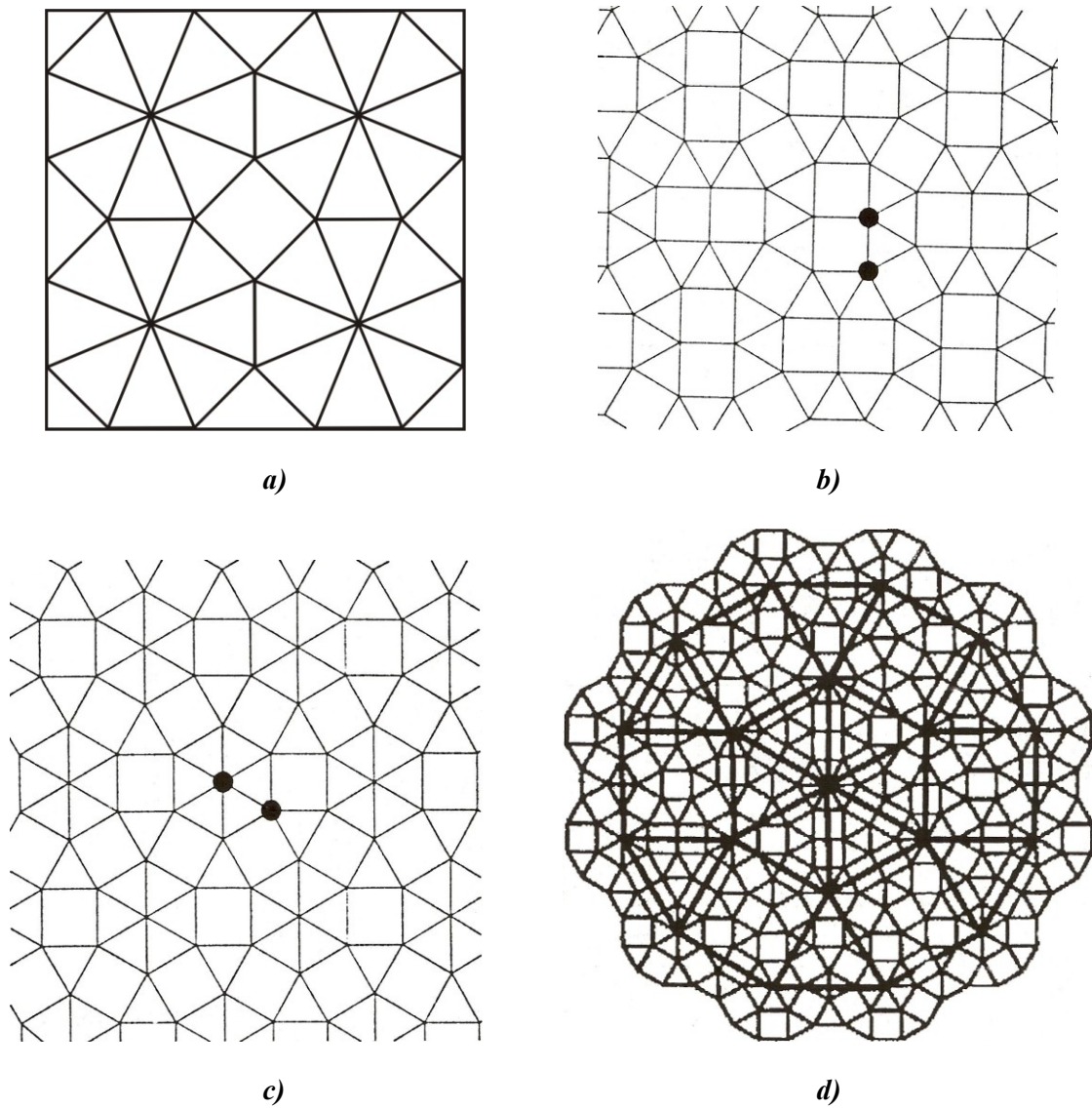
ahol $V(G)$ a G gráf csúcsainak halmaza. Az $S(G)$ mennyiség elvileg egy végtelen tagú összeg, értéke lehet véges vagy végtelen. Mint ismeretes, ha a sejtrendszer periodikus, akkor a hozzátartozó síkbeli gráfra (az egységcellára vonatkoztatva) érvényes a $\chi(G) = S(G) = 0$ összefüggés, ahol $\chi(G)$ az Euler-karakterisztika, amely síkbeli periodikus sejtrendszerekre zérus [8].

A kombinatorikus görbület értéke lehet pozitív, negatív szám vagy zérus. Korábban bizonyították, hogy nem létezik olyan végtelen tesszelációs gráf, amelynek minden csúcsában pozitív a görbület [1,5]. Ezzel szemben léteznek olyan tesszelációs gráfok (sejtrendszerek), amelyekben minden csúcs negatív görbületű. Példák erre az 1. ábrán látható végtelen síkbeli gráfok [8].



1. ábra. Negatív görbületű tesszelációs gráfokkal reprezentált szabálytalan aperiodikus sejtrendszerek

Az 1.a ábrán feltüntetett gráf minden lapja négyszög, minden csúcsa ötödfokú, következésképpen valamennyi csúcsban a görbület értéke $1 - 5/2 + 5/4 = -1/4$. Az 1.b ábrán bemutatott gráf lapjai hétszögek, minden csúcsa harmadfokú (trivalens), a görbület minden csúcsban azonos értékű, nevezetesen $1 - 3/2 + 3/7 = -1/14$. Megjegyezzük, hogy az 1. ábrán látható gráfok olyan „elfajult” sejtrendszerekre példák, amelyeknek szingularitása van a végtelenben [8]. Könnyen belátható, hogy végtelen sok olyan periodikus sejtrendszer létezik, amelyeknél valamennyi csúcs görbülete zérus. Az 2. ábrán négy sejtrendszer látható, ezek lapjai 3- és 4-oldalú sokszögek.



2. ábra. Háromszögek és négyszögek alkotta négy különböző típusú sejtrendszer

Közülük az 1.a, 1.b és 1.c ábra periodikus sejtrendszereket reprezentál. Az 1. ábrán látható 1.b és 1.c sejtrendszerek közös jellemzője, hogy minden csúcsban a görbület zérus. Az 1.a ábrán bemutatott sejtrendszernek pozitív és negatív görbületű, ötöd- és nyolcad-fokú csúcsai vannak, és nincs zérus-görbületű csúcsa. Az 1.d ábrán látható sejtrendszer kvázi-periodikus [9]. Ebben a háromszögek előfordulási gyakorisága $p_3 = 4/(4+\sqrt{3})=0.6978$, a négyszögeké pedig $p_4 = \sqrt{3}/(4+\sqrt{3})=0.3022$. Könnyen igazolható, hogy e kvázi-periodikus sejtrendszerben minden csúcs görbülete zérus.

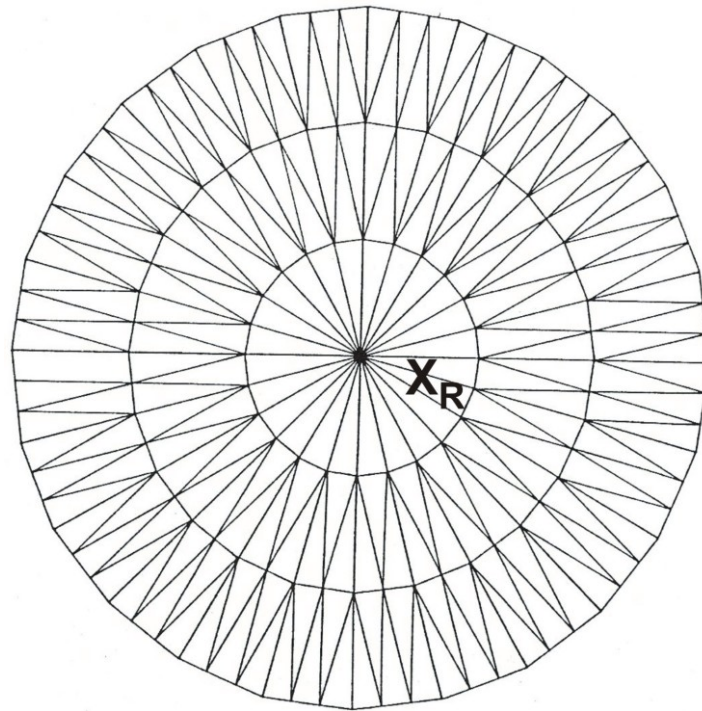
A kombinatorikus görbület definíciójából következik, hogy ha egy csúcs fokszáma 6-nál nagyobb, akkor e csúcs görbülete negatív. Másrészt, amint azt példán is illusztráljuk, léteznek olyan tesszelációs gráfok, amelyeknek pozitív görbületű csúcsaiban a görbület értéke tetszőlegesen kicsiny pozitív szám

lehet. A következőkben aperiodikus szabálytalan sejtrendszereket reprezentáló tesszelációs gráfok egyes speciális tulajdonságú osztályait (részalmazait) vizsgáljuk konkrét példák bemutatásával.

3. Aperiodikus szabálytalan síkbeli sejtrendszerek

3.1. G_R végtelen gráfok osztálya

A G_R gráfok sorozatát, ahol $R \geq 2$ pozitív egész szám, a 3. ábra útmutatása szerint a következő módon generálhatjuk. Kiindulásul tekintsünk az X_R csúcspontot, amelyet a G_R gráf centrum-csúcsának nevezünk. Tegyük fel, hogy a centrumcsúcs éppen R számú egyenlőszárú háromszög közös csúcsa, tehát X_R fokszáma R . Amint a 3. ábrából kitűnik, háromszögeket „gyűrűszerűen” egymás mellé helyezve egy végtelen G_R gráf konstruálható, amelyben minden egyes csúcs az X_R centrum kivételével pontosan 6 háromszög közös csúcsa.



3. ábra. Háromszögek alkotta G_R gráf konstrukciójának elve

Zérus mindazon csúcsok görbülete, amelyben 6 háromszög találkozik. Kivételt képez az X_R centrum, amelynek kombinatorikus görbülete

$$\Phi(X_R, G_R) = 1 - R/6$$

Ebből következik, hogy

$$S(G_R) = \sum_{X \in V(G_R)} \Phi(X, G_R) = \Phi(X_R, G_R) = 1 - R/6$$

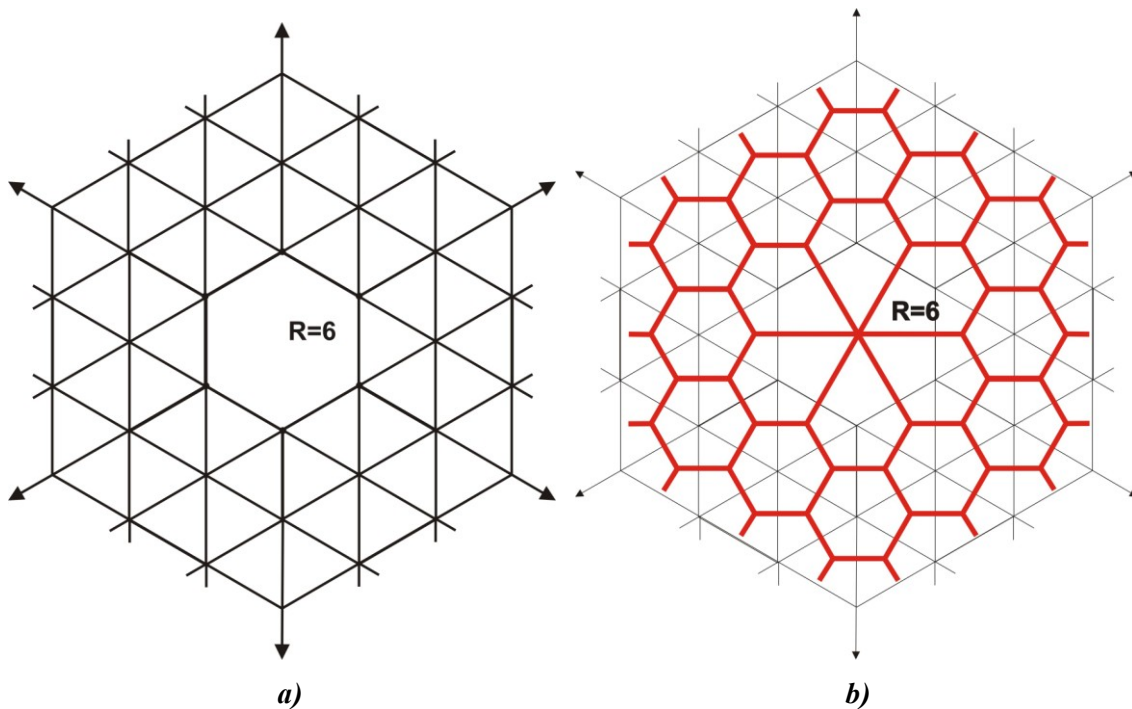
Az R értékétől függően a G_R gráfok három osztályba sorolhatók:

- (i) Ha $R = 2, 3, 4$ vagy 5 , akkor $\Phi(X|G_R, R = 2, 3, 4, 5) \geq 0$, azaz a görbületek értéke nem-negatív szám minden csúcsban. Pozitív görbület kizárólag a centrumcsúcsban, vagyis az $X_{R=2}$, $X_{R=3}$, $X_{R=4}$, illetve az $X_{R=5}$ csúcsokban található. Például a G_5 gráfra vonatkozóan a kumulatív görbületre $S(G_5) = \sum \Phi(X, G_5) = \Phi(X_{R=5}) = 1/6$ adódik eredményül.
- (ii) Ha $R=6$, akkor $\Phi(X|G_6) = \sum \Phi(X, G_6) = 0$, azaz a G_6 gráf minden csúcsának görbülete zérus.
- (iii) Ha $R > 6$ akkor $\Phi(X|G_R, R > 6) \leq 0$, azaz a görbületek értéke nem-pozitív szám minden csúcsban. Negatív görbület kizárólag a centrumcsúcsban van.

Érdekes következményként adódik, hogy ha $R \rightarrow \infty$, akkor $\lim \Phi(X_R | G_R) = -\infty$, ami azt jelenti, hogy a G_R gráfoknak mindig létezik egyetlen olyan csúcsa (az X_R centrum), amelyben a görbület tetszőlegesen kicsiny negatív szám lehet. (Minden más csúcsban a görbület zérus).

3.2. H_R végtelen gráfok osztálya

A H_R gráfok sorozatát, ahol $R \geq 2$ pozitív egész szám, a 4. ábra útmutatása szerint a következő módon konstruáljuk. Kiindulásul tekintsünk egy R -oldalszámú szabályos sokszöget. A 4. ábrán feltüntetett módon helyezzünk a szabályos R -szög köré háromszögeket „gyűrűszerű” elrendezésben. A háromszögekből álló gyűrűk számát fokozatosan növelve egy végtelen H_R gráf adódik eredményül, ez egyetlen R -szögből valamint végtelen sok háromszögből áll.



4. ábra. A H_R végtelen gráf konstrukciójának elve (a) és duális gráfja (b)

A H_R gráf mindazon csúcsaiban, ahol 6 háromszög találkozik, a görbület zérus. Az R -számú többi X_j ($j=1,2,\dots,R$) csúcsban, amelyekben 4 háromszög és egy R -szög találkozik a görbület értéke

$$\Phi(X_j, H_R) = 1/R - 1/6$$

Ebből adódik, hogy a kumulatív görbület

$$S(H_R) = \sum_{X \in V(H_R)} \Phi(X, H_R) = \Phi(X_R, H_R) = 1 - R/6$$

Az R értékétől függően a H_R gráfok három osztályba sorolhatók:

- (i) Ha $R=2,3,4$ vagy 5 , akkor $\Phi(X|H_R, R=2,3,4,5) \geq 0$, azaz a görbületek értéke nem-negatív szám az összes csúcsban. Pozitív görbület kizárólag az R számú X_j ($j=1,2,\dots,R$) csúcsban van.
- (ii) Ha $R=6$ akkor a görbület minden csúcsban zérus, következésképpen $S(H_6) = 0$.
- (iii) Ha $R>6$ akkor $\Phi(X|H_R, R>6) \leq 0$, azaz a görbületek értéke nem-pozitív szám minden csúcsban. Negatív értékű görbület csak az R -számú X_j ($j=1,2,\dots,R$) csúcsban van.

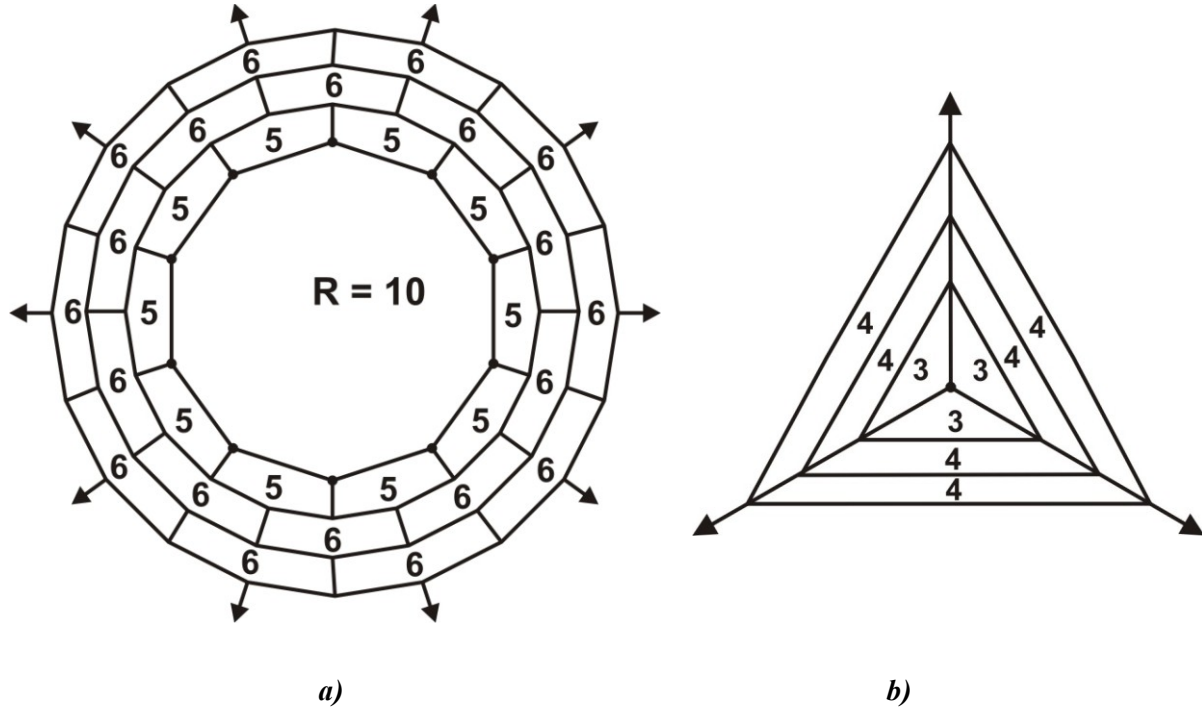
Megjegyezzük, hogy speciális esetként a H_5 gráf kumulatív görbületére $S(H_5) = \sum \Phi(X, H_5) = 1/6$ adódik eredményül. A 4.b ábra a H_6 gráf duális gráfját ábrázolja. Ez utóbbi hat ötszögből és végtelen sok hatszögből áll, és egyaránt vannak pozitív, negatív és zérus-görbületű csúcsai. Könnyen belátható, hogy H_6 duális gráfjának kumulatív görbülete ugyancsak zérus.

3.3. T_R végtelen gráfok osztálya

A végtelen tesszelációs gráfok egy különleges osztályát képezik azok a végtelen síkbeli gráfok, amelyekre az $S(G)=1$ azonosság teljesül. Az ilyen tulajdonságú gráfokat „egység-gráfoknak” nevezzük. A következőkben megmutatjuk, hogy végtelen sok egység-gráf létezik, többek között az ún. T_R gráfok mindegyike egység-gráf. A T_R gráfok sorozatát, ahol $R \geq 2$ pozitív egész szám, az 5. ábra útmutatása szerint a következő módon konstruáljuk. Kiindulásul tekintsünk egy R oldalszámú szabályos sokszöget.

Az 5. ábrán feltüntetett módon a szabályos R -szög köré helyezzünk pontosan R számú ötszöget „gyűrűszerű” elrendezésben. Az ötszögekből képzett gyűrűt a továbbiakban újabb zárt gyűrűk sorozatával vesszük körbe, de ezek a gyűrűk már 6-szögekből állnak. A hatszögek alkotta gyűrűk számát fokozatosan növelve a T_R gráfot kapjuk eredményül. Mint megállapítható, a T_R gráfok egyetlen R -oldalú szabályos sokszögből, valamint R -számú ötszögből és végtelen sok hatszögekből állnak. Valamennyi csúcs harmadfokú, a csúcsokra illeszkedő lapok oldalszámát tekintve a csúcsoknak négy alaptípusa különböztethető meg, ezek a következők: $(5,5,R)$, $(5,5,6)$, $(5,6,6)$ és $(6,6,6)$. A megfelelő

kumulatív görbületeket kiszámítva közvetlenül adódik az $S(T_R)=1$ azonosság. Az R értékétől függően a T_R gráfok az alábbi osztályokba sorolhatók:



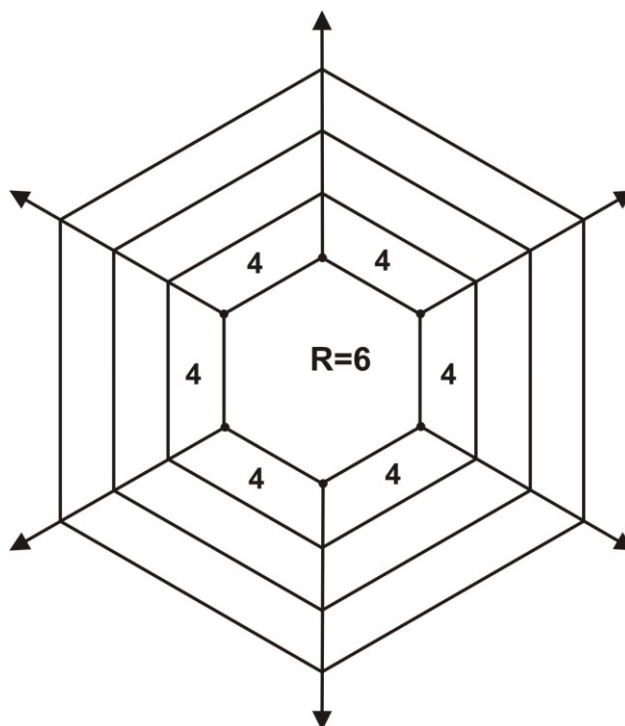
5. ábra A T_R végtelen gráf konstrukciójának elve (a), egy speciális egység gráf (b)

- (i) Ha $R= 2,3,\dots,9$, akkor $\Phi(X|T_R, R=2,3,\dots,9) \geq 0$, tehát a görbületek értéke nem-negatív szám minden csúcsban. Pozitív görbület van pontosan $3R$ számú csúcsban. Például $R=9$ esetében, pontosan 27 olyan csúcsa van a T_9 gráfnak, amelyben a görbület pozitív.
- (ii) Ha $R=10$, akkor $\Phi(X|T_{10}, R=10) \geq 0$, a görbületek értéke nem-negatív szám minden csúcsban. Pozitív görbület pontosan 20 csúcsban van.
- (iii) Ha $R>10$, akkor pozitív, negatív és zérus-értékű görbületek egyaránt előfordulnak. Negatív értékű görbület pontosan az R -számú $(5,5,R)$ típusú csúcsban van, pozitív görbület pedig pontosan $2R$ számú, (az $(5,5,6)$ illetve $(5,6,6)$ típusú) csúcsban van, és minden más csúcsban a görbület zérus.

Az 5.b ábrán egy speciális típusú egység gráf látható, ennek sajátossága, hogy négy pozitív görbületű csúcsa van. A középső csúcsban (ahol 3 háromszög találkozik) a görbület az elméletileg lehetséges maximális értékű, nevezetesen: $1-3/2+3/3 = 1/2$.

3.4. U_R végtelen gráfok osztálya

Az U_R gráfok sorozatát, ahol $R \geq 2$ pozitív egész szám, a 6. ábra útmutatása szerint a következő módon konstruáljuk. Kiindulásul tekintsünk egy R -oldalszámú szabályos sokszöget, amelyet négyszögekből álló gyűrűkkel veszünk körbe. A négyszögek alkotta gyűrűk számát fokozatosan növelve az U_R gráfot kapjuk eredményül. Mint megállapítható, az U_R gráfok egyetlen R -oldalú szabályos sokszögből, valamint végtelen sok négyszögből állnak.



6. ábra Az U_R végtelen gráf konstrukciójának elve

Minden U_R gráfban pontosan R -számú harmadfokú csúcs van, és ezekben egy R -szög és két négyszög található. Ebből adódik, hogy ezen R -számú csúcsban a görbület pozitív, értéke azonos, és $1/R$ -el egyenlő. Az összes többi csúcs negyedfokú, ezekben a görbület zérus, mivel minden ilyen csúcsban négy darab négyszög található. A fenti megfontolásokból közvetlenül adódik, hogy egy U_R gráf minden csúcsának görbülete nem-negatív szám, és minden U_R gráf egység-gráf, amelyre teljesül az $S(U_R)=1$ azonosság. Az U_R gráfok lényeges tulajdonsága: mivel a pozitív görbületű csúcsok R száma tetszőlegesen nagy véges szám lehet, következésképpen R növelésével elérhető, hogy a pozitív görbületű csúcsokban a görbület nagysága ($1/R$) tetszőlegesen kicsiny pozitív szám legyen.

4. Nem-negatív görbületű végtelen síkgráfok jellemzése

Azt a végtelen G tesszelációs gráfot (sejtrendszer), amelyben pozitív és zérus-görbületű csúcsok egyaránt előfordulnak, de negatív görbületű csúcsok nem (következésképpen $S(G) > 0$ teljesül), nem-negatív görbületű gráfnak (NNG-gráfnak) szokás nevezni. A különféle típusú NNG gráfokban

található pozitív görbületű csúcsok lehetséges M számára becslés nem ismert. Azt azonban sikerült igazolnunk az U_R gráfok vizsgálatakor, hogy ezen NNG típusú gráfosztály esetében M értéke tetszőlegesen nagy véges szám lehet. Az NNG gráfokra vonatkozó korábbi vizsgálatok egyik érdekes eredményét a következő sejtés reprezentálja:

1. Sejtés : Ha a G tesszelációs gráf NNG-gráf, akkor ezen G gráfban csak véges sok ($M \geq 1$ egész számú) olyan csúcs létezik, amelyben a kombinatorikus görbület pozitív szám [7].

Tisztázatlan kérdés, hogy milyen nagy lehet egy NNG gráf kumulatív görbületének értéke. Vizsgálataink alapján a következő új sejtést fogalmaztuk meg:

2. Sejtés: Ha egy G tesszelációs gráf NNG gráf, akkor ennek kumulatív görbületére fenn áll a következő egyenlőtlenség: $1/6 \leq \sum \Phi(X) < 2$. Egyelőre még nem sikerült olyan NNC gráfot konstruálni, amelyben kumulatív kombinatorikus görbület értéke 1-nél nagyobb lenne.

Irodalom

- [1] Y. Higuchi: Combinatorial Curvature for Planar Graphs, J. Graph Theory, Vol. 38 (2001) p. 220-229.
- [2] O. Baues and N. Peyerimhoff: Curvature and Geometry of Tesselating Plane Graphs, Discrete Comput. Geom., Vol. 25 (2001) p. 141-159.
- [3] K. Kawarabayashi, M. Plummer and A. Sato: On two equimatchable graph classes, Discrete Mathematics, Vol. 266 (2003) p. 263-274.
- [4] Liang Sun and Xingxing Yu: Positively curved cubic plane graphs are finite, J. Graph Theory, Vol. 47 (2004) p. 241-274.
- [5] M. DeVos and B. Mohar: An analogue of the Descartes-Euler formula for infinite graphs and Higuchi's conjecture, Trans. Amer. Math. Soc. to appear.
- [6] T. Reti, E. Bitay and Zs. Kosztolányi: On the Polyhedral Graphs with Positive Combinatorial Curvature, Acta Polytechnica Hungarica, Vol.2 (2005) p. 19-37.
- [7] B. Chen and G. Chen: Gauss-Bonnet formula, finiteness condition, and characterization for graphs embedded in surfaces, Preprint, submitted in 2005.
- [8] B. Grünbaum and G.C. Shephard: Tilings and Patterns, W.H. Freeman and Company, New York, 1987.
- [9] B. Rubinstein and S.I. Ben-Abraham: The random square-triangle tiling: simulation of growth, Materials Science and Engineering, Vol. 294-296, (2000) p. 418-420.

Dr. Bitay Enikő, tudományos főkutató
Erdélyi Múzeum-Egyesület, Kutatóintézet
Ro-400009 Kolozsvár, Jókai / Napoca u. 2-4.
E-mail: bitay@eme.ro

Dr. Réti Tamás, egyetemi tanár
Budapest Polytechnic, Budapest
H-1081 Budapest, Népszínház u. 8, Hungary
E-mail: Reti.tamas@bgk.bmf.hu