UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA MATEMATIKO
Modul Matematika - 3. stopnja

Jernej Rus

MATEMATIČNO MODELIRANJE PROBLEMOV IZ BIOLOGIJE

Doktorska disertacija

Mentor: prof. dr. Sandi Klavžar
Somentor: prof. dr. Drago Bokal

Ljubljana, 2017

Podpisani Jernej Rus izjavljam:
- da sem doktorsko disertacijo z naslovom Matematično modeliranje problemov iz biologije izdelal samostojno pod mentorstvom prof. dr. Sandija Klavžarja in somentorstvom prof. dr. Draga Bokala;
- da Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani dovoljujem objavo elektronske oblike svojega dela na spletnih straneh.

Ljubljana, 3. 3. 2017 Podpis: ....

Zahvala

Zaradi časa, ki si ji ga žrtvoval, je tvoja vrtnica tako dragocena.
Antoine de Saint-Exupéry

Rad bi se zahvalil vsem, ki vedo, kako dragocena je zame ta "vrtnica".

V prvi vrsti gre zahvala Sandiju Klavžarju, ki me je vpeljal v svet matematičnega raziskovanja, mi svetoval in bil potrpežljiv, ob tem pa vedno znova znal najti dovolj stroge besede spodbude, da sem dobil nov zagon pri raziskovanju in pisanju. Zahvale gredo tudi Dragu Bokalu, Danu Archdeaconu, Gašperju Fijavžu, Luisu Goddynu, Ninu Bašiću, Tomu Boothbyju, Tomu Pisanskemu, Bojanu Moharju, Hehuiju Wuju in Romanu Jerali, ki so me na različne načine spremljali pri mojem raziskovalnem delu in vsak po svoje k njemu tudi prispevali. Za pregled disertacije in njune pripombe se zahvaljujem tudi Arjani Žitnik in Janezu Žerovniku.

Posebej bi se rad zahvalil Mojci in Janu, ki sta mi nudila vso potrebno podporo, saj sta razumela, da je to nekaj, kar rad počnem. Zelo sem hvaležen tudi mami, očiju, njunima družinama, Gregorju ter Tari, ki so od nekdaj verjeli vame. Zahvala za pomoč tudi Mojčini družini.

Ne gre pozabiti niti prijateljev Davida, Gašperjev in Petra, s katerimi smo vse od začetka študija preživeli številne zanimive trenutke. Ob koncu bi se zahvalil še vsem sodelavcem iz podjetja Abelium d.o.o., ki so predvsem ob koncu našli razumevanje, me nadomeščali in mi omogočili, da dokončam zastavljeni cilj.

Vsem se iskreno zahvaljujem.

Povzetek

Leta 2013 so Gradišar in sod. predstavili novo strategijo za oblikovanje samosestavljivih nanostruktur. Poglavitni uspeh njihove raziskave predstavlja izdelava polipeptidnega samosestavljivega tetraedra z združevanjem dvanajstih odsekov, ki paroma tvorijo ovite vijačnice v natančno določenem vrstnem redu. Natančneje, ena polipeptidna veriga je razporejena med 6 stranic tetraedra tako, da vsako stranico prečka natanko dvakrat. Na tak način se šest dimerov ovitih vijačnic zaklene v stabilno tetraedrsko strukturo.

Polieder P, ki je sestavljen iz ene polipeptidne verige, lahko naravno predstavimo z grafom poliedra $G(P)$. Ker v tehnološkem procesu vsaka povezava $G(P)$ ustreza dimeru ovitih vijačnic, ustrezata vsaki povezavi natanko dva odseka. V ta namen predstavimo strogi (in d-stabilni) obhod grafa kot sklenjen sprehod, ki vsako povezavo grafa prečka dvakrat (takšen sprehod imenujemo tudi dvojni obhod), pri tem pa za vsako vozlišče v velja, da ne obstaja taka podmnožica njegovih sosedov $N \subseteq N(v)$, $1 \leq |N| < d(v)$ ($1 \leq |N| \leq d$), da vsakič, ko sprehod pride v v iz vozlišča v N, tudi zapusti v v smeri proti vozlišču v N. S pomočjo povezave med vložitvami grafov z enim licem v ploskve višjega roda in strogimi obhodi ter klasičnima rezultatoma Edmondsa in Ringla lahko dokažemo, da vsak povezan graf vsebuje strogi obhod in da graf G vsebuje d-stabilni obhod natanko tedaj, ko je povezan in je njegova minimalna stopnja $\delta(G) > d$.

Dvojni obhod vsako povezavo grafa prečka dvakrat. Posledično lahko v dvojnem obhodu definiramo dva tipa povezav. Če dvojni obhod W prečka povezavo e dvakrat v isti smeri, pravimo, da je e paralelna povezava (glede na W), sicer pa rečemo, da je e antiparalelna povezava (glede na W). Nadalje je dvojni obhod grafa G paralelni dvojni obhod, če je vsaka povezava v G paralelna (glede na W), in antiparalelni dvojni obhod, če je vsaka povezava v G antiparalelna (glede na W). Tudi motivacija za takšen pristop naravno izhaja iz lastnosti samosestavljivih nanostruktur. V delu karakteriziramo grafe, ki vsebujejo: (i) paralelne stroge obhode kot Eulerjeve grafe, (ii) paralelne d-stabilne obhode kot Eulerjeve grafe z minimalno stopnjo $\delta > d$, (iii) antiparalelne stroge obhode kot vse povezane grafe, v katerih obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ sodo število povezav, in (iv) antiparalelne d-stabilne obhode kot vse povezane grafe G z minimalno stopnjo $\delta(G) > d$, v katerih obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje najmanj $2d + 2$. Zadnji rezultat predstavlja tudi posplošitev problema, ki ga je leta 1951 postavil Ore in šele slabih 40 let kasneje rešil Thomassen (omenjeni problem v našem jeziku predstavlja karakterizacijo grafov, ki vsebujejo antiparalelne 1-stabilne obhode). Pri tem si med drugim pomagamo tudi z novimi ugotovitvami o vpetih drevesih s podobnimi lastnostmi, kot jih imajo Xuongova drevesa.

Koncept E-predpisanih obhodov, tj. dvojnih obhodov, v katerih je vsaka povezava iz $E \subseteq E(G)$ antiparalelna in vsaka povezava iz $E(G) \setminus E$ paralelna, po eni strani združi rezultate o paralelnih in antiparalelnih dvojnih obhodih v preproste izreke ter po drugi strani v praksi pomaga kontrolirati lastnosti samosestavljivih nanostruktur.

E-predpisane dvojne obhode sta neodvisno raziskovala že Vastergaard in Fleischner, medtem ko so rezultati o E-predpisanih strogih obhodih in E-predpisanih d-stabilnih obhodih povsem novi.

Ker grafi vsebujejo več dvojnih obhodov, definiramo, da sta dva dvojna obhoda W in W' grafa G ekvivalentna, kadar je moč W' dobiti z obratom W, z zamikom W, z delovanjem permutacije, inducirane z avtomorfizmom grafa G na W, ali s kombinacijo prej naštetih treh možnosti. V želji, da bi v praksi za dani polieder znali izbrati strogi obhod, ki bo imel največjo verjetnost, da se uspešno sestavi v samosestavljivo nanostrukturo želene oblike, smo razvili dva algoritma, ki generirata vse stroge obhode za dani graf G. Prvi algoritem temelji na algebraičnem pristopu in uporablja nekatera nova dognanja o grupi avtomorfizmov dvojnih obhodov, drugi pa se zanaša na topološke lastnosti grafa. Pri tem je časovna zahtevnost drugega za kubične grafe le $O(mf)$, kjer je m število povezav, f pa število lic v neki znani vložitvi grafa G.

Math. Subj. Class. (2010): 05C05, 05C10, 05C30, 05C45, 05C85, 49L20, 68R10, 68Q25, 90C39, 92B05, 92E10, 94C15
Ključne besede: oblikovanje nanostruktur, samosestavljanje, polipeptidni origami, dvojni obhod, strogi obhod, d-stabilni obhod, E-predpisani obhod, vložitev z enim licem, vpeto drevo, grupa avtomorfizmov dvojnega obhoda, razveji in omeji, dinamično programiranje

Abstract

In 2013, Gradišar et al. presented a novel self-assembly strategy for polypeptide nanostructure design. The main success of their research is a construction of a polypeptide self-assembling tetrahedron by concatenating 12 coiled-coil-forming segments in a prescribed order. More precisely, a single polypeptide chain consisting of 12 segments was routed through 6 edges of the tetrahedron in such a way that every edge was traversed exactly twice. In this way, 6 coiled-coil dimers were created and interlocked into a stable tetrahedral structure.

A polyhedron P, which is composed from a single polymer chain, can be naturally represented by a graph $G(P)$ of the polyhedron. As in the self-assembly process, every edge of $G(P)$ corresponds to a coiled-coil dimer, exactly two segments are associated with every edge of $G(P)$. We therefore introduce a strong (and a d-stable) trace of a graph as a closed walk that traverses every edge of graph twice, also called a double trace, and for every vertex v, there is no subset N of its neighbors, with $1 \leq |N| < d(v)$ $(1 \leq |N| \leq d)$, such that every time the walk enters v from N, it also exits to a vertex in N, respectively. We then establish the duality between single face embeddings of graphs into surfaces of higher genera and strong traces, and use classical results of Edmonds and Ringel to charecterize graphs that admit strong traces (every connected graph) and d-stable traces (every connected graph G with minimal degree $\delta(G) > d$).

Every edge is traversed twice in a double trace. Consequently, if a double trace W traverses an edge e in the same direction twice, then we call e a parallel edge (with respect to W), otherwise e is an antiparallel edge. A double trace W of a graph G is then a parallel double trace if every edge of G is parallel (with respect to W) and an antiparallel double trace if every edge of G is antiparallel (with respect to W). The motivation for this approach naturally arises from the properties of self-assembling nanostructures. We characterize graphs which admit: (i) parallel strong traces as Eulerian graphs, (ii) parallel d-stable traces as Eulerian graphs with minimal degree $> d$, (iii) antiparallel strong traces as connected graphs G in which there exists a spanning tree T with the property that every connected component of the co-tree $G - E(T)$ has an even number of edges, and (iv) antiparallel d-stable traces as connected graphs G with minimal degree $> d$ in which there exists a spanning tree T with the property that every connected component of the co-tree $G - E(T)$ is even or contains a vertex of degree at least $2d + 2$. The last result also generalizes a problem posed by Ore back in the 1950s and solved by Thomassen almost 40 years later. In our notation, problem raised by Ore could be read as characterizing the graphs, which admit antiparallel 1-stable traces. For solving this problem, we among other use some new discoveries about spanning trees similair to Xuong trees.

The concept of E-restricted traces, that is, a double trace where every edge from a set $E \subseteq E(G)$ is antiparallel and every edge from $E(G) \setminus E$ is parallel, on the one hand unify the results about parallel and antiparallel double traces while on the other hand also bid us more control over the properties of self-assembling nanostructures during their

construction when being used as a mathematical model. Results regarding E-restricted double traces were already well known and independently proven by Vastergaard and by Fleischner, while theorems about E-restricted strong traces and E-restricted d-stable traces are new results.

Since graphs admit multiple double traces, we define double traces W and W' of a graph G to be equivalent, if W' can be obtained from W by reversion W, by shifting W, by applying a permutation on W induced by an automorphisms of G, or using any combination of the previous three operations. In order to be able to maximize the probability which strong trace to choose for a given nanostructure so that an appropriate polypeptide chain will self assemble into the desired structure, we develop two algorithms for generating all non equivalent strong traces for a given graph G. The first algorithm is based on an algebraic approach and uses some new discoveries about the automorphism group of double traces, while the second relies on topological properties of a graph and has complexity $O(mf)$ for cubic graphs, where m is the number of edges and f is the number of faces in some fixed embedding of G.

Math. Subj. Class. (2010): 05C05, 05C10, 05C30, 05C45, 05C85, 49L20, 68R10, 68Q25, 90C39, 92B05, 92E10, 94C15
Keywords: nanostructure design, self-assembling, polypeptide origami, double trace, strong trace, d-stable trace, E-restricted trace, single face embedding, spanning tree, automorphism group of double trace, branch-and-bound, dynamic programming

Kazalo

Poglavje 1

Uvod

Leta 2013 so Gradišar in sod. [46] predstavili novo strategijo za oblikovanje samosestavljivih nanostruktur, ki je že in bi v prihodnosti lahko še v večji meri vplivala na razvoj in smernice sintezne biologije. Poglavitni uspeh njihove raziskave predstavlja izdelava polipeptidnega samosestavljivega tetraedra z združevanjem dvanajstih odsekov, ki tvorijo ovite vijačnice v natančno določenem vrstnem redu. Natančneje, ena polipeptidna veriga je razporejena med šest stranic tetraedra tako, da vsako stranico prečka natanko dvakrat. Na ta način se šest dimerov ovitih vijačnic zaklene v stabilno tetraedrsko strukturo. Vprašanje, ki se ob tem pojavi, je, ali je s predstavljeno strategijo možno sestaviti tudi nanostrukture drugih oblik.

Sodoben grafovsko teoretičen pogled na problem postreže z matematičnim modelom—s strogimi in d-stabilnimi obhodi v grafu. Poleg odgovora, katere strukture lahko z dano strategijo oblikujemo, strogi obhodi in njihove posplošitve postrežejo še z odgovori na druga vprašanja. Med drugim tudi, kako simulirati določene lastnosti samosestavljivih nanostruktur in na koliko različnih načinov je možno sestaviti samosestavljivo nanostrukturo enake oblike. Iskanje primernega matematičnega modela je vodilo tudi k novim dognanjem v teoriji grafov, področju matematike, ki ima za zametke objavo članka Leonharda Eulerja leta 1736, v katerem je rešil problem sedmih mostov Königsberga. Pri tem posebej izpostavimo teorijo vložitev grafov v ploskve višjih rodov in nekatere povsem teoretične rezultate, stare petdeset ali več let, ki so predstavljeni v novi luči ter (nekateri celo prvič) uporabljeni tudi v praksi.

Zanimivo je, da so antiparalelni 1-stabilni obhodi že pred časom našli splošno uporabo. Campagna in Lemieux [17] sta z njihovo pomočjo podala rešitev povsem (vsaj za kraje s snegom bogatimi zimami) vsakdanjega problema. Predstavila sta algoritem, ki ga plužne službe uporabljajo pri čiščenju cest. Plug mora namreč očistiti oba vozna pasova, pri tem pa upoštevati cestne predpise in voziti v pravo smer. Hkrati plug zaradi svoje velikosti na ozkem cestišču le s težavo naredi obrat za 180 stopinj. Enak algoritem s pridom uporabljajo tudi komunalna podjetja pri odvozu smeti.

Skozi celotno disertacijo se strogo grafovsko teoretični rezultati prepletajo z aplikativno uporabo le-teh v sintezni biologiji. V nadaljevanju bralca najprej spomnimo na osnovne matematične koncepte, ki so uporabljajeni v disertaciji. Med drugim se posvetimo tudi vložitvam grafov, preden predstavimo predlagani matematični model za konstrukcijo polipeptidnih nanostruktur—stroge in d-stabilne obhode.

V drugem in tretjem poglavju predstavimo karakterizacijo grafov, ki vsebujejo stroge in d-stabilne obhode. Pri tem uporabimo tudi izreke o dvojnih obhodih, ki so jih dokazali König, Sabidussi ter Eggleton in Skilton. Raziščemo prej omenjene vložitve grafov, natančneje vložitve grafov z enim licem, ter uporabimo Edmondsovo karakterizacijo takšnih grafov, da odgovorimo na vprašanje, katere oblike lahko (vsaj v teoriji) sestavimo iz polipeptidnih odsekov, ki tvorijo dimere ovitih vijačnic.

Potem ko v četrtem poglavju dokažemo več lem o vpetih drevesih, podobnih Xuongovim drevesom, v petem poglavju pogojem, ki definirajo stroge in d-stabilne obhode, dodamo še dva dodatna, povezana z usmeritvijo povezav. S posplošitvijo rezultatov Thomassena odgovorimo na Orejevo vprašanje o obstoju antiparalelnih 1-stabilnih obhodov in nadgradimo prej predstavljeni matematični model ter ga naredimo uporabnega tudi za konstruiranje nanostruktur iz verig DNK. V šestem poglavju združimo rezultate prejšnjega poglavja v izrekih o E-predpisanih strogih in d-stabilnih obhodih ter tako nadaljujemo delo, ki sta ga pred 30 leti začela Fleischner in Vestergaard. Tudi E-predpisani dvojni obhodi se izkažejo za uporabne v praksi, saj predvsem pri sestavljanju večjih nanostruktur predstavljajo nadgradnjo prej omenjenega matematičnega modela in omogočajo boljši nadzor nad samim procesom samosestavljanja in nad končnimi lastnostmi polipeptidnih nanostruktur.

Na začetku sedmega poglavja na razredu dvojnih obhodov vpeljemo ekvivalenčno relacijo. Poglavje potem posvetimo analizi omenjenih algoritmov za štetje neekvivalentnih strogih obhodov. Izsledki nam pomagajo pri boljšem razumevanju raznolikosti s tem modelom sestavljenih polipeptidnih nanostruktur in iskanju strogega obhoda z najprimernejšimi lastnostmi in z največ možnostmi, da se z njim simulirana polipeptidna veriga sestavi v stabilno nanostrukturo.

Osmo poglavje in zaključek sta namenjena pregledu glavnih rezultatov in možnosti uporabe le-teh v nadaljnih matematičnih in bioloških raziskavah.

1.1 Potrebni matematični koncepti

Graf G je par $G = (V, E)$, kjer V ali $V(G)$ predstavlja množico vozlišč, E ali $E(G)$ pa množico povezav grafa. Vsaka povezava e v G povezuje natanko dve *končni vozlišči* (ali *krajišči*) u in v. Vsi grafi, omenjeni v disertaciji, so, če ni posebej poudarjeno drugače, končni, povezani, neusmerjeni ter brez zank in vzporednih povezav. Graf brez zank (povezava, katere začetno vozlišče se ujema s končnim) in vzporednih povezav (dve povezavi, ki imata skupni obe krajišči) imenujemo *enostavni graf*. V nasprotnem primeru govorimo o *multigrafu*. Omenimo še, da je *usmerjeni graf* ali *digraf* graf, katerega povezave, imenovane *loki*, imajo predpisano smer. Podobno kot neusmerjeni graf, ga formalno predstavimo kot par $G = (V, A)$, kjer V predstavlja množico vozlišč, A pa množico lokov digrafa. Graf, v katerem nastopajo tako usmerjene kot neusmerjene povezave, imenujemo *mešani graf*.

Graf H je *podgraf* grafa G, če velja: $V(H) \subseteq V(G)$ in $E(H) \subseteq E(G)$. Torej množica vozlišč podgrafa $V(H)$ je podmnožica množice vozlišč $V(G)$, enako pa velja tudi za povezave. H je *vpeti* podgraf, če velja, da je $V(G) = V(H)$, in *inducirani* podgraf, če velja, da H vsebuje vse povezave iz G, ki imajo obe krajišči v $V(H)$. Posledično je inducirani podgraf natančno določen že z množico svojih vozlišč $V(H)$.

Za dve vozlišči u in v v grafu G, ki sta krajišči iste povezave e, pravimo, da sta *sosednji* ali *povezani* in zanju lahko zapišemo tudi $e = uv$ ali $u \sim_G v$. Takšni vozlišči sta drug drugemu *soseda*, povezava e pa je z u in z v *incidenčna*. Podobno za dve povezavi s skupnim krajiščem pravimo, da sta *sosednji*. Vse sosede vozlišča v v G označimo z $N_G(v)$ ali krajše z $N(v)$ in poimenujemo *okolica vozlišča*. V multigrafih, kjer upoštevamo tudi zanke in vzporedne povezave, se isto vozlišče kot sosed vozlišča v lahko pojavi večkrat. V tem primeru *multiokolico vozlišča* v (multimnožico, v kateri elementi lahko nastopijo večkrat) označimo z $N^*(v)$. V usmerjenih grafih ločimo med sosedi, ki izhajajo iz v, označenimi z $N^-(v)$, in tistimi, ki se v v končajo, označenimi z $N^+(v)$. Množico povezav s končnim (ali začetnim vozliščem) v v označimo z $E(v)$. Če je U množica vozlišč, potem $E(v, U)$ predstavlja povezave incidenčne tako z v kot nekim vozliščem v U. Za $U \subseteq V(G)$ bomo vozlišče u iz U včasih poimenovali tudi *U-vozlišče*. Analogno bomo za $F \subseteq E(G)$ vozlišče v, ki je krajišče povezave v F, včasih poimenovali *F-vozlišče*.

Stopnjo vozlišča v v grafu G označimo z $d_G(v)$ ali $d(v)$, kadar je G jasen iz konteksta, in je v enostavnem grafu enaka moči njegove okolice, $d(v) = |N(v)|$, v multigrafu enaka $d(v) = |N^*(v)|$ in v usmerjenem grafu enaka $d(v) = |N^+(v)| + |N^-(v)|$. *Izhodna stopnja* vozlišča v, označena z $d^-(v)$ v usmerjenem grafu, ali $a^-(v)$ v mešanem grafu, je enaka številu povezav, ki izhajajo iz v, $d^-(v) = |N^-(v)|$, medtem ko je *vhodna stopnja* v, označena z $d^+(v)$ v usmerjenem grafu, ali $a^+(v)$ v mešanem grafu, enaka številu povezav, ki se končajo v v, $d^+(v) = |N^+(v)|$. Analogno izhodno in vhodno stopnjo definiramo tudi na poljubni podmožici množice vozlišč grafa. *Minimalno* in *maksimalno* stopnjo G označimo z $\delta(G)$ in $\Delta(G)$. Za graf, v katerem so stopnje vseh vozlišč enake, uporabimo izraz *regularni graf*. V posebnem primeru 3-regularne grafe poimenujemo *kubični grafi*, grafe, v katerih so vsa vozlišča sode stopnje, pa *sodi grafi*. Ena izmed osnovnih trditev v teoriji grafov, poznana kot lema o rokovanju, govori o številu lihih vozlišč grafa.

Lema 1.1 *Vsak končni graf ima sodo število vozlišč lihe stopnje.*

Najmanjše število potrebnih barv, da bi obarvali povezave grafa G tako, da bosta poljubni sosednji povezavi različno obarvani, je *kromatični indeks* grafa in ga označimo s $\chi'(G)$. Vizingov izrek določa natančno spodnjo in zgornjo mejo za $\chi'(G)$.

Izrek 1.2 *Naj bo G enostavni graf z maksimalno stopnjo Δ. Potem je $\Delta \leq \chi'(G) \leq \Delta + 1$.*

Za graf G rečemo, da je *povezan*, če za vsak par vozlišč u, v iz G obstaja *pot* od u do v. Maksimalen povezan podgraf grafa G se imenuje *povezana komponenta* ali krajše *komponenta*. Vozlišče v v G je *prerezno vozlišče*, če ima graf $G-v$ več komponent kot G. Podobno je povezava e v G *prerezna povezava* ali *most*, če z odstranitvijo te povezave dobimo graf z več komponentami, kot jih je imel prvotni graf G. Analogno sta *prerezna množica vozlišč* takšna množica $U \subseteq V(G)$, da ima graf $G-U$ več komponent kot G, in *prerezna množica povezav* takšna množica $F \subseteq E(G)$, da ima graf $G-F$ več komponent kot G. Za $k \in \mathbb{N}$ je G *k-povezan (po vozliščih)*, če velja: (i) G ima vsaj $k+1$ vozlišč ter (ii) za vsako množico vozlišč $U \subseteq V(G)$ moči $|U| < k$ je graf $G-U$ povezan. Največje število k, za katero je G k-povezan, imenujemo *povezanost grafa* G in ga označimo s $\kappa(G)$. Podobno je za $k \in \mathbb{N}$ graf G *k-(po povezavah) povezan*, če velja, da je za vsako množico povezav $F \subseteq E(G)$ moči $|F| < k$ graf $G-F$ povezan. Največje število k, za katero je G k-(po povezavah) povezan, imenujemo *povezanost grafa po povezavah* in ga označimo $\lambda(G)$. Za maksimalen povezan podgraf grafa brez prereznih vozlišč uporabimo izraz *blok*. Vsak blok grafa G je tako maksimalen 2-povezan podgraf ali most (vključno s krajišči) ali *izolirano vozlišče* (vozlišče stopnje 0). Bloki so po povezavah disjunktni, lahko pa imajo skupna vozlišča. Ta so natanko prerezna vozlišča. Usmerjen graf D (ali mešan graf M) je *šibko povezan*, če je povezan graf, ki ga dobimo, ko v D (ali v M) pozabimo na usmeritev povezav. Analogno je usmerjen graf D (ali mešan graf M) *strogo povezan*, kadar je D (ali M) povezan tudi ob upoštevanju usmeritev povezav.

Sklenjeno zaporedje povezav v grafu, v katerem, razen začetnega in končnega vozlišča, ni ponavljanja vozlišč in povezav, imenujemo *cikel*. Dolžina najkrajšega cikla v grafu pa je *notranji obseg* grafa. Graf, ki ne vsebuje nobenega cikla, imenujemo *drevo*. *Vpeto drevo* T grafa G je podgraf, ki je drevo in vsebuje vsa vozlišča iz G. Ne nujno povezan podgraf grafa G, $G-E(T)$, ki ga dobimo tako, da ohranimo le povezave iz G, ki niso hkrati tudi v $E(T)$, ter ob tem ne odstranjujemo vozlišč, je *ko-drevo*. Število povezav poljubnega vpetega drevesa v G je enako $|V(G)|-1$, z njim povezanega ko-drevesa pa $|E(G)|-|V(G)|+1$. Slednje poznamo tudi pod imenoma *Bettijevo število* ali *ciklični rang*. Komponenta C ko-drevesa $G-E(T)$ je *soda* (*liha*), kadar vsebuje sodo (liho) število povezav. V izogib nejasnostim na tem mestu opozorimo, da z izrazom soda komponenta vedno označujemo povezane komponente s sodim številom povezav, kadar pa bomo imeli v mislih povezano komponento, v kateri so vsa vozlišča sode stopnje, bomo posebej napisali, da je ta povezana komponenta sodi podgraf. Enako velja tudi za izraz liha komponenta. *Pomanjkljivostno število vpetega drevesa* T v G, $\xi(G,T)$, je definirano kot število lihih komponent v njegovem ko-drevesu $G-E(T)$. Podobno je *pomanjkljivostno število grafa* G, $\xi(G)$, definirano kot minimalno pomanjkljivostno število njegovih vpetih dreves. Vpeto drevo, ki realizira pomanjkljivostno število grafa, se imenuje *Xuongovo drevo*. V [101] in [102] je Xuong z uporabo vpetih dreves, ko-dreves, Bettijevega števila in pomanjkljivostnega števila razvil novo tehniko vložitev grafov.

Ciklična dekompozicija grafa je particija vozlišč grafa na podmožice, tako da vsaka podmnožica leži na ciklu.

Omenimo še nekaj operacij, ki jih bomo na grafih večkrat uporabili. *Subdivizijo* grafa dobimo, ko nekaj njegovih povezav zamenjamo z disjunktnimi potmi. *Podvojeni graf* grafa G pa dobimo tako, da vsako povezavo grafa G zamenjamo z dvema vzporednima povezavama. *Kontrakcija povezave* $e = uv$ v grafu je operacija, pri kateri odstranimo povezavo e iz grafa, njeni krajišči u in v pa pri tem zamenjamo z novim vozliščem. Naj bo $F \subseteq E(G)$. Z G/F označimo multigraf (G/F lahko vsebuje tako zanke kot vzporedne povezave), ki ga dobimo s kontrakcijo vseh povezav iz F (pri tem se lahko več povezav, a ne nujno vse, skrči v isto vozlišče). *Kartezični produkt* grafov G in H je graf $G \,\square\, H$, ki ima množico vozlišč $V(G \,\square\, H) = V(G) \times V(H)$. Pri tem sta vozlišči $u = (g_1, h_1)$ in $v = (g_2, h_2)$ sosednji v $G \,\square\, H$, če velja $g_1 \sim_G g_2$ in $h_1 = h_2$ ali $g_1 = g_2$ in $h_1 \sim_H h_2$. Kartezični produkt ima $|V(G)||V(H)|$ vozlišč in $|V(G)||E(H)|+|V(H)||E(G)|$ povezav.

Za dva grafa pravimo, da sta *izomorfna*, kadar obstaja izomorfizem, ki enega izmed njiju preslika v drugega. *Avtomorfizem* grafa G je permutacija σ množice vozlišč V, za katero velja, da par (u, v) tvori povezavo natanko tedaj, ko tudi par $(\sigma(u), \sigma(v))$ tvori povezavo. Avtomorfizem je torej permutacija vozlišč grafa, ki slika povezave grafa v povezave grafa. Gre torej za *izomorfizem* grafa nase.

Sprehod v grafu G je alternirajoče zaporedje

$$W = w_0 e_1 w_1 \dots w_{\ell-1} e_\ell w_\ell, \tag{1.1}$$

pri čemer za vsak $i = 1, \dots, \ell$, e_i predstavlja povezavo med vozliščema w_{i-1} in w_i. Pravimo, da W *potuje prek* ali *prečka* povezave in vozlišča, vsebovana v zaporedju (1.1). Včasih, kadar kontekst to dopušča, v zaporedju (1.1) izpustimo povezave in W zapišemo kot zaporedje vozlišč $W = w_0 \to \dots \to w_\ell$ ali tudi $W = w_0, \dots, w_\ell$. To zaporedje imenujemo *vozliščno zaporedje*. *Dolžina* sprehoda je število povezav v zaporedju (1.1), vozlišči w_0 in w_ℓ pa sta *končni vozlišči* sprehoda. Sprehod, v katerem ni ponavljajna vozlišč in povezav, imenujemo *pot*. Sprehod je *sklenjen*, kadar sta obe končni vozlišči enaki. Sklenjenemu sprehodu rečemo tudi *obhod*. Za obhode v enačbi 1.1 indekse upoštevamo po modulu ℓ, kar nadalje pomeni, da vozlišču w_ℓ v W sledi w_1. Sklenjeni sprehod, v katerem, razen začetnega in končnega vozlišča, ni ponavljanja vozlišč in povezav, ustreza zgoraj definiranemu ciklu.

Eulerjev obhod v grafu G je obhod, ki prečka vsako povezavo v G natanko enkrat. Če G vsebuje Eulerjev obhod, zanj uporabimo tudi izraz *Eulerjev graf*. Z Eulerjevimi obhodi v grafih in usmerjenih grafih sta povezana tudi naslednja klasična izreka iz teorije grafov (dokaza zanju je v [98] predstavil tudi Watkins).

Izrek 1.3 *Povezan graf je Eulerjev natanko tedaj, ko je stopnja vseh njegovih vozlišč soda.*

Od tod sledi, da so Eulerjevi grafi natanko povezani sodi grafi.

Izrek 1.4 *Usmerjeni graf G je Eulerjev natanko tedaj, ko za vsako vozlišče v v G velja, da je vhodna stopnja v enaka izhodni stopnji v.*

Pri definicijah in konceptih iz teorije grafov, ki jih nismo posebej predstavili, se sklicujemo na [99] avtorja Westa.

1.1.1 Dvojni obhodi

Dvojni obhod grafa G je obhod, ki vsako povezavo grafa prečka natanko dvakrat. O karakterizaciji grafov, ki vsebujejo dvojne obhode, je v svojem delu [30] že leta 1736 razmišljal Euler, dokaz pa je natanko 200 let kasneje predstavil König [58].

Trditev 1.5 ([30], [58]) *Vsak povezan graf vsebuje dvojni obhod.*

Dokaz. Naj bo G poljuben povezan graf. Z zamenjavo vsake povezave v G z dvema vzporednima povezavama konstruirajmo podvojeni graf grafa G. Očitno je vsako vozlišče v podvojenem grafu grafa G sode stopnje, od koder po izreku 1.3 sledi, da ima podvojeni graf grafa G Eulerjev obhod C. Obhod C pa predstavlja dvojni obhod v originalnem grafu G. $\square$

Naj bo sedaj W dvojni obhod grafa G dolžine ℓ (dolžina dvojnega obhoda je definirana analogno dolžini sprehoda kot število povezav v dvojnem obhodu). Izberimo poljubno vozlišče v G in ga označimo z v. Naj bo $N \subseteq N(v)$. Pravimo, da ima W *N-ponovitev* v vozlišču v, če drži naslednje:

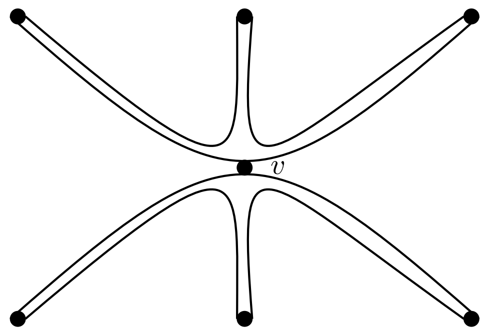
$$\begin{aligned} \textit{za vsak } i \in \{0, \ldots, \ell-1\}\textit{: } & \textit{če je } v = w_i, \textit{ potem je } w_{i+1} \in N \\ & \textit{natanko tedaj, ko je } w_{i-1} \in N. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Pri tem za dvojne obhode tako kot za ostale obhode velja, da v enačbi 1.2 indekse upoštevamo po modulu ℓ, kar nadalje pomeni, da vozlišču w_ℓ v W sledi w_1.

Poljudno si zgornjo definicijo najlažje razlagamo, kot da ima W v v N-ponovitev natanko tedaj, ko vsakič, ko W pride v v iz vozlišča v N, tudi nadaljuje proti vozlišču v N. Primer N-ponovitve je prikazan na sliki 1.1, pri čemer podmnožico N predstavljajo 3 vozlišča na vrhu slike.

Nadalje pravimo, da je N-ponovitev *d-ponovitev*, kadar je $|N| = d$. Ob tem za d-ponovitve občasno uporabimo tudi izraz *ponovitev reda d*. Ker v poljubnem vozlišču vsakega dvojnega obhoda vedno nastopita $\emptyset$-ponovitev in $N(v)$-ponovitev, za $N = \emptyset$ ali $N = N(v)$, N-ponovitev poimenujemo *trivialna ponovitev.* Iz definicije N-ponovitve je tudi razvidno, da če ima W v vozlišču v N-ponovitev, ima W v v tudi $N(v) \setminus N$-ponovitev. Ta lastnost je poznana kot *simetrija ponovitev.* Včasih, kadar v mislih ne bomo imeli določenega $N \subseteq N(v)$, bomo za N-ponovitev uporabili tudi izraz *ponovitev.*

Na tem mestu predstavimo definiciji dveh posebnih dvojnih obhodov, ključnih za v nadaljevanju predstavljene rezultate.



Slika 1.1: 3-ponovitev v vozlišču v stopnje 6

Definicija 1.6 Strogi obhod *je dvojni obhod brez netrivialnih ponovitev.*

Definicija 1.7 d-stabilni obhod *je dvojni obhod brez nepraznih ponovitev reda* $\leq d$.

Strogi obhod je torej za vsako vozlišče v in vsako podmnožico njegovih sosedov $N \subseteq N(v)$ brez N-ponovitve za $1 \leq |N| < d(v)$, d-stabilni obhod pa je brez N-ponovitve za $1 \leq |N| \leq d$.

Iz definicije 1.7 je razvidno, da če graf vsebuje d-stabilni obhod, vsebuje tudi d'-stabilni obhod za $d' < d$. Povezavo in razlike med strogimi in d-stabilnimi obhodi povzema naslednja lema.

Lema 1.8 *V grafu G z $\delta(G) > d$ je vsak strogi obhod tudi d-stabilni obhod. Če ob tem velja tudi $\Delta(G) < 2d + 2$, je vsak d-stabilni obhod hkrati tudi strogi obhod.*

Dokaz. Naj bo G graf z $\delta(G) > d$ in W poljuben strogi obhod v njem. Ker je G brez vozlišč stopnje $\leq d$, W pa brez netrivialnih ponovitev, je najmanjša možna stopnja ponovitve v W strogo večja kot d. Sledi, da je W d-stabilni obhod.

Naj bo nadalje $\Delta(G) < 2d+2$ in W' d-stabilni obhod grafa G. Ker je G brez vozlišč stopnje $\geq 2d+2$ in za ponovitve velja simetrija ponovitev (iz dejstva, da je N ponovitev v vozlišču v sledi, da je tudi $N(v) \setminus N$ ponovitev v vozlišču v), je W' brez netrivialnih ponovitev. Sledi, da je W strogi obhod. $\square$

Omenimo še, da se v literaturi predvsem za antiparalelne d-stabilne obhode (definirani v nadaljevanju) pojavljajo različni izrazi. Tako so med drugim antiparalelni 1-stabilni obhodi ponekod poznani tudi kot strogi obhodi, česar ne gre zamešati s pravkar definiranimi strogimi obhodi.

Dvojni obhodi v multigrafih

Naj bo G_M multigraf, W_M dvojni obhod v G_M in v poljubno vozlišče v njem. Analogno kot v enostavnih grafih za $N \subseteq E(v)$ pravimo, da ima W_M v v N-ponovitev natanko tedaj, kadar vsakič, ko W_M pride v v po povezavi v N, tudi nadaljuje po povezavi v N. Tako lahko definiramo tudi stroge in d-stabilne obhode na multigrafih. Naslednji lemi sledita iz dejstva, da vsakič, ko strogi obhod v grafu (ali multigrafu) pride v vozlišče v stopnje 2 iz u, nadaljuje proti edinemu od u različnemu vozlišču.

Lema 1.9 *Naj bo G_M multigraf in G enostaven graf, ki ga dobimo, če v G_M zamenjamo zanke s potmi dolžine 3 in paralelne povezave s potmi dolžine 2. G_M vsebuje strogi obhod natanko tedaj, ko G vsebuje strogi obhod. V tem primeru za vsak strogi obhod W v G obstaja strogi obhod W_M v G_M, ki vsako povezavo prečka v isti smeri kot W, zanke in paralelne povezave pa v smeri, v kateri povezave, ki so jih nadomestile v G, prečka W.*

Dokaz. Strogi obhod W_M v G_M iz W sestavimo tako, da se postavimo v poljubno vozlišče grafa G in sledimo W. Naj bo $e = xy$ povezava, ki jo pri tem prečkamo. Če e ni ena izmed povezav, ki so v G nadomestile zanke in paralelne povezave, dodamo xy v W_M ter pri tem pazimo na vrstni red in usmeritev povezav. Namesto poti dolžine 2 in 3, ki so v G nadomestile zanke in paralelne povezave iz G_M, v W_M dodamo zanke ali paralelne povezave, prečkane v isti smeri kot omenjene poti (ker so vsa vozlišča na poti stopnje 2, poti v strogih obhodih vedno prehodimo v celoti). □

Lema 1.10 *Naj bo G_M multigraf in G enostaven graf, ki ga dobimo, če v G_M zamenjamo zanke s potmi dolžine 3 in paralelne povezave s potmi dolžine 2. Naj bo $V \subseteq V(G_M)$. G_M vsebuje dvojni obhod, v katerem netrivialne ponovitve nastopijo le v vozliščih iz V, natanko tedaj, ko G vsebuje dvojni obhod, v katerem netrivialne ponovitve nastopijo le v vozliščih iz V. V tem primeru za vsak dvojni obhod W v G z netrivialnimi ponovitvami le v vozliščih v V obstaja enak dvojni obhod W_M v G_M in G, ki vsako povezavo prečka v isti smeri kot W, zanke in paralelne povezave pa v smeri, v kateri povezave, ki so jih nadomestile v G, prečka W.*

Dokaz. Ker med postopkom, opisanim v dokazu leme 1.9, ne ustvarimo novih netrivialnih ponovitev, lahko W_M iz W konstruiramo na enak način kot zgoraj. □

1.1.2 Vložitve grafov

Predvsem zaradi potrebe poglavij 2 in 5 v tem razdelku predstavimo nekaj osnovnih topoloških pojmov in pojmov topološke teorije grafov. Več o tej temi je moč najti v [64] avtorjev Moharja in Thomassena.

Topologija na množici X je podmnožica $\mathcal{O}$ potenčne množice 2^X, za katero velja:

(i) $\emptyset, X \in \mathcal{O}$,

(ii) če $U, V \in \mathcal{O}$, potem $U \cap V \in \mathcal{O}$ in *(iii)* če $\{U_\lambda | \lambda \in \Lambda\} \subset \mathcal{O}$, potem $\bigcup_{\lambda\in\Lambda} U_\lambda \in \mathcal{O}$.

Topološki prostor je par $(X, \mathcal{O}) = X$, kjer je X množica in $\mathcal{O}$ topologija na njej. Elemente topologije $\mathcal{O}$ na X imenujemo odprte množice topološkega prostora X. Elemente topološkega prostora X pa imenujemo točke. Preslikava $f : X \to Y$ med topološkima prostoroma je odprta, če je $f(U)$ odprta v Y za vsako odprto podmnožico U prostora X. Preslikava $f : X \to Y$ je *homeomorfizem* topoloških prostorov, če je zvezna odprta bijekcija. Topološka prostora X in Y sta *homeomorfna*, če obstaja kakšen homeomorfizem med njima. Tiste točke, ki imajo kakšno odprto okolico homeomorfno odprti množici, so *notranje točke*, vse preostale pa so *robne točke*. Množico vseh robnih točk imenujemo *rob*.

Definicija 1.11 Ploskev *je topološki prostor, v katerem ima vsaka točka odprto okolico homeomorfno neki odprti podmnožici Evklidove ravnine* $\mathbb{E}$.

Rod povezane orientabilne ploskve je celo število, ki pomeni največje število prerezov vzdolž nesekajočih se zaprtih krivulj brez nastanka nepovezanih rezultirajočih mnogoterosti. Poenostavljeno to pomeni, da rod predstavlja največje število rezov, ki jih lahko naredimo skozi ploskev, ne da bi pri tem dobili nepovezano ploskev, ali še preprosteje, da je rod enak številu ročajev na orientabilni ploskvi. Rod povezanih neorientabilnih sklenjenih ploskev (ali *neorientabilen rod*) je pozitivno celo število, ki predstavlja število križnih kap, ki so prilepljene na pripadajočo kroglo.

Zbirka točk na razdalji < 1 od fiksne točke v Evklidovem n-prostoru je *n-dimezionalen enotski odprti disk*. Za odprti disk v 1-razsežnem prostoru uporabimo izraz *odprti interval*, v $(n \geq 3)$-razsežnem prostoru pa izraz *odprta krogla*. *Pot* v topološkem prostoru X med točkama u in v je slika zvezne injektivne preslikave $f_e : [0, 1] \to X$, tako da je $f_e(0) = u$ in $f_e(1) = v$.

Graf G je *vložen* v topološki prostor X, če so vsa vozlišča iz G različne točke prostora X in povezave iz G poti v X, ki povezujejo svoji krajišči. Nobeni dve povezavi se razen v skupnem krajišču ne sekata. *Vložitev* grafa G v prostor X je izomorfizem grafa G in grafa G', ki je vložen v X. Ob vložitvah grafov so prva asociacija pogosto *ravninski grafi*, to so grafi, ki jih lahko vložimo v ravnino. S potmi povezanim komponentam $X - \varphi(G)$ pravimo *lica* vložitve. Vložitev je *celična*, če so vsa lica homeomorfna odprtim diskom v ravnini. Znano je, da imajo celično vložitev le povezani grafi. Dve vložitvi grafov G in G' v ploskvi Σ in Σ' sta *ekvivalentni*, če obstaja homeomorfizem $h : \Sigma \to \Sigma'$, za katerega je $h\mid_G$ izomorfizem grafov G in G'. Najmanjše naravno število g, za katerega G dopušča celično vložitev v orientabilno sklenjeno ploskev roda k, imenujemo *rod* grafa G in ga označimo z $g(G)$. Analogna definicija velja tudi za neorientabilne ploskve, pri katerih pa se uporablja oznaka $\widetilde{g}(G)$.

V tej disertaciji se bomo ukvarjali predvsem s *(kombinatoričnimi) vložitvami* grafa G v ploskev Σ. Kombinatorična vložitev je par (Π, λ), kjer je $\Pi = \{\pi_v \mid v \in V(G)\}$ in je π_v za vsak $v \in V(G)$ *ciklična permutacija* (permutacija, sestavljena iz enega cikla, ki vsebuje vse elemente) povezav iz $E(v)$, λ pa je definirana kot preslikava λ :

$E(G) \to \{-1, 1\}$. Za Π uporabljamo izraz *rotacijska shema*, za $\pi_v \in \Pi$ izraz *lokalna rotacija* okoli v, za λ pa izraz *oznaka (povezav)*. Permutacija π_v v smeri urinega kazalca opiše zaporedje povezav s krajiščem v v. Za oznako $\lambda(uv)$ se skriva razmerje med orientacijama (orientaciji se lahko ob prečkanju ujemata ali ne) zaporedij π_u in π_v sosednjih vozlišč u in v — $\lambda(uv) = 1$ natanko tedaj, ko se ob prečkanju povezave uv orientaciji zaporedij ujemata. *Lični obhod* kombinatorične vložitve (Π, λ) je obhod, ki ga v G dobimo z naslednjim postopkom. Začnemo v poljubnem vozlišču u in izberemo poljubno z u sosednjo povezavo uv in poljubno začetno oznako $\lambda_0 \in \{-1, 1\}$. Potem ponavljamo naslednji korak: premaknemo se po povezavi uv v v, pomnožimo oznako λ_0 z oznako pravkar prečkane povezave in izberemo naslednjo povezavo vw, tako da je $\pi_v^{-1}(uv) = vw$, če je $\lambda_0 = 1$, ali pa je $\pi_v(uv) = vw$, če je $\lambda_0 = -1$. Postopek končamo, ko: (i) se vrnemo v u, (ii) je naslednja povezava, ki naj bi jo prečkali, enaka začetni povezavi uv in (iii) se trenutna vrednost λ_0 ujema z vrednostjo začetne oznake. Dva lična obhoda sta enaka, kadar se razlikujeta le v začetnih vozliščih in njuni orientaciji (smeri v kateri prečkamo obhoda).

Ploskev Σ, v katero vložimo graf G, je s to kombinatorično vložitvijo (Π, λ) enolično določena. Ob tem je vložitev (in tudi ploskev Σ) *orientabilna*, če G nima nobenega cikla, ki bi imel liho število povezav z negativno oznako, in *neorientabilna*, če takšen cikel obstaja. Ker se, ko potujemo okoli C, v vsaki povezavi z negativno oznako spremeni orientacija, je v tem primeru namreč trak okoli C homeomorfen Möbiosovemu traku. Rod ploskve Σ, v katero vložimo graf G z vložitvijo (Π, λ), je z upoštevanjem *Eulerjeve karakteristike* in *Poincaréjeve formule* enolično določen s številom ličnih obhodov: $\chi(\Sigma) = V - E + F$ in $g = 1 - \frac{1}{2}\chi(\Sigma)$ za orientabilne ploskve ter $\widetilde{g} = 2 - \chi(\Sigma)$ za neorientabilne ploskve, pri čemer so V, E, F in g po vrsti število vozlišč, število povezav, število lic in rod. Posledično z zmanjševanjem števila ličnih obhodov grafa dobimo vložitev grafa v ploskve višjega roda.

Vsaka povezava uv grafa G v množici ličnih obhodov vložitve grafa G (Π, λ) nastopi natanko dvakrat. Dve kombinatorični vložitvi (Π, λ) in (Π', λ') sta *ekvivalentni*, kadar lahko eno iz druge dobimo tako, da lokalno rotacijo okoli nekega vozlišča v zamenjamo z njenim inverzom in ob tem obrnemo še oznake povezav v $E(v)$ (iz 1 v -1 in obratno). Vložitev (Π, λ) določa množico ličnih obhodov, velja pa tudi obratno. Množica obhodov $\mathcal{W} = \{W_1, \ldots, W_k\}$, v kateri se vsaka povezava $uv \in E(G)$ pojavi natanko dvakrat, do ekvivalence natančno določa vložitev (Π, λ): zaporedje eve' v ličnem obhodu pomeni, da si e in e' sledita v π_v, zaporedje $eve'v'e''$ v ličnem obhodu pa določa oznako povezave e' — $\lambda(e') = 1$ natanko tedaj, ko je $\pi_v(e) = e'$ in $\pi_{v'}(e') = e''$ ali ko je $\pi_{v'}(e'') = e'$ in $\pi_v(e') = e$. Dve vložitvi sta ekvivalentni natanko tedaj, ko imata enaki množici obhodov. Alternativni način reprezentacije ploskve Σ je tako s *poligonalno shemo*: za vsak lični obhod v $\mathcal{W} = \{W_1, \ldots, W_k\}$ vzamemo disk in njihove meje ustrezno identificiramo glede na pare povezav, ki nastopajo v $\mathcal{W}$.

Ker imajo ekvivalenčne vložitve enake topološke lastnosti, sledi, da je vložitev orientabilna, če je ekvivalentna vložitvi, za katero lahko lične obhode v $\mathcal{W}$ izberemo tako, da vsako povezavo prečkajo po enkrat v vsako smer.

1.2 Samosestavljive nanostrukture iz polipeptidov

Biopolimeri sestavljajo nekatere izmed najbolj kompleksnih nanostruktur, poznanih v naravi. Pri tem so predvsem proteini posebej pomembni pri celičnih procesih. Zaradi številnih medsebojnih interakcij, ki pri tem nastopajo, je pri konstruiranju novih nanostruktur še vedno praktično nemogoče nadzorovati njihovo zvijanje. Ob tem so bili proteini v zadnjem desetletju predvsem zaradi dejstva, da je znanstvenikom uspelo DNK poleg njene naravne vloge shranjevanja in prenašanja informacij uporabiti tudi za konstrukcijo nanomaterialov in samosestavljivih nanostruktur, kar nekoliko zapostavljeni. Na področju tako imenovanega DNK origamija so bile z uporabo samosestavljivosti DNK konstruirane številne zanimive strukture. Tako so Goodman in sod. v [44] ter He in sod. v [50] predstavili konstrukcijo tetraedra, He in sod. v [49] predstavili konstrukcijo 3-prizme, Chen in Seeman v [18] ter Zhang in sod. v [104] predstavili konstrukcijo kocke, Shih in sod. v [83] predstavili konstrukcijo oktaedra, Zimmermann in sod. v [105] predstavili konstrukcijo dodekaedra, Bhatia in sod. v [12] ter Douglas in sod. v [21] pa so predstavili konstrukcijo ikozaedra. Duan in sod. so v [22] in [23] na mehanizme, potrebne za gradnjo DNK struktur, gledali s pomočjo grafov Sierpinskega in kasneje predstavili tudi povezavo z rodom grafa. Nekoliko drugačen pristop, podoben tistemu, uporabljenemu za proteine in predstavljenemu v nadaljevanju, je leta 2003 v [81] opisal Seeman. Pri tem poudarimo, da je bilo v večini omenjenih primerov uporabljenih več verig DNK, leta 2005 pa so Kočar in sod. v [56] demonstrirali, da je moč različne poliedre sestavljati tudi iz ene verige DNK.

Z novo alternativno strategijo, ki zaobide kompleksnost proteinskega jedra (ki je stabilno zaradi kompleksne uravnoteženosti velikega števila šibkih interakcij) in se osredotoči na samosestavljanje s pomočjo posameznih modulov, med seboj povezanih s fleksibilnimi povezovalci, je origami proteinov v zadnjh letih le stopil iz sence DNK origamija. V [46] (Gradišar in sod.) predstavljena in v [14] (Božič in sod.), v [55] (Kočar in sod.) ter v [61] (Ljubetič in sod.) še nadgrajena strategija pokaže, da so tehnike, podobne tistim za oblikovanje nanostruktur iz DNK, uporabne tudi pri proteinih. Pri tem je pomembna predvsem komplementarnost parov, ki tvorijo ovite vijačnice, ki je v primeru ovitih vijačnic proteinov simulirana s kombinacijo hidrofobnih in elektrostatskih interakcij. Omenimo, da so se s podobnimi problemi, kjer se je s povezovanjem proteinov konstruiralo različne topologije, a z nekoliko drugačnim pristopom, v preteklosti ukvarjali tudi Duda v [24], Cheng in sod. v [19] ter Liu in sod. v [60], ki so pri tem med drugim uporabili tudi različne povezovalce (v matematičnem jeziku predstavljene kot vozle).

Kot smo že omenili, začetek nove strategije za oblikovanje samosestavljivih nanostruktur pomeni leta 2013 objavljena raziskava Gradišar in sod. [46], kjer je predstavljena izdelava polipeptidnega samosestavljivega tetraedra `TET12` z združevanjem dvanajstih odsekov (peptidov), ki tvorijo ovite vijačnice v natančno določenem vrstnem redu. Natančneje, ena polipeptidna veriga je razporejena med šest stranic tetraedra tako, da vsako stranico prečka natanko dvakrat. Na ta način se šest dimerov ovitih vijačnic zaklene v stabilno tetraedrsko strukturo. Uporabljena linearna polipeptidna veriga iz dvanajstih odsekov peptidov, med seboj povezanih s fleksibilnim povezovalcem—tetrapeptidom LINK, ki dovoljuje zvijanje polipeptidne verige, je predstavljena v 1.3 (aminokislinsko sestavo uporabljenih peptidov je moč najti v tabeli A.2 v Dodatku). Ob tem je uporabljena polipeptidna veriga prikazana tudi na sliki A.2 v Dodatku. TET12 je tako sestavljen iz 476 aminokislin (enočrkovne in tročrkovne oznake najpogostejših aminokislin so predstavljene v tabeli A.1 v Dodatku).

$$\begin{aligned}\texttt{TET12} = {} & \texttt{START} + \texttt{APH} + \texttt{LINK} + \texttt{P3} + \texttt{LINK} + \texttt{BCR} + \texttt{LINK} + \texttt{GCN}_{\texttt{sh}} + \\ & \texttt{LINK} + \texttt{APH} + \texttt{LINK} + \texttt{P7} + \texttt{LINK} + \texttt{GCNsh} + \texttt{LINK} + \texttt{P4} + \\ & \texttt{LINK} + \texttt{P5} + \texttt{LINK} + \texttt{P8} + \texttt{LINK} + \texttt{BCR} + \texttt{LINK} + \texttt{P6} + \texttt{STOP}\end{aligned} \tag{1.3}$$

Konstrukcija tetraedra je prikazana tudi na slikah A.3, A.4 in A.5 (v Dodatku). Pri tem vsak izmed dvanajstih odsekov nima definirane strukture in tvori ovito vijačnico natanko tedaj, ko se pari (dimerizira) z ustreznim dopolnjujočim odsekom (peptidom) v ustrezni orientaciji (paralelni ali antiparalelni). Za peptida, ki tvorita dimer pravimo, da sta kompatibilna. Peptid sestavljajo heptade zaporednih aminokislin z mesti, označenimi od a do g, pri čemer gre posebej izpostaviti mesta a, d, e in g, med katerimi se pri tvorjenju dimera tvorijo hidrofobne in elektrostatske interakcije (za antiparalelni in paralelni primer prikazane na sliki A.1 v Dodatku). Omenimo še, da ni nujno, da so v peptidu vse heptade popolne—na obeh koncih je lahko dodan samo del heptade. Hidrofobne in elektrostatske interakcije so v [62] in v [48] podrobneje opisali Mason in sod. ter Hageman in sod. Topologija samosestavljene strukture je odvisna od orientacije in zaporedja vsakega para, zvitega v ovito vijačnico. Orientacija para je lahko paralelna ali antiparalelna, kar daje proteinom dodatno prednost pred nanostrukturami, konstruiranimi s pomočjo DNK, kjer lahko nastopa le antiparalelna orientacija v dimeru. Za omenjeno konstrukcijo tetraedra iz [46] je bilo izbranih šest peptidov P3, P4, P5, P6, P7, P8, ki tvorijo tri paralelne heterodimere (dimer, v katerem se parita dva različna peptida), en paralelni homodimer (dimer, v katerem se parita dva enaka peptida) $\texttt{GCN}_{\texttt{sh}}$ ter dva antiparalelna homodimera APH in BCR. Pri izbiri parov je bila pomembna tudi njihova ortogonalnost—lastnost, da vsak izmed izbranih peptidov dimer tvori z natanko enim izmed preostalih peptidov, kar preprečuje, da bi se med konstrukcijo v dimer povezala dva odseka, ki za to nista bila predvidena in bi bila tako oblika konstruirane strukture različna od pričakovane.

Druga (kemijska) lastnost, ki vpliva na verjetnost, za nastanek želene samosestavljive strukture, pa je zaporedje, v katerem so pepti povezani v verigo. Tako se veriga predstavljena v 1.4, kljub istim sestavnim enelentom in ortogonalnosti uporabljenih peptidov (uporabljen je povsem enak nabor peptidov kot v primeru TET12), ne sestavi v tetraeder temveč v šop šestih zank.

$$
\begin{aligned}
&\texttt{START} + \texttt{APH} + \texttt{LINK} + \texttt{P6} + \texttt{LINK} + \texttt{P4} + \texttt{LINK} + \texttt{GCN}_{\texttt{sh}} + \\
&\texttt{LINK} + \texttt{P3} + \texttt{LINK} + \texttt{P5} + \texttt{LINK} + \texttt{P7} + \texttt{LINK} + \texttt{APH} + \\
&\texttt{LINK} + \texttt{BCR} + \texttt{LINK} + \texttt{GCN}_{\texttt{sh}} + \texttt{LINK} + \texttt{BCR} + \texttt{LINK} + \texttt{P8} + \texttt{STOP}
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

V [55, 56] so Kočar in sod. podrobneje raziskali vpliv stabilnosti in razporeditve gradbenih elementov na kinetiko samosestavljanja, ker je za tvorbo struktur, ki tvorijo vozle pomemben vrstni red parjenja.

1.3 Matematični model samosestavljive nanostrukture

Polieder P, ki ga sestavlja polipeptidna veriga, naravno predstavimo z grafom poliedra $G(P)$. Samosestavljiva struktura nastane tako, da se odseki, ki tvorijo ovite vijačnice, povežejo v dimere in hkrati tudi zaklenejo v stabilno poliedrsko strukturo. Vsaka povezava grafa $G(P)$ v tehnološkem smislu predstavlja dva odseka, ki tvorita dimer ovitih vijačnic. Od tod zanimanje za podvojeni graf grafa $G(P)$. Ker pa je ob tem pri odsekih, ki tvorijo dimere ovitih vijačnic, pomembna tudi usmeritev, povezave podvojenega grafa $G(P)$ usmerimo, da dobimo digraf $D(P)$. Dejstvo, da želimo, da se polipeptidna veriga zaklene v stabilno strukturo, simuliramo tako, da v digrafu $D(P)$ iščemo Eulerjeve obhode, ti pa, kot sta opazila že Euler in König, ustrezajo dvojnim obhodom v originalnem grafu $G(P)$. To, kako so pari povezav identificirani v dvojnem obhodu (kdaj se v dvojnem obhodu pojavita dve ponovitvi neke povezave grafa $G(P)$), nam pove, v kakšnem vrstnem redu je potrebno pred samosestavljanjem povezati peptide v polipeptidno verigo.

Nadalje želimo, da bi se pari odsekov, ki zaporedoma ležijo v polipeptidni verigi, stikali tudi v vozliščih grafa. Če za matematični model vzamemo dvojni obhod v grafu poliedra, nam ta sam po sebi še ne zagotavlja, da bo nastala struktura stabilna. Če namreč za vozlišča v z dvojnim obhodom W simuliranem grafu poliedra vzamemo kar krajišča odsekov, bi v primeru, da ima W v vozlišču v N-ponovitev, za nek $N \subset N(v)$, polieder lahko razpadel v več vozlišč nižje stopnje. Posledično za W zahtevamo, da je brez netrivialnih N-ponovitev in nas torej zanimajo strogi obhodi grafa $G(P)$.

Matematični model strategije za oblikovanje samosestavljivih struktur lahko torej povzamemo kot:

(i) v grafu $G(P)$ poiščemo strogi obhod W,

(ii) identificiramo pare povezav v W, kar naj bi za rezultat dalo začetni graf $G(P)$.

Problem, zakaj se polipeptidna veriga v 1.4 ni sestavila v tetraeder, tiči v tem, da le-ta, ob upoštevanju, kateri pari peptidov bodo tvorili dimere, ne predstavlja strogega obhoda v tetraedrskem grafu.

Peptide, uporabljene za konstrukcijo samosestavljive nanostrukture, predstavljene z grafom $G(P)$, lahko zberemo v multimnožici $\mathcal{P}$, moči $2m$, pri čemer m predstavlja število povezav grafa $G(P)$. Konstruiramo graf, katerega vozlišča so elementi multimnožice $\mathcal{P}$, in dve vozlišči med seboj povežemo, če sta njuna pripadajoča peptida kompatibilna. Če lahko, tako konstruirani graf predstavimo kot disjunktno unijo m kopij polnega grafa K_2, je multimnožica peptidov $\mathcal{P}$ ortogonalna. Biološka problema preverjanja ali je neka multimnožica peptidov ortogonalna in iskanja velikih ortogonalnih multimnožic peptidov, lahko torej predstavimo kot kombinatorična problema. Kljub njuni zanimivosti, pa se v disertaciji z njima ne bomo ukvarjali in bomo privzeli, da je ortogonalna multimnožica peptidov podana. V primeru `TET12` je bila tako podana ortogonalna multimnožica $\{\mathtt{APH}, \mathtt{APH}, \mathtt{BCR}, \mathtt{BCR}, \mathtt{GNC_{sh}}, \mathtt{GNC_{sh}}, \mathtt{P3}, \mathtt{P4}, \mathtt{P5}, \mathtt{P6}, \mathtt{P7}, \mathtt{P8}\}$ (pri čemer so ortogonalne pare predstavljali $(\mathtt{APH}, \mathtt{APH})$, $(\mathtt{BCR}, \mathtt{BCR})$, $(\mathtt{GNC_{sh}}, \mathtt{GNC_{sh}})$, $(\mathtt{P3}, \mathtt{P4})$, $(\mathtt{P5}, \mathtt{P6})$ in $(\mathtt{P7}, \mathtt{P8})$).

Poglavje 2

Strogi obhodi

V tem poglavju razložimo povezavo med strogimi obhodi in vložitvami grafov (predstavljenimi v razdelku 1.1.2) ter znane rezultate na področju slednjih uporabimo za karakterizacijo grafov, ki vsebujejo stroge obhode.

2.1 Vložitve grafov z enim licem

Preden lahko karakteriziramo grafe, ki vsebujejo stroge obhode, si oglejmo še posebne vložitve grafov—*vložitve grafov z enim licem.* Vložitev grafa z enim licem je poseben primer *vložitve grafa s k lici*, ki jo definiramo kot vložitev z natanko k ličnimi obhodi. Naslednji izrek sta dokazala Edmonds [25] in kasneje neodvisno Pisanski [72].

Izrek 2.1 ([25], [72]) *Vsak povezan graf ima vložitev z enim licem v neko ploskev* Σ.

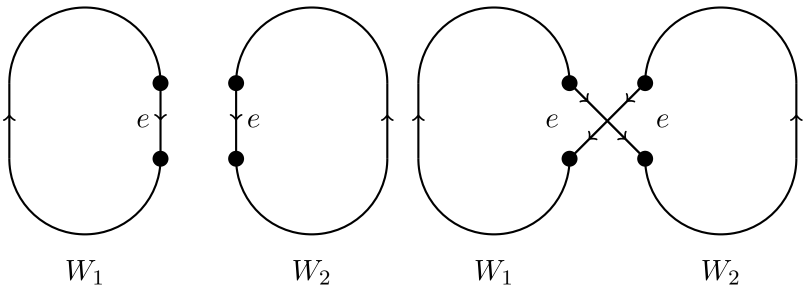
Eden izmed načinov, kako dokazati izrek 2.1, predstavljen v [72], je sledeč.

Dokaz. Naj bo (Π, λ) kombinatorična vložitev povezanega grafa G z najmanjšim številom ličnih obhodov. Če je število ličnih obhodov najmanj 2, obstaja neka povezava $e = uv$, ki je vsebovana v dveh različnih ličnih obhodih W_1 in W_2. Trdimo, da s spremembo oznake povezave e dobimo kombinatorično vložitev, ki ima vsaj en lični obhod manj kot originalna kombinatorična vložitev.

Predpostavimo lahko, da W_1 in W_2 prečkata povezavo e v isti smeri (sicer obrnemo smer prečkanja vseh povezav v enem izmed ličnih obhodov). Če po spremembi oznake sledimo ličnemu obhodu W_1 in nadaljujemo vzdolž povezave e, nas ta vodi v W_2, potem pa prek e spet nazaj v W_1. To pomeni, da sta se lična obhoda W_1 in W_2 združila v enega. Postopek je prikazan na sliki 2.1. Ker ostali lični obhodi pri tem ostanejo nespremenjeni, ima tako dobljena kombinatorična vložitev najmanj en lični obhod manj kot originalna.

Z indukcijo na število ličnih obhodov sedaj dokažemo, da za vsak povezan graf obstaja kombinatorična vložitev z enim ličnim obhodom. □

Enostavna posledica zgornjega izreka 2.1 je naslednji klasični rezultat, ki ga je v [76] predstavil Ringel.



(a) W_1 in W_2

(b) $W_1 \cup W_2$

Slika 2.1: Združevanje ličnih obhodov prek skupne povezave

Izrek 2.2 ([76, Theorem 13], [84, Theorem 8]) *Vsak povezan graf, ki ni drevo, ima vložitev z enim licem v neko neorientabilno ploskev.*

Dokaz. Naj bo G povezan graf, ki ni drevo, in (Π, λ) vložitev grafa G z enim licem v neko ploskev Σ, ki po izreku 2.1 zagotovo obstaja.

Predpostavimo, da je Σ orientabilna (sicer ni kaj dokazovati) in naj bo W (edini) lični obhod vložitve (Π, λ). W vsako povezavo grafa G prečka dvakrat, vsakič v eni smeri. Ker G ni drevo, obstaja povezava $e = u_1v_1$, ki ni prerezna povezava. Trdimo, da s spremembo oznake povezave e konstruiramo vložitev (Π', λ') grafa G z enim licem v neko neorientabilno ploskev Σ'.

Naj bo

$$W = u_0 \dots f_1u_1ev_1e_2v_2 \dots v_ke_kv_1eu_1g_1 \dots u_\ell$$

($u_\ell = u_0$). S spremembo oznake povezave e dobimo novo vložitev, katere edini lični obhod je enak

$$W' = u_0 \dots f_1u_1ev_1e_kv_k \dots v_2e_2v_1eu_1g_1 \dots u_0$$

(dobimo ga tako, da obrnemo vrstni red in smer povezav, prehojenih med ponovitvama povezave e v W).

Ker e ni prerezna povezava, obstaja cikel C, ki gre skozi e in vsebuje liho število povezav, katerih oznaka λ' je negativna (pred tem je bilo na vsakem ciklu v G sodo takih povezav, sedaj pa smo spremenili le eno oznako in nobenega cikla). Sledi, da je Σ' neorientabilna ploskev. □

2.2 Grafi s strogimi obhodi

Naj bo sedaj $W = v_0e_1v_1 \dots v_{\ell-1}e_\ell v_\ell$ dvojni obhod grafa G. Fiksirajmo vozlišče v grafa G in z $E(v)$ označimo povezave, ki izhajajo iz v. Sestavimo (ne nujno povezan)

2-regularni multigraf (unijo ciklov) $F_{v,W}$, ki bo imel za množico vozlišč $E(v)$, tako da v njem povežemo $e, e' \in E(v)$ natanko tedaj, ko sta e in e' dve povezavi, ki ju W prečka eno za drugo. Če ima W v v 1-ponovitev, bo imel $F_{v,W}$ zanko, 2-ponovitev W v v pa bi pomenila vzporedne povezave v $F_{v,W}$. Tako definiran multigraf $F_{v,W}$ je poznan kot *vozliščna slika* v (v povezavi z dvojnim obhodom W), njegovo povezavo z vložitvami grafov pa najbolje opiše trditev 2.3. Vozliščno sliko lahko enako definiramo tudi za množico ličnih obhodov.

Trditev 2.3 *Naj bo G povezan graf in W dvojni obhod v njem. Potem je W strogi obhod natanko tedaj, ko $F_{v,W}$ za vsako vozlišče v grafa G sestoji iz enega samega cikla.*

Dokaz. Naj bo G povezan graf in W poljuben dvojni obhod v G (ta po trditvi 1.5 zagotovo obstaja). Predpostavimo najprej, da W ni strogi obhod. To pomeni, da ima W v nekem vozlišču v grafa G netrivialno N-ponovitev. Z N' označimo $N(v) \setminus N$, ki je prav tako neprazna množica. Trdimo, da je vozliščna slika $F_{v,W}$ sestavljena iz najmanj dveh ciklov.

Naj bo e povezava sosednja z v in vozliščem v N. V $F_{v,W}$ je e lahko soseden samo povezavam iz $E(v, N)$. Posledično nobena povezava iz $E(v, N')$ ne leži v istem ciklu $F_{v,W}$ kot e, od koder sledi, da ima $F_{v,W}$ najmanj dva cikla.

Za dokaz preostale implikacije iz trditve 2.3 naj bo W strogi obhod povezanega grafa G in v poljubno vozlišče v G. Naj $F_{v,W}$ vsebuje dva disjunktna cikla C_1 in C_2. Označimo z N množico krajišč povezav iz C_1 v G. Potem ima W v v N-ponovitev, ker vsakič, ko W potuje prek v, prihajajoč iz vozlišča v N, tudi nadaljuje proti vozlišču v N. Ker pa velja $N \neq \emptyset$ in $N \neq N(v)$, sledi, da je N netrivialna ponovitev. To pa je v protislovju s predpostavko, da je W strogi obhod. S tem je trditev 2.3 dokazana. $\square$

Naj bo G povezan graf in W dvojni obhod v njem. Če je $F_{v,W}$ sestavljen iz enega cikla, ga lahko skupaj z orientacijo (smer, v kateri potujemo po tem ciklu) razumemo kot ciklično permutacijo π_v za $E(v)$. Še več, če je vsaka vozliščna slika povezanega grafa sestavljena iz enega cikla, je množica cikličnih permutacij $\Pi = \{\pi_v \mid v \in V(G)\}$ prva komponenta kombinatorične vložitve, katere edini lični obhod je W.

Sedaj lahko dokažemo naslednji izrek.

Izrek 2.4 *Vsak povezan graf vsebuje strogi obhod.*

Dokaz. Po izreku 2.1 ima vsak graf vložitev (Π, λ) z enim licem v neko sklenjeno ploskev Σ. Edini lični obhod te vložitve W je dvojni obhod in ker je vozliščna slika $F_{v,W}$ za vsako vozlišče sestavljena iz enega cikla, po trditvi 2.3 sledi, da je W strogi obhod. S tem je dokaz izreka 2.4 končan. $\square$

Izrek 2.4 implicira naslednjo posledico, pomebno za konstrukcijo polipeptidnih nanostruktur z novo strategijo.

Posledica 2.5 *Vsak povezan graf G je lahko (vsaj v teoriji) konstruiran iz verige odsekov, ki tvorijo ovite vijačnice.*

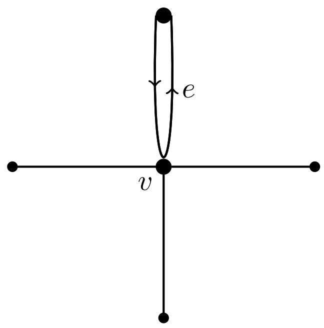
Da se polipeptidna veriga v praksi zvije v strukturo, predstvaljeno z nekim želenim grafom G, je nadalje odvisno še od ortogonalnosti uporabljenih peptidov—lastnosti, da vsak izmed peptidov dimero tvori le z natanko tistim peptidom, ki bo, v za matematični model uporabljenem strogem obhodu, ležal na isti povezavi grafa G. Izbira primernih peptidov predstavlja, kot smo omenili že v uvodu, kombinatorični problem (problem izpolnjevanja omejitev).

Poglavje 3

d-stabilni obhodi

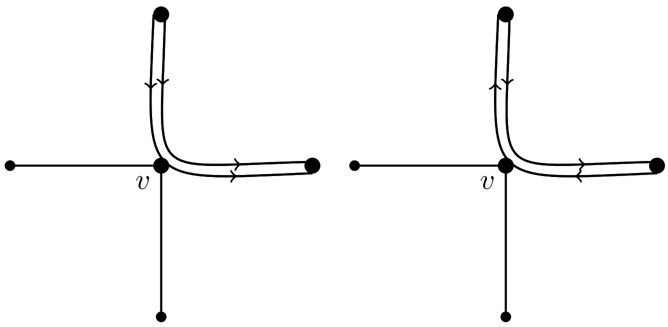
Preden predstavimo karakterizacijo grafov, ki vsebujejo d-stabilne obhode, preglejmo posebna primera d-stabilnih obhodov—1-stabilne in 2-stabilne obhode.

V [53] sta bili predstavljeni alternativni definiciji 1-ponovitve in 2-ponovitve ter posledično tudi 1-stabilnih in 2-stabilnih obhodov (obe z istim pomenom kot ga ima definicija 1.7 za $d = 1$ ali $d = 2$). Dvojni obhod W vsebuje 1-ponovitev (poimenovano tudi *retrakcija*) natanko tedaj, ko povezavi e v W nemudoma sledi njena kopija. 1-ponovitev je prikazana na sliki 3.1. 1-stabilni obhod je dvojni obhod brez 1-ponovitev.



Slika 3.1: 1-ponovitev ali retrakcija povezave e

Nadalje, dvojni obhod grafa G vsebuje 2-ponovitev, kadar se zaporedje vozlišč $u \to v \to w$ v njem pojavi dvakrat v kateremkoli vrstnem redu ($u \to v \to w$ ali $w \to v \to u$), pri tem je v vozlišče grafa G, u in w pa njegova soseda. 2-ponovitev je prikazana na sliki 3.2. 2-stabilni obhod je dvojni obhod brez 1-ponovitev in brez 2-ponovitev.



Slika 3.2: Možni 2-ponovitvi v vozlišču v

3.1 1-stabilni obhodi

1-stabilni obhodi so bili v preteklosti (pod različnimi imeni, med drugim tudi kot *pravilni obhodi*) že precej raziskani. Tako so Sabidussi leta 1977 v [79] ter kasneje neodvisno še Eggleton in Skilton v [26] dokazali naslednji izrek.

Izrek 3.1 ([79], [26, Theorem 9]) *Povezan graf G vsebuje 1-stabilni obhod natanko tedaj, ko je njegova minimalna stopnja $\delta(G) > 1$.*

Eggleton in Skilton sta v svojem delu pokazala, da izrek 3.1 velja tudi za števno neskončne grafe.

3.2 2-stabilni obhodi

2-stabilni obhodi, poimenovani tudi *stabilni obhodi*, so v začetku služili kot matematični model samosestavljivih nanostruktur iz polipeptidov. Z napredkom tehnologije, ki bi lahko omogočala konstrukcijo večjih struktur, pa sta se pri takšnem matematičnem modelu pokazali dve pomanjklivosti:

(i) ne upošteva vozlišč stopnje ≤ 2,

(ii) neuspešno modelira vozišča stopnje ≥ 6.

Medtem ko točka (i) preprečuje naknadno obešanje dodatnih reaktivnih delov na polipeptidno strukturo, pa ima lahko točka (ii) za rezultat pri konstrukciji struktur, ki jih predstavimo z grafom G maksimalne stopnje $\Delta(G) \geq 6$, tudi povsem drugačno obliko od pričakovane. V takšnem 2-stabilnem obhodu W se namreč v vozlišču v, $d(v) \geq 6$, lahko pojavi 3-ponovitev, kar pa v praksi prinaša nestabilno strukturo, saj lahko G v v razpade na več vozlišč stopnje 3, kot je prikazano na sliki 1.1 v razdelku 1.1.1.

Najprej je Klavžar v [46] dokazal, da vsak kubični graf vsebuje 2-stabilni obhod.

Lema 3.2 ([46, Theorem 1]) *Vsak povezan kubični graf vsebuje* 2*-stabilni obhod.*

Dokaz. Naj bo G kubični graf z m povezavami (poljuben dvojni obhod v G je torej dolžine $2m$). Zaradi simetrije ponovitev za kubične grafe zadostuje, da v njih poiščemo 1-stabilni obhod (dvojni obhod brez 1-ponovitev je v kubičnem grafu namreč tudi brez 2-ponovitev).

Naj bo $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ poljuben dvojni obhod grafa G. Pri tem se, ker je G kubični, vsako vozlišče grafa G ujema z natanko tremi w_i za $0 \leq i \leq 2m$. Z r označimo število 1-ponovitev v W. Če je $r = 0$, je W že 1-stabilni (in hkrati tudi 2-stabilni) obhod. Zato predpostavimo, da je $r \geq 1$. Ker je dvojni obhod sklenjen, je vseeno, katero vozlišče izberemo kot prvo. Zato lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da se W začne z 1-ponovitvijo: $w_0, w_1, w_2 = w_0$. Nadalje izberimo tak indeks i, da je $w_i = w_1$ in je ob tem $i \geq 2$ najmanjši možen. Takšen i zagotovo obstaja, saj vsako vozlišče grafa G v W nastopi trikrat. Ker je G brez zank in smo povezavo, ki ustreza w_0w_1 v W, že prečkali dvakrat, velja, da $w_{i+1} \neq w_0, w_1$ in da je $i \geq 4$.

Sedaj si oglejmo $W' = w_0, w_1, w_{i-1}, w_{i-2}, \ldots, w_3, w_0, w_1, w_{i+1}, w_{i+2}, \ldots, w_{2m}$. W' je še vedno dvojni obhod grafa G brez 1-ponovitve $w_0, w_1, w_2 = w_0$. Že prej smo ugotovili, da tudi w_0, w_1, w_{i+1} in w_3, w_0, w_1 ne predstavljajo 1-ponovitve. Katerakoli 1-ponovitev v W' se pojavi že v W. Od tod sledi, da ima W' največ $(r-1)$ 1-ponovitev. Če postopek nadaljujemo, po končnem številu korakov dobimo 1-stabilni (in hkrati tudi 2-stabilni) obhod grafa G. □

V [53] so bili nadalje karakterizirani grafi, ki vsebujejo 2-stabilne obhode.

Izrek 3.3 *Povezan graf G vsebuje* 2*-stabilni obhod natanko tedaj, ko je njegova minimalna stopnja $\delta(G) > 2$.*

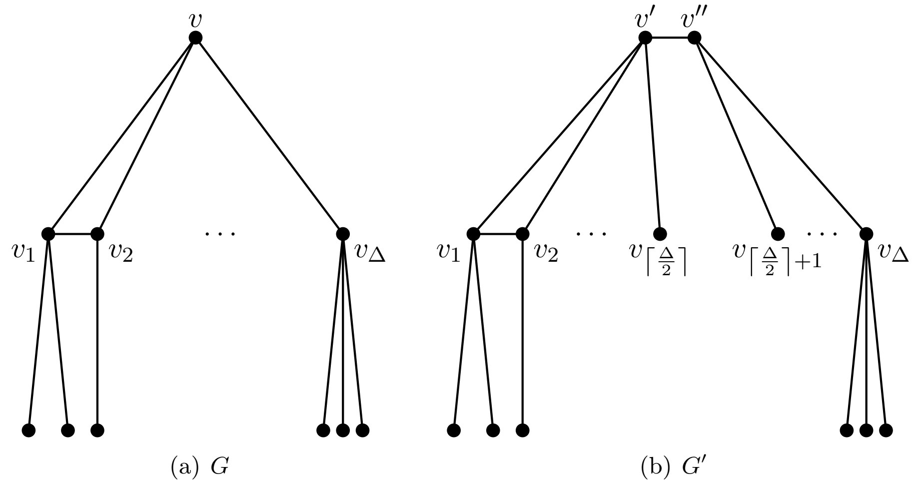
Dokaz. Predpostavimo najprej, da graf G vsebuje 2-stabilni obhod W. Iz izreka 3.1 sledi, da G ne vsebuje vozlišča stopnje 1. Še več, G ne vsebuje vozlišč stopnje 2, ker bi takšno vozlišče v pomenilo, da ima W v v 2-ponovitev skozi v.

Za dokaz preostale implikacije izreka 3.3 naj bo G poljuben povezan graf z $\delta(G) > 2$. Nadaljujemo z indukcijo na maksimalno stopnjo $\Delta = \Delta(G)$ grafa G.

Naj bo najprej $\Delta = 3$. To pomeni, da je $\delta(G) = \Delta(G) = 3$ in posledično, da je G kubični graf. Zanj pa po lemi 3.2 drži, da vsebuje 2-stabilni obhod.

Predpostavimo torej, da je $\Delta \geq 4$ in da vsak graf H, $\Delta(H) < \Delta$ in $\delta(H) > 2$, vsebuje 2-stabilni obhod. Nadalje za začetek privzemimo, da ima G le eno vozlišče v stopnje Δ. Z $v_1, \ldots, v_\Delta$ označimo sosede vozlišča v in konstruirajmo graf G' iz G tako, da najprej odstranimo vozlišče v iz G in ga zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v''. Povežimo vozlišči v' in v''. Ob tem povežimo v' še z vozlišči $v_1, \ldots, v_{\lceil \frac{\Delta}{2} \rceil}$, v'' pa s preostalimi sosedi izbrisanega vozlišča v. Konstrukcija je prikazana na sliki 3.3.

Hitro opazimo, da so vsa vozlišča v G' razen v' in v'' enake stopnje, kot so bila v G. Ker sta hkrati $d_{G'}(v') = \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil + 1$ in $d_{G'}(v'') = \lfloor \frac{\Delta}{2} \rfloor + 1$, sledi, da je $\Delta(G') < \Delta$. Ker



Slika 3.3: Konstrukcija grafa G' iz G z zamenjavo vozlišča v s povezavo $v'v''$

velja $\Delta \geq 4$, še vedno velja tudi $\delta(G') > 2$. Od tod po indukcijski predpostavki sledi, da G' vsebuje 2-stabilni obhod W'.

Sedaj uporabimo 2-stabilni obhod W' v G', da konstruiramo obhod W v G. Izberemo začetno vozlišče in začetno smer v W' ter potujemo prek povezav v enakem vrstnem redu, kot prek njih potuje W'. Naj bo $e = xy$ poljubna povezava (skupaj s svojo usmeritvijo), ki jo pri tem prečkamo. Če sta $x, y \in V(G') \setminus \{v', v''\}$, dodamo xy v W. Naj bo nadalje $u \neq v', v''$. Če je $e = uv'$, potem e v W zamenjamo z uv. Analogno povezave oblik $v'u$, uv'' in $v''u$ v W' zamenjamo z vu, uv in vu v W. Obe pojavitvi povezave $v'v''$ (ali $v''v'$) preprosto izpustimo.

Trdimo, da je tako konstruiran W 2-stabilni obhod grafa G. Najprej opazimo, da vsaka povezava e grafa G ustreza neki povezavi e' grafa G', pri čemer $e' \neq v'v''$. Ker W' povezavo e' prečka dvakrat, sledi, da tudi W prečka e dvakrat in da je W dvojni obhod grafa G. Naj bosta $e = xy$ in $f = yz$ poljubni povezavi v G, ki ju W prečka eno za drugo. Če je $\{x, y, z\} \cap \{v\} = \emptyset$, potem W nima 1-ponovitve in 2-ponovitve v y, saj bi takšno ponovitev v y imel že W'. Enako velja, če je $x = v$ ali $z = v$. Predpostavimo sedaj, da je $y = v$, kar pomeni, da morata biti $x = v_i$ in $z = v_j$ za $1 \leq i, j \leq \Delta$. Obravnavamo dva primera. V prvem naj bosta $i, j \leq \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil$. To pomeni, da sta bili povezavi e in f dobljeni iz $v_i v'$ in $v' v_j$. Ker je W' brez 1-ponovitve in 2-ponovitve v v', to velja tudi za W. Analogno velja tudi v primeru, ko sta $i, j > \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil$ (v zgornjem argumentu samo zamenjamo v' z v''). V drugem primeru naj velja $i \leq \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil < j$. To pomeni, da sta bili povezavi e in f dobljeni iz $v_i v'$, $v'v''$ in $v'' v_j$. Ker W' prečka povezavo $v'v''$ dvakrat, bi dejstvo, da sta e in f del 1-ponovitve ali 2-ponovitve W v v, pomenilo, da ima W' 1- ali 2-ponovitev v v' in v'', kar pa je protislovno s predpostavko, da je W' 2-stabilni obhod. Od tod lahko zaključimo, da je tudi W 2-stabilni obhod.

S tem smo dokazali, da graf G, ki vsebuje eno samo vozlišče stopnje Δ, vsebuje 2-stabilni obhod. Nadaljujemo z drugo indukcijo na število $D_{\max}(G)$, ki predstavlja število vozlišč maksimalne stopnje v G. Naj bo $D_{\max}(G) \geq 2$ in v poljubno vozlišče stopnje Δ v G. Enako kot zgoraj konstruirajmo G' iz G tako, da v zamenjamo z dvema sosednjima vozliščema, med katera enakomerno porazdelimo (povežemo z njima) sosede vozlišča v. Ker je $D_{\max}(G') < D_{\max}(G)$, sledi, da G vsebuje 2-stabilni obhod. Po indukcijski predpostavki pa nadalje sledi, da tudi G vsebuje 2-stabilni obhod. □

Klasični Steinitzev izrek iz [85] pravi, da je vsak 3-povezan ravninski graf G izomorfen grafu poliedra ($G = G(P)$, za nek polieder P) in obratno, da je za vsak polieder P, graf $G(P)$ 3-povezan ravninski graf. Tudi to je eden izmed razlogov za naše zanimanje za 2-stabilne obhode.

3.3 Alternativni dokaz izreka o 1-stabilnih obhodih

Preden predstavimo še alternativni dokaz izreka 3.1, predstavljen v [53], ki temelji na podlagi ideje dokaza izreka 3.3, si oglejmo še lemo o relaciji med številoma 1-stabilnih obhodov v grafu G in njegovih subdivizijah.

Lema 3.4 *Graf G vsebuje 1-stabilni obhod natanko tedaj, ko ga vsebuje tudi poljubna subdivizija H grafa G. Še več, število 1-stabilnih obhodov v G se ujema s številom 1-stabilnih obhodov v H.*

Dokaz. Naj bo G graf, v vozlišče stopnje 2 v njem in W njegov 1-stabilni obhod. Prvi del leme sledi iz dejstva, da vsakič, ko W pride v v iz u, nadaljuje proti vozlišču, ki je različno od u, za kar pa ima le eno možnost. Zato lahko vozlišča stopnje 2 ignoriramo.

Drugi del leme sledi iz dejstva, da je moč vsak 1-stabilni obhod W v G enolično dvigniti v 1-stabilni obhod v H. □

Ker so bili grafi, ki vsebujejo 1-stabilne obhode, v preteklosti tako raziskani, se zdi smiselno, da v nadaljevanju razdelka predstavimo še nov alternativni dokaz izreka 3.1, ki pri tem ubere drugačen pristop.

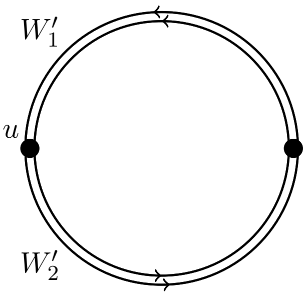
Dokaz. Predpostavimo najprej, da G vsebuje 1-stabilni obhod W. Potem G nima vozlišča stopnje 1, saj bi takšno vozlišče moralo povzročiti 1-ponovitev v W.

Za dokaz preostale implikacije izreka 3.1 naj bo G poljuben povezan graf z $\delta(G) > 1$. Nadaljujemo z indukcijo na maksimalno stopnjo grafa G, $\Delta = \Delta(G)$.

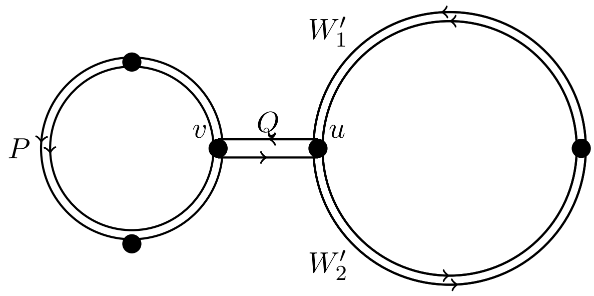
Za $\Delta = 2$ to pomeni, da je $\delta(G) = \Delta(G) = 2$ in ker je G povezan, sledi, da je G cikel. 1-stabilni obhod v ciklu pa enostavno konstruiramo tako, da začnemo v poljubnem vozlišču in dvakrat prečkamo celoten graf. Če je $\delta(G) = \Delta(G) = 3$, je G kubični in po lemi 3.2 sledi, da G vsebuje 2-stabilni obhod W, ki pa je hkrati seveda tudi 1-stabilni obhod.

Naj bo sedaj $\delta(G) = 2$ in $\Delta(G) = 3$. Po lemi 1.1 sledi, da je število vozlišč stopnje 3, označimo ga z D, sodo. Za začetek predpostavimo, da je $D = 2$, in označimo vozlišči stopnje 3 z v_1 in v_2. V tem primeru G vsebuje natanko tri notranje disjunktne poti (brez skupnih vozlišč in povezav) s krajišči v v_1 in/ali v_2, označimo jih s P', P'' in P'''. Za P', P'' in P''' velja eno izmed naslednjega: ali so vse tri poti z enim krajiščem v v_1 in drugim krajiščem v v_2 ali pa se (brez škode za splošnost) P' začne in konča v v_1, P'' začne in konča v v_2, P''' pa ima eno krajišče v v_1, drugo pa v v_2. V prvem primeru lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da sta poti P'' in P''' dolžine vsaj 2 (saj je v G med v_1 in v_2 največ ena povezava). Potem je $v_1 \to P' \to v_2 \to P'' \to v_1 \to P''' \to v_2 \to P'' \to v_1 \to P' \to v_2 \to P''' \to v_1$ 1-stabilni obhod. V drugem primeru sta dolžine vsaj 2 poti P' in P'' (saj je G brez zank). Zato je v tem primeru $v_1 \to P' \to v_1 \to P' \to v_1 \to P''' \to v_2 \to P'' \to v_2 \to P'' \to v_2 \to P''' \to v_1$ 1-stabilni obhod. Pri tem opozorimo, da $P' \to v_1 \to P'$ ne vsebuje 1-ponovitve, saj pot P' dvakrat prečkamo v isti smeri (enako velja tudi za $v_2 \to P'' \to v_2$).

Nadalje predpostavimo, da je $\delta(G) = 2$, $\Delta(G) = 3$ in $D \geq 4$. Če je G subdivizija kubičnega grafa, potem po lemi 3.4 sledi, da G vsebuje 1-stabilni obhod. V nasprotnem v G obstajata vozlišče v stopnje 3 in pot P dolžine najmanj 2, ki se začne in konča v v, ob tem pa so vsa ostala vozlišča na njej stopnje 2. Naj bosta najprej v in P edina vozlišče in pot s takšno lastnostjo. Z e označimo edino preostalo povezavo sosednjo z v, ki ni vsebovana v P. Ker je $\delta(G) = 2$, v G obstaja pot Q, ki se začne v v, je notranje disjunktna s P, vsebuje e in se konča v vozlišču u, ki je prav tako kot v stopnje 3. Naj bo G' graf, ki ga dobimo, če iz G odstranimo vsa vozlišča iz P in Q razen u. Hitro opazimo, da so vsa vozlišča v G' razen u enake stopnje, kot so bila v G. Ker je $d_{G'}(u) = 2$, sledi, da je število lihih vozlišč v G' enako $D - 2$ in posledično (po indukciji na D), da G' vsebuje 1-stabilni obhod W'. W' lahko zapišemo tudi kot $W'_1 \to u \to W'_2$, pri čemer pa W'_1 in W'_2 nista nujno disjunktna. Trdimo, da je $W = W'_1 \to u \to Q \to v \to P \to v \to P \to v \to Q \to u \to W'_2$ 1-stabilni obhod grafa G (konstrukcija je prikazana na sliki 3.4).



(a) G'

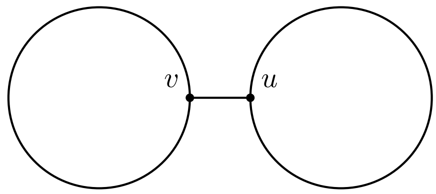


(b) G

Slika 3.4: Konstrukcija 1-stabilnega obhoda v G iz dokaza izreka 3.1

Brez težav ugotovimo, da se vsaka povezava grafa G v W pojavi dvakrat (za povezave iz P in Q je to razvidno iz konstrukcije, medtem ko vse ostale dvakrat nastopijo v W'). Ker je W' brez 1-ponovitev, te pa ne ustvarimo niti med konstrukcijo W iz W', sledi, da je tudi W 1-stabilni obhod. Zaključimo, da G vsebuje 1-stabilni obhod, kadar ima eno vozlišče v stopnje 3 s potjo, ki se začne in konča v v in medtem prečka samo vozlišča stopnje 2.

Če ima G več takšnih vozlišč, nadaljujemo z indukcijo na njihovo število. Izjema se pojavi le v primeru, ko imajo vsa vozlišča v G, ki so stopnje 3, opisano lastnost. Ko ponavljamo zgoraj opisan postopek, namreč dobimo graf G', ki ima natanko dva disjunktna cikla (označimo ju s C_1 in C_2) in natanko dve vozlišči (označimo ju z u in v) stopnje 3. Vozlišče u pri tem leži na C_1, v pa na C_2. Vozlišči u in v sta med seboj povezani, vsa ostala vozlišča v C_1 in C_2 pa so stopnje 2. G' je prikazan na sliki 3.5. Ni težko pokazati, da je $u \to C_1 \to u \to C1 \to u \to v \to C_2 \to v \to C_2 \to v \to u$ 1-stabilni obhod v G'.



Slika 3.5: Poseben primer v dokazu izreka 3.1

Da dokončamo dokaz, predpostavimo, da vsak graf H z $\delta(H) > 1$ in $\Delta(H) \leq \Delta$, kjer $\Delta \geq 3$, vsebuje 1-stabilni obhod. Naj bo G graf z $\delta(G) > 1$ in $\Delta(G) = \Delta + 1$. Uporabimo enako konstrukcijo kot v dokazu izreka 3.3 in poljubno vozlišče stopnje $\Delta+1$ v G nadomestimo z dvema vozliščema nižje stopnje. Za tako konstruirani graf G' velja $\delta(G') > 1$ in $\Delta(G') = \Delta$. Če upoštevamo indukcijsko predpostavko in zaključke, do katerih smo prišli v dokazu izreka 3.3, ugotovimo, da tudi G vsebuje 1-stabilni obhod, kar konča naš dokaz. □

3.4 Grafi z d-stabilnimi obhodi

Izrek 2.4 implicira naslednjo trditev, ki nadalje implicira izrek 3.1 in izrek 3.3 ter predstavlja karakterizacijo grafov, ki vsebujejo d-stabilne obhode.

Trditev 3.5 *Naj bo G povezan graf. Potem G vsebuje d-stabilni obhod natanko tedaj, ko je $\delta(G) > d$.*

Dokaz. Dovolj je, da opazimo, da je strogi obhod v grafu G hkrati tudi d-stabilni obhod, kadar G ne vsebuje vozlišča stopnje $\leq d$. To pa sledi po lemi 1.8. □

Poglavje 4

Xuongova drevesa in njihovi približki

Poglavje posvetimo predstavitvi nekaterih ugotovitev o vpetih drevesih, katerih ko-drevesa zadostujejo določenim lastnostim. V [101] in [102] je Xuong predstavil povezavo dreves, za katere imajo ko-drevesa same sode povezane komponente z vložitvami grafov v orientabilne ploskve. Mi pa v nadaljevanju v poglavju 5 drevesa s podobnimi lastnostmi uporabimo za karakterizacijo grafov, ki vsebujejo stroge in d-stabilne obhode z dodatnimi lastnostmi, povezanimi z usmeritvijo povezav.

V uvodu smo definirali pomanjkljivostno število vpetega drevesa T v grafu G kot število lihih komponent v ko-drevesu $G - E(T)$ in pomanjkljivostno število grafa G kot minimalno pomanjkljivostno število drevesa med vsemi pomanjkljivostnimi števili vpetih dreves grafa G. Vpeto drevo, ki realizira pomanjkljivostno število grafa, imenujemo Xuongovo drevo, saj je drevesa z omenjeno lastnostjo prvič predstavil Xuong v [101] in [102]. V tem poglavju nekoliko zaostrimo omenjene pogoje in za vpeto drevo T grafa G zahtevamo, da vse lihe komponente ko-drevesa $G - E(T)$ vsebujejo vozlišče stopnje najmanj d. Takšna drevesa označimo z $XT(d)$ ter zanje definiramo d-pomanjkljivostno število, $\xi_d(G,T)$ kot število lihih komponent v njih. Analogno lahko za graf G, ki ima vsaj eno vpeto drevo $XT(d)$ z omenjeno lastnostjo, definiramo *d-pomanjkljivostno število grafa G*, $\xi_d(G)$ kot minimalno število lihih komponent v ko-drevesih $G - E(T)$, pri čemer izbiramo samo med vpetimi drevesi T v G, za katere ima vsaka liha komponenta v $E(G) - T$ vozlišče stopnje najmanj d. Jasno je, da za vsako nenegativno celo število d in graf G, za katerega je mogoče definirati d-pomanjkljivostno število, velja: $\xi(G) \leq \xi_d(G)$. Za vpeto drevo T, ki realizira $\xi_d(G)$, je namreč $\xi_d(G,T) = \xi(G,T)$, z izpustitvijo pogoja, da vsaka liha komponenta ko-drevesa vsebuje vozlišče dovolj visoke stopnje, pa obstaja možnost, da v G najdemo vpeto drevo T' s $\xi(G,T') < \xi(G,T)$.

Ker je poljubno vozlišče $v \in V(G)$ vsebovano v največ eni (lihi ali sodi) povezani komponenti ko-drevesa $G - E(T)$, je smiselna tudi naslednja definicija.

Definicija 4.1 *Naj bo G graf, T vpeto drevo v G, C liha komponenta v $G - E(T)$ in v poljubno vozlišče v G. Naj bodo $v_1, \ldots, v_c$ sosedi v v C. Če odslej na C gledamo kot na samostojen graf, je $\mathcal{O}(v,T)$ množica lihih komponent, ki jih dobimo iz C, če v nadomestimo s c novimi vozlišči, ki jih paroma povežemo z $v_1, \ldots, v_c$. Analogno množico sodih komponent označimo z $\mathcal{E}(v,T)$.*

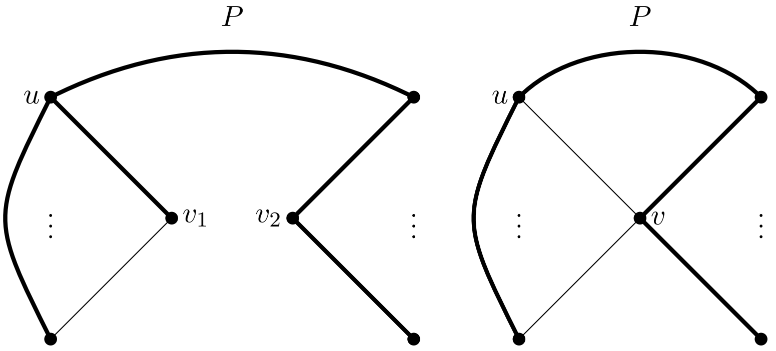
Ker je C iz definicije 4.1 liha komponenta, velja, da je $|\mathcal{O}(v,T)| \geq 1$ in $|\mathcal{O}(v,T)|$ liho. Do konca poglavja dokažemo več lem, povezanih z vpetimi drevesi.

Lema 4.2 *Naj bo G povezan graf, $V_T \subseteq V(G)$, v poljubno vozlišče stopnje vsaj 2 v G, d naravno število, večje ali enako 4 in $N_1, \ldots, N_k \subseteq N(v)$ particija sosedov vozlišča v, pri čemer je $2 \leq k \leq d(v)$. Naj bo G' graf, ki ga dobimo iz G tako, da v zamenjamo s k novimi vozlišči $v_1, \ldots, v_k$ in za vsak i, $1 \leq i \leq k$, dodamo povezavo med v_i in vozlišči v N_i. Če v G' obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta njegovega ko-drevesa $G' - E(T')$ soda ali vsebuje vozlišče iz V_T ali vsebuje eno izmed vozlišč $v_1, \ldots, v_k$, potem v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta v njegovem ko-drevesu $G - E(T)$ soda ali vsebuje vozlišče iz V_T ali pa vsebuje vozlišče v.*

Dokaz. Naj bo G' povezan graf in G graf, ki ga dobimo iz G' tako, da v njem identificiramo (zamenjamo) $k \geq 2$ vozlišč $v_1, \ldots, v_k$, ki imajo disjunktne okolice (G in G' se tako ujemata s tistima iz leme 4.2). Predpostavimo, da v G' obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ soda ali vsebuje vozlišče iz $V_T \cap (V(G) \setminus \{v\})$ ali pa vsebuje $v_1, \ldots, v_k$.

Dokazujemo z indukcijo na k in za začetek predpostavimo, da je $k = 2$. Z v_1 in v_2 označimo vozlišči, ki imata disjunktni okolici $N(v_1)$ in $N(v_2)$ in ju je potrebno identificirati v v, da iz grafa G' spet dobimo graf G. Uporabimo T', da dobimo podgraf T'' v G po naslednjem postopku. Naj bo $e' = xy$ poljubna povezava v T'. Če $x, y \notin \{v_1, v_2\}$, vstavimo e' v T''. Za $x = v_1$ namesto povezave e' v T'' vstavimo povezavo vy. Analogno zamenjamo povezavo e', kadar je $x = v_2$ z vy, kadar je $y = v_1$ z xv in kadar je $y = v_2$ z xv (za povezave, ki se pojavijo v T'). Ker je T' vpeto drevo grafa G', v njem obstaja natanko ena pot med vozliščema v_1 in v_2, označimo jo s P. Naj bo u vozlišče, ki je v P sosednje z v_1 in $e = uv_1$. Opisano je prikazano na sliki 4.1.

Trdimo, da je T, ki ga dobimo tako, da iz T'' odstranimo povezavo e, vpeto drevo grafa G z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali vsebuje vozlišče iz V_T ali pa vsebuje v. Če T ni vpet podgraf grafa G, mora obstajati vozlišče $x \in G \setminus T$. Vozlišče v je po konstrukciji sosednje vsaj z eno povezavo iz T, od koder sledi, da je $x \neq v$. Nadalje, če $x \in V(G) \setminus \{v\}$ ni sosednje z nobeno povezavo iz T, sledi, da x ni sosednje z nobeno povezavo iz T' v G' (saj se vsa vozlišča v $V(G)$ razen v pojavijo tudi v $V(G')$), kar pa je protislovje, saj je T vpeto drevo. Od tod sledi, da je T vpeti podgraf grafa G. Naj bosta sedaj $x, y \neq v$ dve poljubni vozlišči grafa G. Med njima v T' obstaja natanko ena pot Q'. Če Q' ne vsebuje povezave e, potem pot Q'



(a) T' pri v_1 in v_2 v G' (b) T pri v v G

Slika 4.1: Konstrukcija vpetega drevesa T v G iz T' v G' z združitvijo vozlišč v_1 in v_2 v v. Povezave, vsebovane v drevesih T' in T, so odebeljene.

povezuje x in y tudi v T. V nasprotnem primeru, ko e leži na Q', lahko le-to zapišemo kot $Q' = x - Q'_1 - v_1 - e - u - Q'_2 - y$. S P' označimo del poti P med v_2 in u. Potem v T med x in y obstaja pot $x - Q'_1 - v - P' - u - Q'_2 - y$ (pri tem lahko odseke, ki so paroma skupni P', Q'_1 in Q_2 izpustimo). Podobno lahko pristopamo tudi, kadar je $x = v$ ali $y = v$. Od tod sledi, da je T povezan. Kar nam preostane, je, da dokažemo še, da je T drevo. Zato predpostavimo nasprotno in s C označimo poljuben cikel v T. Če C ne vsebuje vozlišča v iz konstrukcije T, sledi, da je cikel C vsebovan tudi v T', protislovje. Torej mora C vsebovati vozlišče v. Naj bo x poljubno vozlišče v C, ki je različno od v. Brez škode za splošnost lahko zapišemo $C = v - C_1 - x - C_2 - v$, kjer sta C_1 in C_2 dve disjunktni poti med x in v (sicer bi za C vzeli krajši cikel, ki vsebuje v). Če sta C_1 in C_2 obe disjunktni poti med x in v_1 v T' ali obe disjunktni poti med x in v_2 v T', bi to spet privedlo do protislovja z dejstvom, da je T' vpeto drevo. Zato lahko (brez škode za splošnost) sklepamo, da je C_1 pot med x in v_1 v T', C_2 pa pot med x in v_2 v T'. Ker pa v T' med poljubnima vozliščema obstaja samo ena pot, sledi, da je $P = v_1 - C_1 - x - C_2 - v_2$ in je e prva povezava na C_1. Ker je $T = T'' - e$, C_1 ne more biti vsebovana v T, kar pomeni, da je T res vpeto drevo grafa G.

Dokazati želimo še, da vsaka liha komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ vsebuje vozlišče iz V_T ali vozlišče v. Predpostavimo torej nasprotno in z O označimo liho komponento ko-drevesa $G - E(T)$, ki ne vsebuje nobenega vozlišča iz V_T niti vozlišča v. Iz konstrukcije drevesa T sledi, da je O liha komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$, ki ne vsebuje vozlišča iz $V_T \cap (V(G) \setminus \{v\})$ niti vozlišč v_1 in v_2, kar pa je protislovno z definicijo drevesa T'. Dokazali smo, da če G dobimo iz G' tako, da identificiramo natanko dve vozlišči v novo vozlišče v, v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta soda ali vsebuje vozlišče iz V_T ali pa vsebuje v.

Naj bo sedaj $k > 2$ in naj indukcijska predpostavka velja za vsak $l < k$. Z $v_1, \ldots, v_k$

v G' označimo vozlišča z disjunktnimi okolicami $N(v_1), \ldots, N(v_k)$, ki jih moramo identificirati v v, da dobimo graf G. Iz G' najprej konstruiramo graf G'' tako, da vozlišča $v_1, \ldots, v_{k-1}$ zamenjamo z novim vozliščem v''. Po indukciji ima G'' vpeto drevo T'', za katerega je vsaka povezana komponenta ko-devesa $G - E(T'')$ soda ali vsebuje vozlišče iz $V_T \cap (V(G''))$ ali pa vsebuje v''. Če v naslednjem koraku združimo še vozlišči v_k in v'' v v iz G'', dobimo graf G. Ta pa nadalje po indukciji vsebuje vpeto drevo T z želenimi lastnostmi. $\square$

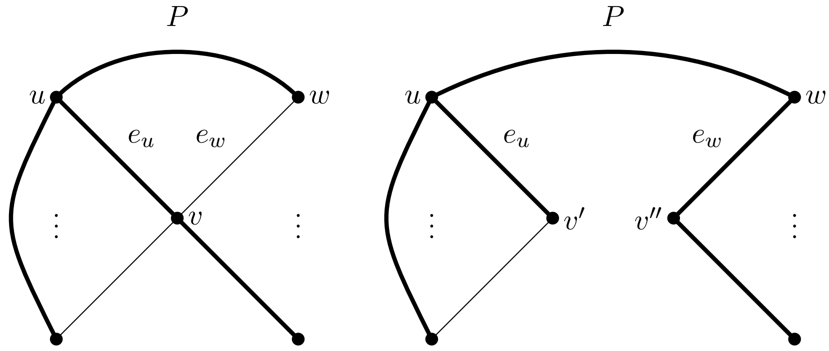
Množica V_T v lemi 4.2 je lahko tudi prazna.

Lema 4.3 *Naj bo G povezan graf, T vpeto drevo v njem in v poljubno vozlišče v G, ki je vsebovano v lihi komponenti ko-drevesa $G - E(T)$. Z $\mathcal{G}$ označimo družino grafov, ki jih lahko dobimo na naslednji način. Vozlišče v zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v'', potem pa sosede v iz G razdelimo tako, da jih je $\left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$ povezanih z v', preostali pa so povezani z v''. V $\mathcal{G}$ obstaja graf G' z vpetim drevesom T', za katerega velja $\xi(G', T') < \xi(G, T)$.*

Dokaz. Naj bo G povezan graf, T vpeto drevo v G in v poljubno vozlišče v G, ki je vsebovano v lihi komponenti ko-drevesa $G - E(T)$. Ker je v v lihi komponenti ko-drevesa, v $E(v)$ obstajata vsaj dve povezavi, $e_y = vy \in E(v) \cap E(T)$ in $e_w = vw \in E(v)$, kjer $e_w \notin E(T)$. Hkrati pa v T obstaja natanko ena pot med vozliščema v in w. Označimo vozlišče, ki je na tej poti sosednje z v, z u, del poti med u in w pa s P (pri tem je u lahko enak y). Naj bo $N \subseteq N(v)$, ki vsebuje $\left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$ vozlišč, med katerimi je u, ne pa tudi w. Konstruirajmo graf G' iz G tako, da v zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v'' ter vozlišča iz N v njem povežemo z v', preostanek vozlišč iz $N(v)$ pa povežemo z v''. S pomočjo T v naslednjem koraku v G' konstruiramo še podgraf T'. Naj bo $e = xy$ poljubna povezava iz T. Če $x, y \neq v$, dodamo e v T'. Če je $x = v$ in $y \in N$, namesto e v T' dodamo $v'y$. Analogno nadomestimo e z $v''y$, kadar je $x = v$ in $y \in N(v) \setminus N$, z xv', kadar je $y = v$ in $x \in N$, ter z xv'', kadar je $y = v$ in $x \in N(v) \setminus N$. Ob koncu v T' dodamo še povezavo e_w. Opisana konstrukcija je prikazana na sliki 4.2. Na enak način kot v dokazu leme 4.2 lahko pokažemo, da je T' vpeto drevo grafa G'.

Ker sta u in w poljubni takšni sosednji vozlišči v v G, da je $uv \in E(T)$ in $wv \in E(v) \setminus E(T)$, vsak graf, ki ga dobimo iz G tako, da vozlišče v zamenjamo z dvema novima, med kateri potem enako kot zgoraj porazdelimo sosede vozlišča v (pri tem u in w ne povežemo z istim novim vozliščem), vsebuje vpeto drevo T' (dobljeno iz T z dodajanjem povezave wv) in je zato povezan. Trdimo, da za vsaj enega izmed teh grafov G' velja $\xi(G', T') < \xi(G, T)$.

S C označimo liho komponento ko-drevesa $G - E(T)$, v kateri leži v. Hitro opazimo, da je v edino vozlišče, v katerem se graf G razlikuje od grafov, dobljenih po zgoraj opisanem postopku. Od tod sledi, da je vsaka druga povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ tudi povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$. Nadalje opazimo, da bodo povezane komponente ko-drevesa $G' - E(T')$, ki bodo nadomestile C, nastale iz



(a) T pri v v G (b) T' pri v' in v'' v G'

Slika 4.2: Konstrukcija vpetega drevesa T' v G' iz T v G z zamenjavo vozlišča v z dvema vozliščema v' in v''. Povezave, vsebovane v drevesih T in T', so odebeljene.

komponent, vsebovanih v $\mathcal{E}(v,T)$ in $\mathcal{O}(v,T)$ tako, da bomo iz njih odstranili natanko eno z v sosednjo povezavo. Ob tem je iz definicije 4.1 jasno, da vsaka komponenta iz $O \in \mathcal{O}(v,T)$ in $E \in \mathcal{E}(v,T)$ ostane povezana tudi, če iz nje odstranimo povezavo, ki je sosednja vozlišču v v C, in da imata lahko ob tem tako O kot E več kot eno z v sosednjo povezavo.

Obravnavamo dva različna primera:

Primer 1: $|\mathcal{O}(v,T)| \leq \left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$.

Naj bosta $e = vw \in O_w$ za nek $O_w \in \mathcal{O}(v,T)$ in $f = vu \in T$ dve z v sosednji povezavi v G. Uporabimo e kot e_w, w kot w in u kot u v na začetku dokaza opisani konstrukciji grafa G' in njegovega vpetega drevesa T'. Ker je $|\mathcal{O}(v,T)| \leq \left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$, lahko pri tem sosede vozlišča v v novem grafu razdelimo tako, da v'' povežemo z w in za vsako komponento $O \in \mathcal{O}(v,T)$, različno od O_W, z enim vozliščem iz $O \cap N(v)$. Ko v T' dodamo e_w, liha komponenta O_w postane soda. V $\mathcal{O}(v,T)$ tako ostane sodo število (lahko tudi nobena) lihih komponent (O_w ni več), ki so v ko-drevesu $G' - E(T')$ vse sosednje z v''—torej še vedno pripadajo isti povezani komponenti, ki pa je sedaj posledično soda. Medtem vse komponente iz $\mathcal{E}(v,T)$ ostanejo nespremenjene (torej sode). Od tod sledi $\xi(G',T') < \xi(G,T)$.

Primer 2: $|\mathcal{O}(v,T)| > \left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil \geq 1$.

Ker je $|\mathcal{O}(v,T)|$ liho in ker v T obstaja povezava, sosednja z v, sledi, da je $d(v) \geq 4$. S $f = uv$ bomo označili (neko) povezavo, sosednjo v v T. Najprej predstavimo, kako konstruiramo G' iz G in vpeto drevo T' iz T, za katerega ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ sodo število povezav, v primeru, ko je zadoščeno vsaj enemu izmed naslednjih pogojev:

(i) v $\mathcal{O}(v,T)$ obstaja liha komponenta O_1, ki ima dve z v sosednji povezavi,

(ii) $d(v) \neq 0 \pmod 4$,

(iii) vpeto drevo T in v imata več kot eno sosednjo povezavo,

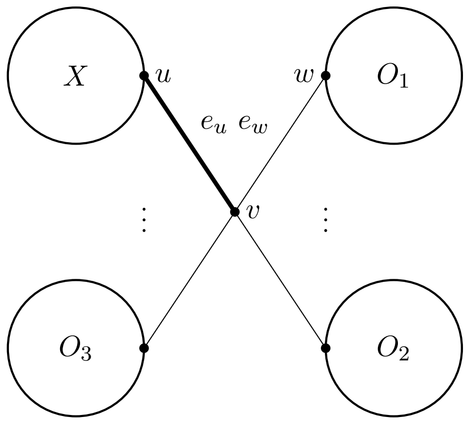
(iv) $|\mathcal{E}(v,T)| > 0$.

V točki (i) označimo dve izmed takšnih povezav iz O_1 z $e_1 = vw_1$ in $e_2 = vw_2$. Ker je $|\mathcal{O}(v,T)| > 1$, obstaja vsaj še eno vozlišče w_3, tako da je $e_3 = vw_3 \in O_2 \in \mathcal{O}(v,T)$, pri čemer $O_1 \neq O_2$ (v resnici zaradi lihosti $\mathcal{O}(v,T)$ obstajata vsaj še dve takšni vozlišči). Uporabimo e_3 kot e_w, w_3 kot w in u kot u v konstrukciji grafa G', opisani na začetku dokaza. Ker je $\left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil, \left\lfloor \frac{d(v)}{2} \right\rfloor \geq 2$, lahko v' hkrati povežemo z u in w_1 ter v'' z w_3 in w_2. Ko e_3 dodamo v T', liha komponenta O_2 postane soda. Ker pa je w_1 povezan z v' in w_2 z v'', sta ob tem v' in v'' še vedno vsebovana v isti komponenti ko-drevesa $G' - E(T')$. V $\mathcal{O}(v,T)$ imamo sedaj sodo število lihih komponent, od koder sledi, da je T' vpeto drevo grafa G', za katerega velja $\xi(G',T') < \xi(G,T)$.

Za točke (ii) - (iv) si s pomočjo parnosti stopnje vozlišča v, $d(v)$ v primeru (ii), dodatne vozlišču v sosednje povezave v T v primeru (iii) ali povezave sosednje v v $\mathcal{E}(v,T)$ v primeru (iv), zagotovimo, da je vozlišče v'' povezano z lihim številom komponent iz $\mathcal{O}(v,T)$, vozlišče v' pa z u ter ostalimi lihimi komponentami iz $\mathcal{O}(v,T)$ (sodim številom le-teh). Opozorimo, da imajo lahko komponente iz $\mathcal{O}(v,T)$ in $\mathcal{E}(v,T)$ več kot eno sosednjo povezavo z v. Zato je lahko neka komponenta iz $\mathcal{O}(v,T)$ ali $\mathcal{E}(v,T)$ hkrati povezana tudi z v' in v'' v G'. Ob tem opozorimo še, da za opisano particijo $N(v)$ dovolimo tudi, da je $d(v') = \left\lfloor \frac{d(v)}{2} \right\rfloor$ in $d(v'') = \left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$ (obratno kot zgoraj). Naj bo O ena izmed lihih komponent iz $\mathcal{O}(v,T)$, ki smo jih povezali z v'', in $e = vw$ povezava v njej. Uporabimo povezavo e kot e_w, w kot w in u kot u v konstrukciji, opisani na začetku dokaza. Komponenta O tako postane soda povezava in tako v' kot v'' bosta v $G' - E(T')$ povezana s sodim številom komponent iz $\mathcal{O}(v,T)$. Zato je $\xi(G',T') < \xi(G,T)$.

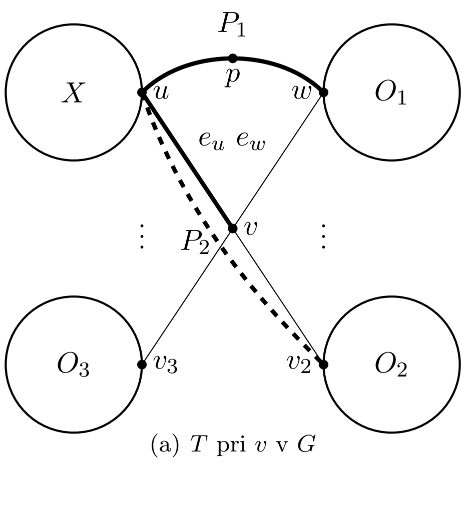
Naj odslej velja, da ni izpolnjen nobeden izmed posebnih pogojev (i) - (iv). Potem med drugim velja, da je $|\mathcal{O}(v,T)| = d_G(v) - 1$ (edina preostala povezava iz $E(v)$ pa je v T) in lahko brez škode za splošnost privzamemo, da je struktura G v okolici v prikazana na sliki 4.3. Pri tem so O_1, O_2 in O_3 (povezave, ki povezujejo posamezno komponento z v, pripadajo tej komponenti) lihe komponente iz $\mathcal{O}(v,T)$. Seveda je tašnih komponent lahko več kot 3. Opozorimo tudi, da je lahko X, ki vsebuje vozlišče u, soda (po možnosti prazna) komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ ali pa s C disjunktna liha komponenta ko-drevesa $G - E(T)$.

Tudi tukaj moramo obravnavati dva podprimera. V prvem podprimeru predpostavimo, da sta v $\mathcal{O}(v,T)$ takšni dve lihi komponenti O_1 in O_2, da med njima in vozliščem u v T obstajata dve disjunktni poti P_1 in P_2. Povežimo komponento O_1 z v'' v vozlišču w in O_2 z v'' v vozlišču v_2 v grafu G'. Tretjo komponento iz $\mathcal{O}(v,T)$, ki jo v G' povežemo z v', označimo z O_3 in vozlišče v O_3, ki je sosednje v, z v_3. S p označimo vozlišče, ki je



Slika 4.3: Graf G in vpeto drevo T v vozlišču v, kadar ni zadoščeno nobenemu izmed posebnih pogojev v primeru 2 dokaza leme 4.3. Opozorimo, da v vpetem drevesu T obstaja pot med vozliščema u in w, ki na sliki ni prikazana, ne obstaja pa nobena pot med različnimi lihimi komponentami, ki bi bila povsem vsebovana v $G - E(T)$. Povezave, vsebovane v vpetem drevesu T, so odebeljene.

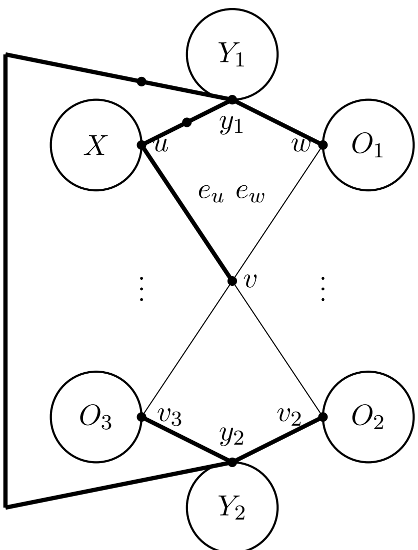
v P_1 sosednje z u (pri tem p in w nista nujno različna). Vpeto drevo T' iz T sestavimo kot v prejšnjih podprimerih, potem pa mu dodamo še povezavi $v''v_2$ in $v'v_3$ ter iz njega odstranimo povezavi $v'u$ in up. Postopek je prikazan na sliki 4.4.



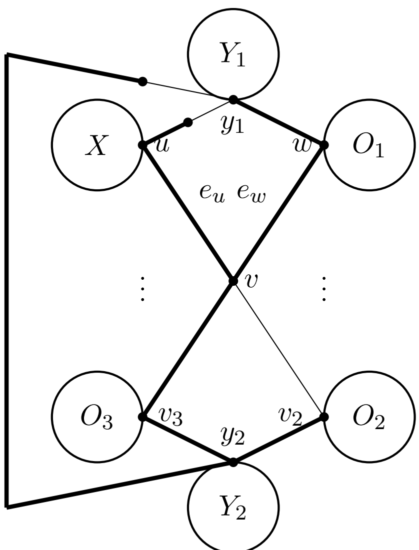
Slika 4.4: Prvi podprimer iz dokaza leme 4.3. V vpetem drevesu T obstaja tudi pot, ki vsebuje v_3, in natanko eno izmed vozlišč u, w ali v_2, ki na sliki ni prikazana. Povezave, vsebovane v vpetem drevesu T, so odebeljene.

Ni težko dokazati, da je T' vpeto drevo grafa G'. Komponenti O_2 in O_3 sta sedaj sodi in disjunktni z ostalimi lihimi komponentami v ko-drevesu $G' - E(T')$. Vozlišče v'' je povezano s sodo lihimi komponentami iz $\mathcal{O}(v,T)$, vozlišče v' pa s sodo od O_3 različnimi lihimi komponentami iz $\mathcal{O}(v,T)$. O_1 je po novem soda komponenta ali pa je v ko-drevesu $G' - E(T')$ povezana z X. Prav tako ima z X skupno vozlišče u tudi preostanek lihe komponente C. Če je bila X neka od C različna liha komponenta v $G - E(T)$, smo sedaj C povezali z neko drugo liho komponento iz $G - E(T)$, od koder sledi, da je, ne glede na parnost X, $\xi(G',T') < \xi(G,T)$. Tako smo uspeli povezati dve lihi komponenti v eno liho kompnento ali pa uspeli povezati eno sodo in eno liho komponento v eno sodo komponento (parnost gledamo potem, ko odstranimo povezave iz T').

V drugem podprimeru v $\mathcal{O}(v,T)$ ne obstaja par lihih komponent, ki bi bil v T z disjunktnimi potmi povezan z u. Brez škode za splošnost lahko predpostavimo, da je struktura T prikazana na sliki 4.5 (a). Nadalje opazimo, da vpeto drevo T_2, katerega struktura je prikazana na sliki 4.5 (b) in hkrati s T vedno obstaja v G, izpolnjuje pogoj (iii) in zato velja $\xi(G,T_2) \leq \xi(G,T)$. Analogno tudi v primeru, ko je $y_1 = y_2$ ali $y_1 = w$ (in $Y_1 = Y_2$ ali $Y_1 = O_1$).



(a) T pri v v G



(b) T_2 pri v v G

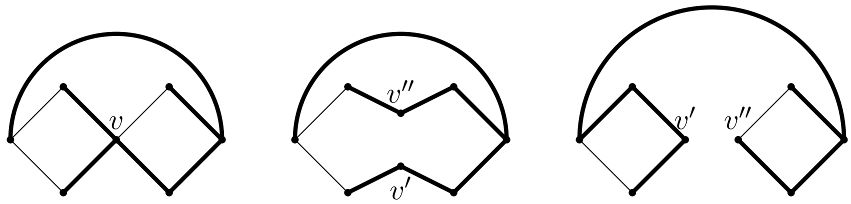
Slika 4.5: Drugi podprimer iz dokaza leme 4.3. Povezave, vsebovane v drevesih T in T_2, so odebeljene.

Tako smo uspeli konstruirati graf G', v katerem obstaja vpeto drevo T', za katerega je $\xi(G',T') < \xi(G,T)$. □

Ker je vozlišče v v lemi 4.3 poljubno in ker se med konstrukcijo, opisano v dokazu leme 4.3, graf G razen v vozlišču v in njegovi okolici $N(v)$, ni spremenil, naslednja lema sledi ob predpostavki, da je vozlišče v stopnje $\geq d$:

Lema 4.4 *Naj bo G povezan graf, T vpeto drevo v G z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje najmanj d in v poljubno vozlišče stopnje najmanj d, ki je vsebovano v lihi komponenti ko-drevesa $G-E(T)$. Z $\mathcal{G}$ označimo družino grafov, ki jih lahko dobimo na naslednji način. Vozlišče v zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v'', potem pa sosede v iz G razdelimo tako, da jih je $\left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$ povezanih z v', preostali pa so povezani z v''. V $\mathcal{G}$ obstaja povezan graf G' z vpetim drevesom T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G-E(T')$ soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje najmanj d, in za katerega velja $\xi_d(G', T') < \xi_d(G, T)$.*

Opozorimo, da ni nujno, da ima vsak graf $G' \in \mathcal{G}$ iz leme 4.4 vpeto drevo T', za katerega je $\xi_d(G', T') < \xi_d(G, T)$. Protiprimer je prikazan na sliki 4.6, kjer uporabimo konstrukcijo iz leme 4.4, da iz grafa G dobimo G' in G'', iz vpetega drevesa T v G pa vpeti drevesi T' v G' in T'' v G''. Pri tem je $\xi_2(G, T) = 1$, $\xi_2(G', T') = 0$ in $\xi_2(G'', T'') = 2$.



(a) G in T (b) G' in T' (c) G'' in T''

Slika 4.6: G', G'' ter T', T'' so dobljeni iz grafa G in njegovega vpetega drevesa T s pomočjo konstrukcije iz leme 4.4. Vrednosti 2-pomanjkljivostnega števila so: $\xi_2(G, T) = 1$, $\xi_2(G', T') = 0$ in $\xi_2(G'', T'') = 2$. Povezave, vsebovane v drevesih, so odebeljene.

V naslednjih lemah namesto določene stopnje vozlišč v lihih komponentah zahtevamo, da le-te vsebujejo vozlišča, ki pripadajo neki vnaprej določeni podmnožici $V \subseteq V(G)$.

Lema 4.5 *Naj bo G graf, $V \subseteq V(G)$ in T vpeto drevo v G z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče iz V. Označimo k poljubnih vozlišč z disjunktnimi okolicami v G z $v_1, \ldots, v_k$. Konstruirajmo graf G' iz G tako, da vozlišča $v_1, \ldots, v_k$ zamenjamo z novim vozliščem v in z njim povežemo tudi vse njihove sosede. Potem v G' obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ soda ali vsebuje vozlišče iz V ali pa vsebuje v.*

Dokaz. Konstruirajmo T' s pomočjo vpetega drevesa T. Naj bo $e = xy$ povezava v T. Če $x, y \notin \{v_1, \ldots, v_k\}$, dodamo e v T'. V primerih, ko je $x \in \{v_1, \ldots, v_k\}$ ali $y \in \{v_1, \ldots, v_k\}$, v T' namesto povezave e dodamo vy ali xv. Jasno je, da T' vsebuje vsako vozlišče grafa G' in da vsak morebitni cikel v T' vsebuje povezavo iz $E(v)$. Postopoma odstranjujemo povezave v $E(v) \cap T'$ iz T', dokler ne dobimo vpetega drevesa v G'. Vsaka liha povezana komponenta v ko-drevesu $G' - E(T')$, ki ne vsebuje v, še vedno vsebuje vsaj eno vozlišče iz V. Edina preostala (morebitna) liha komponenta pa vsebuje vozlišče v. □

Če postopek, opisan v dokazu leme 4.5, ponovimo največ k-krat, lahko enostavno dokažemo tudi naslednjo lemo.

Lema 4.6 *Naj bo G graf, $V \subseteq V(G)$ in T vpeto drevo v G z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče iz V. Označimo l poljubnih vozlišč z disjunktnimi okolicami v $v_{1,1}, \ldots, v_{1,l_1}, \ldots, v_{k,1}, \ldots, v_{k,l_k}$. Seveda velja $\sum_{i=1}^{k} l_i = l$. Konstruirajmo graf G' iz G tako, da za vsak i, $1 \leq i \leq k$, vozlišča $v_{i,1}, \ldots, v_{i,l_i}$ zamenjamo z novim vozliščem v_i in z njim povežemo tudi vse njihove sosede. Potem v G' obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ soda ali vsebuje vozlišče iz V ali pa vsebuje enega izmed novih vozlišč $v_1, \ldots, v_k$.*

Ker zanka nikoli ni del vpetega drevesa multigrafa in ker v njem nastopi največ ena izmed paralelnih povezav, je resnična tudi naslednja lema.

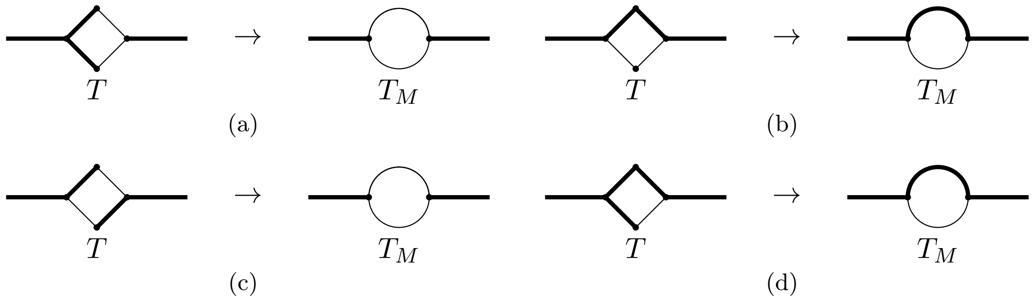
Lema 4.7 *Naj bo G_M multigraf, $V \subseteq V(G_M)$ in G enostaven graf, ki ga dobimo iz G_M tako, da zamenjamo zanke z disjunktnimi potmi dolžine 3 in paralelne povezave z disjunktnimi potmi dolžine 2. Predpostavimo tudi, da je za vsako zanko in paralelno povezavo vsaj eno od njenih krajišč vsebovano v V. Če v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali vsebuje vozlišče iz V, sledi, da ima takšno vpeto drevo tudi G_M.*

Dokaz. Želeno vpeto drevo T_M v G_M iz T sestavimo tako, da vanj dodamo vse povezave iz T. Pri tem izpustimo vse povezave na poteh dolžine 3, ki so pri konstrukciji grafa G iz G_M nadomestile zanke. Morebitne nastope povezav na poteh dolžine 2, ki so nadomestile paralelne povezave, v T, v T_M dodamo glede na enega izmed štirih načinov predstavljenih na sliki 4.7.

□

Opozorimo, da v ko-drevesu vpetega drevesa multigarafa povezave, sosednje z enim ali drugim krajiščem paralelne povezave, nastopijo v isti povezani komponenti.

Naslednja lema povzame povezavo med tukaj definiranimi približki Xuongovih dreves in antiparalelnimi dvojnimi obhodi (ki jih bomo formalno definirali v naslednjem poglavju, zaenkrat pa omenimo le, da vsako povezavo grafa prečkajo po enkrat v vsaki smeri).



Slika 4.7: Štiri možnosti strukture vpetih dreves T in T_M, v okolici paralelnih povezav in poti, ki so jih zamenjale. Povezave, vsebovane v drevesih, so odebeljene.

Lema 4.8 *Naj bo G povezan graf in $V \subseteq V(G)$. G vsebuje antiparalelni dvojni obhod, v katerem se netrivialne ponovitve pojavijo le v vozliščih v V natanko tedaj, ko v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče iz V.*

Dokaz. Najprej opazimo, da v obeh primerih vozlišče iz V ne more biti prerezno vozlišče. Naj bo v poljubno vozlišče iz V. V prvem primeru, ko ima dvojni obhod W v v netrivialno ponovitev, ni težko najti cikla, na katerem leži v. Dobimo ga s pomočjo poti, ki mora obstajati med vozlišči v različnih netrivialnih ponovitvah dvojnega obhoda W. V drugem primeru, ko je vozlišče v sosednje neki lihi povezani komponenti ko-drevesa $G - E(T)$, pa lahko v ta namen uporabimo povezavo $e = uv$ iz lihe komponente, ki vsebuje v, ter potjo, ki mora v vpetem drevesu T povezovati u in v.

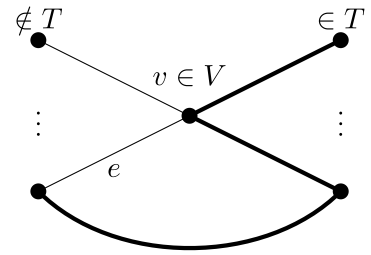
Naj bo W antiparalelni dvojni obhod grafa G, ki ima netrivialne ponovitve le v vozliščih iz $V \subseteq V(G)$. Z r označimo število vozlišč v V. Če je $r = 0$, izrek 5.10 (ki ga nekoliko kasneje dokažemo brez uporabe leme 4.8) zagotavlja, da v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ vsebuje sodo povezav.

Zato naj bo $r \geq 1$ in v eno izmed vozlišč, kjer ima W netrivialno ponovitev. Če k predstavlja število netrivialnih ponovitev dvojnega obhoda W v k, te netrivialne ponovitve označimo z $N_1, \ldots, N_k$. Konstruirajmo graf G_1 iz G tako, da zamenjamo vozlišče v s k novimi vozlišči $v_1, \ldots, v_k$, potem pa za $1 \leq i \leq k$ novo vozlišče v_i povežemo z vozlišči v N_i. Ostali del grafa G pustimo nedotaknjen. Podobno sestavimo tudi antiparalelni dvojni obhod W_1 v G_1, tako da začnemo v poljubnem vozlišču $V(G) \cap V(G_1)$ in sledimo W. Za povezavo $e = xy$ na W, ki jo prečkamo, dodamo e v W_1, kadar $x, y \neq v$. Pri tem pazimo, da ne spreminjamo vrstnega reda povezav in njihove usmeritve. Povezave, kjer je $x = v$ in $y \in N_i$ ali $x \in N_i$ in $y = v$, zamenjamo z $v_i y$ ali $x v_i$, za $1 \leq i \leq k$. Očitno se je število vozlišč z netrivialnimi ponovitvami v W_1 v primerjavi z vozlišči z netrivialnimi ponovitvami v W zmanjšalo za 1, saj so vsa nova vozlišča $v_1, \ldots, v_k$ brez netrivialnih ponovitev, ostali del W_1 pa je enak W. Če enak postopek ponovimo na vseh vozliščih, v katerih ima W netrivialno ponovitev, dobimo graf G_r, ki vsebuje antiparalelni strogi obhod in ima posledično, po izreku 5.10, vpeto drevo T_r, za katerega ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G_r - E(T_r)$ sodo število povezav. Po lemi 4.6 nadalje sledi, da v grafu G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta kodrevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče iz V.

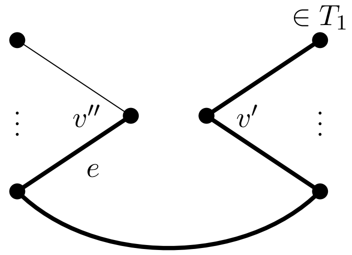
Za dokaz preostale implikacije leme 4.8 naj bo G povezan graf, $V \subseteq V(G)$ in T vpeto drevo v G z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče iz V. S $\xi(T)$ označimo število lihih komponent v ko-drevesu $G - E(T)$ in predpostavimo, da je T med vsemi vpetimi drevesi grafa G, za katere vsaka liha komponenta ko-drevesa vsebuje vozlišče iz V, tisto, za katerega je $\xi(T)$ minimalen. Če je $\xi = \xi(T) = 0$, izrek 5.10 zagotavlja, da G vsebuje antiparalelni strogi obhod.

Zato naj bo $\xi = \xi(T) \geq 1$ in $v \in V$ eno izmed vozlišč, vsebovanih v eni izmed lihih komponent ko-drevesa $G - E(T)$. Ker je v vsebovano v lihi komponenti ko-drevesa $G - E(T)$, obstaja particija $E(v)$ na dve neprazni podmnožici: množico E_T, ki vsebuje tiste z v sosednje povezave, ki so v T, in množico E_C, ki vsebuje vse ostale povezave iz $E(v)$ (torej tiste, ki so vsebovane v omenjeni lihi komponenti). Ker je T vpeto drevo, v njem obstaja enolična pot med katerimkoli krajiščem poljubne povezave iz E_T in katerimkoli krajiščem povezave iz E_C. Konstruirajmo nov graf G_1 iz G tako, da vozlišče v zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v''. Ob tem v povezavah iz E_T krajišče v nadomestimo z v', v povezah iz E_C pa v nadomestimo z v''. G_1 je zaradi prej omenjene poti med poljubnimi krajišči povezav iz E_T in E_C povezan graf. Ker je bilo vozlišče v vsebovano v lihi komponenti C ko-drevesa $G - E(T)$, obstaja povezava $e \in E_C$, za katero je število povezav v komponenti, ki jo v C dobimo, če v v C ločimo tako, da je na eni strani e, na drugi pa vse ostale povezave iz E_C, liho (pri tem lahko še vedno dobimo celoten C, lahko pa tudi samo povezavo e). Z drugimi besedami, množica $\mathcal{O}(v, T)$ ni prazna in z e označimo eno izmed z v sosednjih povezav, ki leži v eni izmed lihih komponent, ki je v njej. Podgraf T_1, ki ga dobimo v G_1 tako, da T dodamo še povezavo e, je očitno vpeto drevo grafa G_1, za katerega velja, da je v njem število lihih komponent v ko-drevesu $G_1 - E(T_1)$ strogo manjše kot ξ. Konstrukcija T_1 je prikazana na sliki 4.8.

Če enak postopek ponovimo na vseh vozliščih iz V v vseh lihih komponetah ko-drevesa $G - E(T)$, dobimo graf G_ξ, v katerem obstaja vpeto drevo T_ξ z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G_\xi - E(T_\xi)$ sodo število povezav. Po izreku 5.10 G_ξ vsebuje antiparalelni strogi obhod W_ξ. Naj bo $e = xy$ poljubna povezava v G_ξ, $x \notin V(G)$ in $v \in V$ vozlišče, ki je med konstrukcijo G_ξ (ali že katerega od prejšnjih G_i) nadomestilo v. Z zamenjavo e z vy v W_ξ in zaporedoma tudi ostalih povezav sosednjih s krajiščem, ki ni v $V(G)$, lahko konstruiramo antiparalelni dvojni obhod v G, v katerem se netrivialne ponovitve pojavijo samo v vozliščih iz V. □



(a) G



(b) G_1

Slika 4.8: Konstrukcija vpetega drevesa T_1 v G_1 iz T v G. Povezave, vsebovane v vpetih drevesih, so odebeljene.

Poglavje 5

(Anti)paralelne povezave v dvojnih obhodih

Dvojni obhod v grafu G vsako povezavo $e = uv$ prečka natanko dvakrat. Če je povezava e prečkana dvakrat v isto smer (obakrat od u proti v ali obratno), pravimo, da je e *paralelna povezava*. V nasprotnem je *antiparalelna povezava*. Nadalje je dvojni obhod grafa *paralelni dvojni obhod*, če je vsaka povezava v njem paralelna, in *antiparalelni dvojni obhod*, če je vsaka povezava v njem antiparalelna. Analogno definiramo tudi (anti)paralelne stroge in d-stabilne obhode. V tem poglavju predstavimo karakterizacijo grafov, ki vsebujejo paralelne in antiparalelne dvojne, stroge ter d-stabilne obhode.

5.1 Paralelni dvojni obhodi

Kljub temu da v naravi nastopajo tako peptidi, ki tvorijo antiparalelne dimere, kot tisti, ki tvorijo paralelne dimere, so že Gradišar in sod. v [46] izpostavili, da je bilo karakteriziranih izdatno več slednjih. Zato se najprej posvetimo paralelnim dvojnim obhodom. Poliedri, katerih grafi vsebujejo paralelne stroge obhode, imajo največ možnosti, da bodo z novo strategijo sestavljeni v laboratorijih.

Trditev 5.1 *Graf G vsebuje paralelni dvojni obhod natanko tedaj, ko je G Eulerjev graf.*

Dokaz. Predpostavimo najprej, da G vsebuje paralelni dvojni obhod W. Ker je W dvojni obhod grafa G, sledi, da se morata za vsako vozlišče v grafa G števili vstopov W v v in izstopov W iz v ujemati. To skupaj s paralelnostjo W pomeni, da je stopnja vsakega vozlišča v grafa G soda.

Za dokaz preostale implikacije uporabimo poljuben Eulerjev obhod v grafu G, ki ga prečkamo dvakrat zapored v isti smeri in tako dobimo paralelni dvojni obhod. □

Iz dejstva, da v paralelnem obhodu ne more nastopiti 1-ponovitev (ker le-ta zahteva antiparalelno povezavo), sledi tudi:

Trditev 5.2 *Graf G vsebuje paralelni 1-stabilni obhod natanko tedaj, ko je G Eulerjev graf.*

5.1.1 Paralelni strogi obhodi

Sedaj lahko karakteriziramo grafe, ki vsebujejo paralelne stroge obhode, ki so, kot smo omenili že prej, pomebni za konstrukcijo nanostruktur v laboratorijih.

Izrek 5.3 *Graf G vsebuje paralelni strogi obhod natanko tedaj, ko je G Eulerjev graf.*

Dokaz. Če G ni Eulerjev graf, potem ne vsebuje paralelnega dvojnega obhoda. V njem namreč obstaja vozlišče v, ki je lihe stopnje (sicer bi bil G Eulerjev graf). Število, kolikokrat bi katerikoli paralelni dvojni obhod W vstopil v v, je po eni strani liho (saj je enako številu izstopov W iz v) in po drugi sodo, saj je vsaka povezava paralelnega dvojnega obhoda za vstop v vozlišče uporabljena dvakrat ali nikoli.

Za dokaz preostale implikacije izreka 5.3 naj bo W paralelni dvojni obhod grafa G (ta po trditvi 5.1 zagotovo obstaja), za katerega je število ciklov v množici vozliščnih slik $\{F_{u,W} \mid u \in V(G)\}$ čim manjše. Če je vsaka vozliščna slika sestavljena iz natanko enega cikla, potem po trditvi 2.3 sledi, da je W paralelni strogi obhod. V nasprotnem v G obstaja vozlišče v, katerega vozliščna slika vsebuje najmanj dva cikla. Uporabimo jo, da konstruiramo paralelni dvojni obhod W', za katerega bo množica vozliščnih slik $\{F_{u,W'} \mid u \in V(G)\}$ vsebovala strogo manj ciklov kot $\{F_{u,W} \mid u \in V(G)\}$.

Označimo s C_1 in C_2 dva izmed ciklov, na katere so razdeljene $E(v)$ v $F_{v,W}$. Naj bo $e_1 = u_1v \in C_1$, ki jo W uporabi v smeri proti v. Nadalje naj bosta $e_2 = vu_2$ in $e_3 = vu_3$ povezavi, ki sledita e_1 v W (pri tem se lahko zgodi, da je e_2 enak e_3). Z $e_4 = u_4v$ in $e_5 = vu_5$ označimo povezavi v C_2, za kateri velja, da je $u_4e_4ve_5u_5$ podzaporedje v W.

Brez škode za splošnost lahko predpostavimo, da je

$$W = \ldots u_1e_1ve_2u_2 \ldots u_1e_1ve_3u_3 \ldots u_4e_4ve_5u_5 \ldots$$

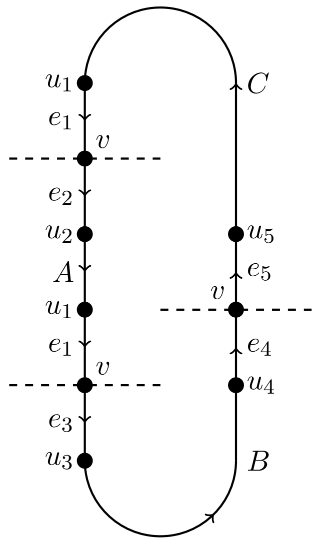
Naj bo

$$W' = \ldots u_1e_1ve_3u_3 \ldots u_4e_4ve_2u_2 \ldots u_1e_1ve_5u_5 \ldots,$$

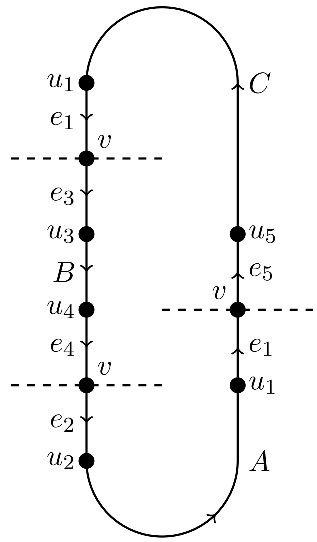
ki ga dobimo tako, da zamenjamo dva odseka, ki se pojavita med tremi ponovitvami v v W. Konstrukcija je prikazana tudi na sliki 5.1.

Ker W' prečka isto množico povezav in v isti smeri kot W, sledi, da je W' paralelni dvojni obhod. Za vozlišče $u \neq v$ je vozliščna slika $F_{u,W'}$ enaka $F_{u,W}$, saj je vsak par povezav e in e' sosednjih u zaporeden v W' natanko tedaj, ko je zaporeden v W'.

Ker W' spremeni samo zaporedne povezave iz C_1 in C_2, mora edini cikel v $F_{v,W'}$, ki ni prisoten že v $F_{v,W}$, vsebovati povezave iz $C_1 \cup C_2$. Ker smo zaporedni povezavi $e_1 - e_2$ in $e_2 - e_4$ zamenjali z $e_2 - e_4$ in $e_1 - e_5$, sta se cikla C_1 in C_2 združila v nov cikel v $F_{v,W'}$, ki vsebuje vse povezave iz $C_1 \cup C_2$. Tako se je število ciklov v vozliščni sliki zmanjšalo za ena, kar zaključuje naš dokaz. □



(a) W



(b) W'

Slika 5.1: Konstrukcija paralelnega strogega obhoda z združevanjem ciklov v vozliščnih slikah

5.1.2 Paralelni d-stabilni obhodi

Iz izreka 5.3 sledi tudi naslednji izrek.

Izrek 5.4 *Graf G vsebuje paralelni d-stabilni obhod natanko tedaj, ko je G Eulerjev graf in je $\delta(G) > d$.*

Dokaz. Ob upoštevanju dejstva, da je v grafu G, z $\delta(G) > d$, vsak strogi obhod tudi d-stabilni obhod, izrek 5.4 hitro sledi iz izreka 5.3. □

V nadaljevanju razdelka dokažemo lemo o paralelnih 2-stabilnih obhodih iz [78] in jo ob koncu razdelka uporabimo, da predstavimo še alternativni dokaz izreka 5.4.

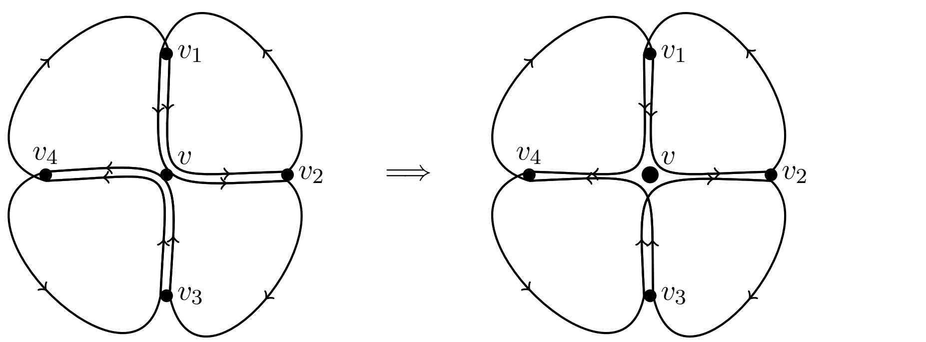
Lema 5.5 *Graf G vsebuje paralelni 2-stabilni obhod natanko tedaj, ko je G Eulerjev graf in je $\delta(G) > 2$.*

Dokaz. Predpostavimo za začetek, da graf G vsebuje paralelni 2-stabilni obhod. Ker je vsak paralelni 2-stabilni obhod tudi paralelni 1-stabilni obhod, po trditvi 5.2 sledi, da je G Eulerjev graf (enako bi lahko sklepali, da je vsak paralelni 2-stabilni obhod paralelni dvojni obhod in uporabili trditev 5.1). Iz trditve 3.5 naprej sledi še $\delta(G) > 2$, kar pa v Eulerjevih grafih dejansko pomeni $\delta(G) \geq 4$.

Za dokaz preostale implikacije leme 5.5 naj graf G izpolnjuje pogoja iz leme. Lemo bomo dokazovali s pomočjo indukcije na maksimalno stopnjo $\Delta = \Delta(G)$ grafa G.

Naj bo za začetek $\Delta = 4$, v tem primeru velja $\delta(G) = \Delta(G) = 4$ in je G 4-regularni graf. Po trditvi 5.2 G vsebuje paralelni 1-stabilni obhod W'. Če W' ob tem ni tudi 2-stabilni obhod v W', obstaja vozlišče v z 2-ponovitvijo (1-ponovitev v W' ni). Za lažjo razlago naj bo najprej v edino vozlišče z 2-ponovitvijo. Velja, da ima W' v kateremkoli vozlišču stopnje 4, kjer ima 2-ponovitev (in ne 1-ponovitve), dve 2-ponovitvi. Označimo sosede vozlišča v v G z v_1, v_2, v_3 in v_4. Brez škode za splošnost lahko privzamemo, da je $A = v_1 \to v \to v_2$ del prve 2-ponovitve W' v v, $B = v_3 \to v \to v_4$ pa druge. To pomeni, da se podzaporedji A in B v W' pojavita dvakrat. Ker je W' paralelni 1-stabilni obhod, imamo natanko dve možnosti, kako sta A in B razporejena v W'. Ti dve možnosti sta $AABB$ (prikazana na levi strani slike 5.2) in $ABAB$ (prikazana na levi strani slike 5.3). Pri tem so na obeh slikah izpuščena ostala vozlišča.

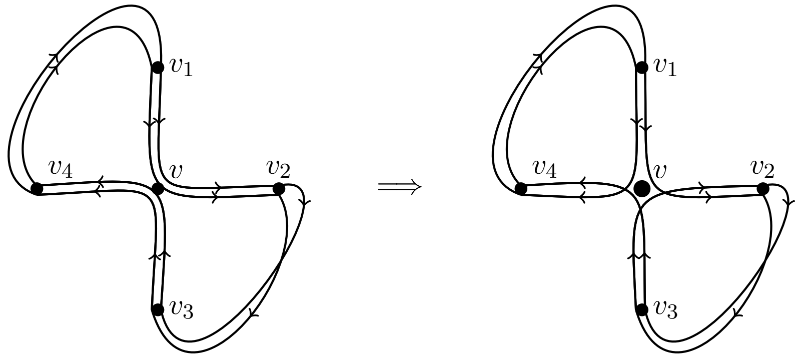
V prvem primeru sestavimo W iz W' v G tako, da se postavimo v poljubno vozlišče grafa G in sledimo W'. Naj bo $e' = xy$ povezava, ki jo pri tem prečkamo. Če je $x, y \in V(G) \setminus \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$, dodamo xy v W ter pri tem pazimo na vrstni red in usmeritev povezav. Prav tako v W dodamo po eno kopijo $v_1 \to v \to v_2$ in eno kopijo $v_3 \to v \to v_4$. Namesto preostalih kopij $v_1 \to v \to v_2$ in $v_3 \to v \to v_4$ v W dodamo $v_1 \to v \to v_4$ in $v_3 \to v \to v_2$ tako, da W ostane povezan. Konstrukcija je prikazana na desni strani slike 5.2.



Slika 5.2: Konstrukcija 2-stabilnega obhoda iz 1-stabilnega obhoda v primeru $AABB$

Na podoben način konstruiramo W tudi v drugem primeru, kar je prikazano na desni strani slike 5.3.

Trdimo, da je W, ki smo ga konstruirali, v obeh primerih paralelni 2-stabilni obhod grafa G. Najprej opazimo, da ima vsaka povezava e iz W kopijo e' v W. Vsaka povezava $e = xy$, kjer je $x \neq v$ in $y \neq v$, je tako prečkana dvakrat v isto smer v W, ker je dvakrat prečkana v isto smer v W'. Za preostale štiri povezave smo sami poskrbeli, da jih



Slika 5.3: Konstrukcija 2-stabilnega obhoda iz 1-stabilnega obhoda v primeru $ABAB$

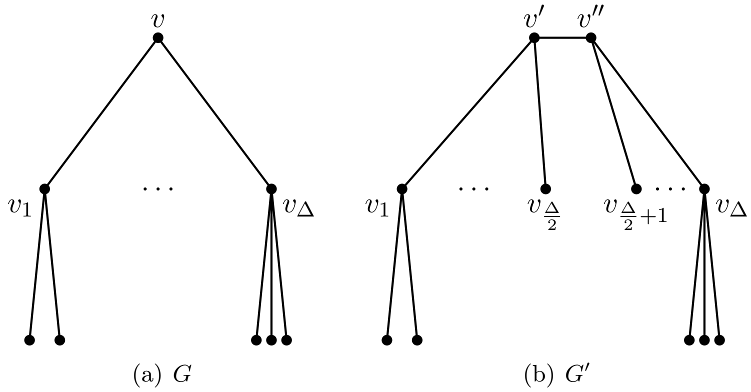
prečkamo dvakrat v isto smer. Zato sledi, da je W paralelni dvojni obhod. Prav tako je tudi 1-stabilni obhod, ker bi 1-ponovitev W v vozlišču u, različnem od v, v_1, v_2, v_3 ali v_4, pomenila, da ima 1-ponovitev v u že W'. Pri preostalih petih vozliščih pa smo med konstrukcijo pazili, da se v njih ne pojavi nova 1-ponovitev. Enako lahko argumentiramo, da se v W ne pojavljajo niti 2-ponovitve. Sledi, da je W paralelni 2-stabilni obhod grafa G. Ker je bil G poljuben in prav tako vozlišče v, sledi, da ima vsak 4-regularni graf, v katerem obstaja paralelni 1-stabilni obhod, ki ima le eno vozlišče z 2-ponovitvijo, tudi paralelni 2-stabilni obhod.

Preden nadaljujemo z indukcijo na Δ, nadaljujemo še z drugo indukcijo na število vozlišč, v katerih ima W' 2-ponovitev. To število označimo z $D_{\max}(W')$. Naj bo $D_{\max}(W') \geq 2$ in predpostavimo, da vsak povezan 4-regularni graf H, ki vsebuje paralelni 1-stabilni obhod W'' z $D_{\max}(W'') < D_{\max}(W')$ vozlišči z 2-ponovitvami, vsebuje tudi paralelni 2-stabilni obhod. Naj bo v poljubno vozlišče, v katerem ima W' 2-ponovitev in konstruirajmo W'' iz W' kot zgoraj. Ker je $D_{\max}(W'') < D_{\max}(W')$, po indukcijski predpostavki sledi, da ima graf G tudi paralelni 2-stabilni obhod. To pa nadalje pomeni, da vsak povezan 4-regularni graf vsebuje paralelni 2-stabilni obhod.

Predpostavimo sedaj, da je $\Delta \geq 6$ in da vsak graf H z $\Delta(H) < \Delta$, ki izpolnjuje pogoje iz leme 5.5, vsebuje paralelni 2-stabilni obhod. Ponovno, zaradi jasnosti dokaza, najprej privzemimo, da G vsebuje natanko eno vozlišče stopnje Δ, ki ga označimo z v. Naj bodo $v_1, \ldots, v_\Delta$ sosedi vozlišča v ter obravnavajmo dva primera.

Primer 1: $\Delta \equiv 2 \pmod 4$.

Graf G' iz G dobimo tako, da vozlišče v zamenjamo z dvema novima vozliščema v' in v'', ki ju med seboj povežemo. Potem pa v' povežemo še z $v_1, \ldots, v_{\frac{\Delta}{2}}$, v'' pa z ostalimi sosedi v iz G. Konstrukcija je prikazana na sliki 5.4.



Slika 5.4: Konstrukcija grafa G' iz G z zamenjavo vozlišča v s povezavo $v'v''$ v primeru $\Delta \equiv 2 \pmod 4$

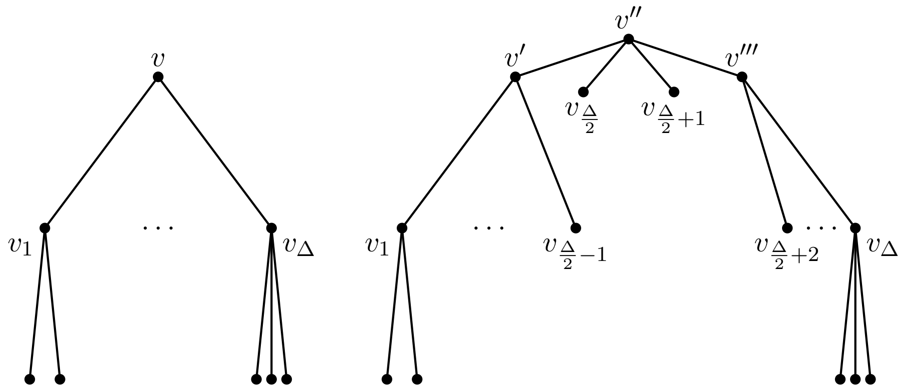
Vsa vozlišča v G', različna od v' in v'', so iste stopnje kot v G. Nadalje je $d_{G'}(v') = \frac{\Delta}{2} + 1$ in $d_{G'}(v'') = \frac{\Delta}{2} + 1$. Zato velja $\Delta(G') < \Delta$. Ker je $\Delta \geq 6$, sledi tudi $\delta(G') \geq 4$ (natančneje $d_{G'}(v'), d_{G'}(v'') \geq 4$, stopnja ostalih vozlišč je namreč že od prej ≥ 4). Iz $\Delta \equiv 2 \pmod 4$ sledi, da sta tudi stopnji $d_{G'}(v') = d_{G'}(v'') = \frac{\Delta}{2} + 1$ sodi in je torej G' Eulerjev graf, ki po indukcijski predpostavki vsebuje paralelni 2-stabilni obhod.

Podobno kot v bazi indukcije (ko je bil $\Delta = 4$) iz W' konstruiramo dvojni obhod W v G tako, da vse povezave iz W' razen $v'v''$ v enakem vrstnem redu in z enako usmeritvijo dodamo v W, potem pa zamenjamo povezave oblike uv' z uv, povezave oblike $v'u$ z vu, povezave oblike uv'' z uv in povezave oblike $v''u$ z vu za nek $u \in V(G)$.

Da dokažemo, da je W paralelni 2-stabilni obhod, najprej opazimo, da ima vsaka povezava e iz G kopijo e' v G' ($v'v''$ se v G ne pojavi). Od tod sledi, da je W paralelni 1-stabilni obhod. Prav tako bi 2-ponovitev obhoda W v vozlišču, ki ni sosednje ali enako v, pomenila, da ima 2-ponovitev v tem vozlišču tudi W'. Sledi, da mora biti 2-ponovitev v v sestavljena iz dveh sosedov v_i in v_j, torej si moramo ogledati povezavi $e = vv_i$ in $f = vv_j$. Oglejmo si dva podprimera. V prvem naj velja $i, j \leq \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil$. To pomeni, da bi morali biti e in f, dobljeni iz povezav v_iv', $v'v_j$, v W' dvakrat prečkanih, ena takoj za drugo. A ker W' v v' nima 2-ponovitve, to ni mogoče. Analogno sklepamo tudi, če drži $i, j > \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil$ (v razlagi zamenjamo v' z v''). V drugem primeru naj velja $i \leq \lceil \frac{\Delta}{2} \rceil < j$. To pa pomeni, da sta bili povezavi e in f dobljeni iz v_iv', $v'v''$ in $v''v_j$. Če v_i in v_j tvorita 2-ponovitev v v, se mora podzaporedje $v_i \to v' \to v'' \to' v_j$ v W' pojaviti dvakrat, kar pa ni mogoče, saj bi to predstavljalo 2-ponovitev v v' in v''. Sledi, da je W paralelni 2-stabilni obhod grafa G.

Primer 2: $\Delta \equiv 0 \pmod 4$.

Tudi v drugem primeru graf G' dobimo iz G z zamenjavo vozlišča v. V tem primeru ga nadomestimo s tremi vozlišči v', v'' in v''', pri čemer najprej v'' povežemo z v' in v''', potem pa v' povežemo z $v_1, \ldots, v_{\frac{\Delta}{2}-1}$, v'' z $v_{\frac{\Delta}{2}}$ in $v_{\frac{\Delta}{2}+1}$, v''' pa s preostalimi sosedi vozlišča v. Konstrukcija je prikazana na sliki 5.5.



(a) G (b) G'

Slika 5.5: Konstrukcija grafa G' iz G z zamenjavo vozlišča v s povezavama $v'v''$ in $v''v'''$ v primeru $\Delta \equiv 0 \pmod 4$

Podobno kot v prejšnem primeru so vsa vozlišča v G', različna od v', v'' in v''', iste stopnje kot v G, medtem ko je $d_{G'}(v') = d_{G'}(v''') = \frac{\Delta}{2}$ in $d_{G'}(v'') = 4$. Sledi, da je $\Delta(G') < \Delta$ in ker je $\Delta \geq 6$, sta tudi $d_{G'}(v')$ in $d_{G'}(v''')$ vsaj 4, torej je $\delta(G') \geq 4$. Iz $\Delta \equiv 0 \pmod 4$ sledi, da sta stopnji $d_{G'}(v') = d_{G'}(v''') = \frac{\Delta}{2}$ sodi in je torej G' Eulerjev graf. Po indukcijski predpostavki nadalje sledi, da G' vsebuje paralelni 2-stabilni obhod W'.

Sedaj uporabimo W', da konstruiramo dvojni obhod W v G tako, da vanj dodamo vse povezave iz W', različne od $v'v''$ in $v''v'''$, ter pri tem pazimo, da ne spremenimo vrstnega reda in usmeritve povezav iz W'. Za $u \in V(G)$ povezave oblike uv' zamenjamo z uv. Analogno zamenjavo uporabimo tudi za vse povezave oblike $v'u$, uv'', $v''u$, uv''' in $v'''u$.

Podobno kot v prejšnjem primeru trdimo, da je W paralelni 2-stabilni obhod. Pri tem najprej opazimo, da ima vsaka povezava e iz G kopijo e' v G' ($v'v''$ in $v''v'''$ se v G ne pojavita). Od tod sledi, da je W paralelni 1-stabilni obhod. Prav tako bi 2-ponovitev obhoda W v vozlišču, ki ni sosednje ali enako v, pomenila, da ima 2-ponovitev v tem vozlišču tudi W'. Sledi, da mora biti 2-ponovitev v v sestavljena iz dveh sosedov v_i in v_j, torej si moramo ogledati povezavi $e = vv_i$ in $f = vv_j$. Ogledamo si dva podprimera. V prvem naj velja $i, j \leq \frac{\Delta}{2} - 1$. To pomeni, da bi morali biti e in f, dobljeni iz povezav v_iv', $v'v_j$, v W' dvakrat prečkanih, ena takoj za drugo. A ker W' v v' nima 2-ponovitve, to ni mogoče. Analogno velja tudi, če je $i, j \in \{\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}+1\}$ ali kadar je $i, j > \frac{\Delta}{2}+1$ (v prvem primeru v razlagi zamenjamo v' z v'', v drugem pa z v'''). V drugem primeru naj velja $i \leq \frac{\Delta}{2}-1$ ter $j \in \{\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}+1\}$. To pa pomeni, da sta bili povezavi e in f dobljeni iz $v_i v'$, $v'v''$ in $v''v_j$. Da v_i in v_j tvorita 2-ponovitev v v, bi se moralo podzaporedje $v_i \to v' \to v'' \to' v_j$ v W' pojaviti dvakrat, kar pa ni mogoče, saj bi to predstavljalo 2-ponovitev v v' in v''. Analogno lahko sklepamo tudi za $i > \frac{\Delta}{2}+1$ in $j \in \{\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}+1\}$ ter $i \leq \frac{\Delta}{2}-1$ in $j > \frac{\Delta}{2}+1$ (spet zamenjamo v' z v'' ter v'''). Sledi, da je W paralelni 2-stabilni obhod grafa G.

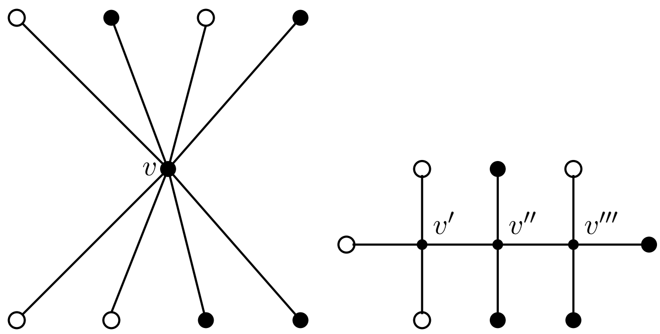
Do sedaj smo dokazali, da v primeru, ko graf G izpolnjuje pogoje iz leme 5.5 in ima natanko eno vozlišče stopnje Δ, vsebuje paralelni 2-stabilni obhod. Nadaljujemo z drugo indukcijo na število vozlišč maksimalne stopnje Δ, označeno z $D_{\max}(G)$. Naj bo $D_{\max}(G) \geq 2$ in naj za vsak graf H, ki izpolnjuje pogoje iz leme 5.5 in $D_{\max}(H) < D_{\max}(G)$, velja, da vsebuje paralelni 2-stabilni obhod. Naj bo v eno izmed vozlišč stopnje Δ. Konstruirajmo graf G' iz G kot zgoraj. Potem je $D_{\max}(G') < D_{\max}(G)$ ter G' posledično vsebuje paralelni 2-stabilni obhod, ki ga lahko uporabimo, da konstruiramo paralelni 2-stabilni obhod še v G. □

Sledi alternativni dokaz izreka 5.4.

Dokaz. Po trditvi 3.5 za vsak graf G, ki vsebuje d-stabilni obhod, velja $\delta(G) > d$. Prav tako se, če G ne bi bil Eulerjev graf, vhodna in izhodna stopnja paralelnega dvojnega obhoda W v vozlišču lihe stopnje ne bi ujemala, saj je v W vsaka povezava uporabljena dvakrat v isto smer.

Za dokaz preostale implikacije izreka 5.4 predpostavimo, da je G Eulerjev graf in $\delta(G) > d$. Pri tem lahko zaradi sodosti vozlišč privzamemo, da je $\delta(G)$ vedno sodo število. Ker za 2-stabilne obhode izrek sledi iz leme 5.5, lahko predpostavimo tudi, da je $d \geq 3$. Naj bo G' graf, ki ga dobimo, če vsako vozlišče v, za katerega je $d_G(v) > 4$, kot v konstukciji, opisani v dokazu leme 5.5, zamenjamo z $(d_G(v)-2)/2$ vozlišči, ki jih med seboj povežemo v pot P_v. Potem pa krajišči P_v povežemo vsako s po tremi različnimi sosedi vozlišča v iz G, preostala vozlišča v P_v pa vsako s po dvema preostalima sosedoma v v G tako, da je na koncu vsak sosed vozlišča v iz G povezan z natanko enim vozliščem iz P_v. Tako dobljen G' je 4-regularni graf in po lemi 5.5 vsebuje paralelni 2-stabilni obhod W'. Naj bo W paralelni dvojni obhod v G, ki ga iz W' dobimo po naslednjem postopku. Začnemo v poljubnem vozlišču grafa G' in sledimo W'. Naj bo $e' = xy$ povezava, ki jo v danem trenutku prečkamo. Če x in y za noben v nista vsebovana v prej opisani poti P_v, dodamo e' v W ter pri tem pazimo, da se vrstni red in usmeritev povezav iz W' ohrani. Če je za nek v, $x \in P_v$, namesto e' dodamo povezavo vy. Podobno namesto e' za $y \in P_v$ dodamo xv. Povezave, kjer sta obe krajišči vsebovani na neki (isti) poti P_v v W, preprosto izpustimo.

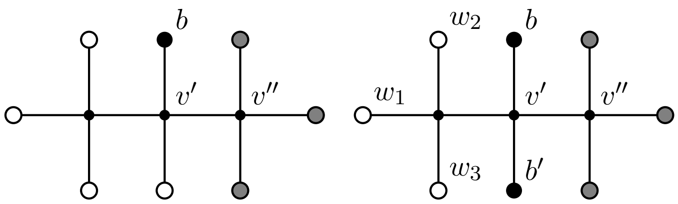
Trdimo, da je tako dobljeni paralelni dvojni obhod W paralelni d-stabilni obhod grafa G. Predpostavimo nasprotno in z v označimo poljubno vozlišče, v katerem ima W netrivialno ponovitev reda $\leq d$. Naj bo maksimalna netrivialna ponovitev v v, ki je reda $\leq d$, reda d' (za nek $d' \leq d$). Ker smo uporabili isto konstrukcijo kot v dokazu leme 5.5, sledi, da je W paralelni 2-stabilni obhod (torej $d' > 2$). Od tod zaradi simetrije ponovitev sledi, da je $d_G(v) > d' + 2$, sicer bi imel W v v tudi vsaj eno 1-ponovitev, ali vsaj eno 2-ponovitev. Prav tako ni težko opaziti, da je zaradi ujemanja vhodne in izhodne stopnje red vsake ponovitev v paralelnem dvojnem obhodu sod. Sledi, da je $d_G(v) \geq 8$. Označimo vozlišča v $N(v)$, ki so vsebovana v maksimalni ponovitvi v v, z N ($|N| = d'$). V G' obstaja pot P_v, ki je nadomestila vozlišče v iz G. Za lažjo predstavo si lahko vozlišča na P_v predstavljamo razporejena v vodoravni črti, pri čemer so vsi sosedi iz $N(v)$, razen dveh, razporejeni navpično nad in pod vozlišči P_v. Preostala dva soseda vozlišča v pa sta postavljena v isti črti kot P_v, eden na levi in drugi na desni strani. Struktura P_v skupaj z vozlišči iz $N(v)$ v G' za primer, ko je $d_G(v) = 8$ (pri tem vozlišča v', v'' in v''' zamenjajo v iz G) je prikazana na sliki 5.6 (b). Nadalje lahko vozlišča iz $N(v)$ pobarvamo z dvema barvama (belo in črno) tako, da so vsa vozlišča iz N črna ter vsa vozlišča in $N(v) \setminus N$ bela. Primer takšnega barvanja je prikazan na sliki 5.6.



(a) v in $N(v)$ v G (b) P_v in $N(v)$ v G'

Slika 5.6: Prikaz v v G in P_v v G', pri čemer so vozlišča iz N pobarvana črno

Ker argument, ki ga bomo uporabili v nadaljevanju, velja tako za črna kot za bela vozlišča (tudi množica $N(v)\setminus N$, zaradi simetrije ponovitev tvori netrivialno ponovitev), lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da je vozlišče, ki leži na isti vodoravni črti kot P_v, levo od P_v, bele barve. Ogledamo si dve možnosti, ki nastopita, glede na kakšen način se prvič pojavi črno vozlišče, če se premikamo od leve proti desni. Označimo najbolj desno vozlišče črne barve (ne glede na to, ali leži na zgornji ali na spodnji črti) z b ter njegovega soseda iz P_v z v'. Ker so črna vozlišča vsaj štiri, v' zagotovo ni desno krajišče P_v. Tako lahko desnega soseda v' v P_v označimo z v''. V prvi možnosti je b edini črni sosed vozlišča v' (slika 5.7 (a)), v drugi pa je črn tudi drugi sosed v' iz $N(v)$, ki leži nasproti b (torej pod ali nad v') (slika 5.7 (b)). Spet lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da je povezava bv' v W' uporabljena obakrat proti v'. To, da ima W v v N-ponovitev, po definiciji pomeni, da vsakič, ko W pride v v iz vozlišča v N, tudi nadaljuje proti vozlišču v N. Iz konstrukcije W to nadalje pomeni, da vsakič, ko W' pride v vozlišče na P_v iz črnega vozlišča, tudi zapusti P_v proti črnemu vozlišču (lahko prej prečka več vozlišč na P_v, a nobenega belo obarvanega vozlišča). Analogno velja tudi za bela vozlišča. Nadalje to pomeni, da v W' obstajata dve podzaporedji, ki se začneta z $b \to v'$, morebiti nadaljujeta po vozliščih iz P_v in končata v od b (in med sabo) različnem črnem vozlišču. V prvi možnosti, ko je b edini črni sosed vozlišča v', se mora v W' dvakrat pojaviti podzaporedje vozlišč $b \to v' \to v''$, saj v nasprotnem primeru b ne more biti povezan z dvema črnima vozliščema. Ker pa to predstavlja 2-ponovitev v v', je to v protislovju z dejstvom, da je W' paralelni 2-stabilni obhod. V drugem primeru označimo l belih vozlišč, ki so levo od b z $w_1, \ldots w_l$, pri čemer je l neko liho število. Na sliki 5.7 (b) jih označimo z w_1, w_2 in w_3. Označimo drugega (črnega) soseda v' iz $N(v)$ z b'. Ker se lahko podzaporedje $b \to v' \to b'$ v W' pojavi največ enkrat (sicer bi imeli 2-ponovitev v v') in ker mora biti vsaj eno izmed vozlišč $w_1, \ldots, w_l$ povezano z nekim od $w_1, \ldots, w_l$ različnim belim vozliščem (sicer bi vozlišča $w_1, \ldots, w_l$ v W tvorila liho ponovitev, ki pa je v paralelnem dvojnem obhodu nemogoča), to pomeni, da bi morali povezavo $v'v''$ v W' uporabiti več kot dvakrat, kar pa je seveda protislovno.



(a) b je edini črni sosed v' (b) Oba soseda v' iz $N(v)$ sta črna

Slika 5.7: Dve možnosti, kako izgleda P_v, natančneje v' in b. Pri tem vozlišča, za katera ni določeno, kakšne barve so, obarvamo sivo.

Ker je bil v izbran poljubno in je bilo d' poljubno naravno število $2 < d' \leq d$, sledi, da je tako konstruiran W paralelni d-stabilni obhod grafa G in je izrek s tem dokazan. □

5.1.3 Konstrukcije paralelnih dvojnih obhodov

V tem razdelku predstavimo dva zanimiva načina za algoritmično konstruiranje paralelnih 2-stabilnih obhodov in razložimo, zakaj ne delujeta v splošnem.

Ideja za prvi algoritem temelji na dokazu trditve 5.1, v kateri smo paralelni dvojni obhod dobili tako, da smo v isti smeri dvakrat zapored prečkali Eulerjev obhod grafa. Ker bi pri tem nastale 2-ponovitve, za konstrukcijo paralelnega 2-stabilnega obhoda ne moremo uporabiti istega Eulerjevega obhoda, ki ga prečkamo dvakrat. Zato poizkusimo poiskati dva Eulerjeva obhoda, ki sta si čimbolj različna, in ju s konkatenacijo združiti v paralelni 2-stabilni obhod.

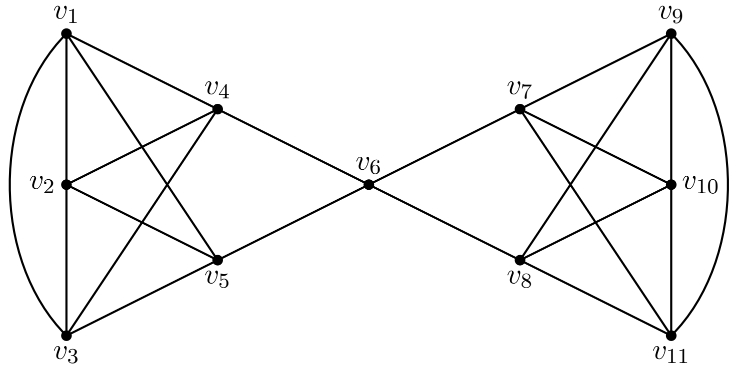
Naj bo torej G Eulerjev graf z n vozlišči (označenimi z $v_1, \dots, v_n$), ki izpolnjuje tudi ostale pogoje iz izreka 5.4, in W' Eulerjev obhod v njem. W' za vsako vozlišče v v G porodi vozliščno sliko $F_{v,W'}$, podrobneje opisano v razdelku 2.2, ki je v tem primeru unija povezav (saj vsaka povezava v W' nastopi le enkrat). Ideja je, da kadar je to mogoče, v G poiščemo še en Eulerjev obhod W'', ki vsako povezavo prečka v isti smeri kot W', in za vsako vozlišče v v G porodi takšno vozliščno sliko $F_{v,W''}$, da je multigraf, ki ga dobimo, ko združimo $F_{v,W'}$ in $F_{v,W''}$, brez zank in vzporednih povezav. V tem primeru bo dvojni obhod, ki ga dobimo s konkatenacijo W' in W'', paralelni 2-stabilni obhod grafa G. Če bi zahtevali, da multigraf, ki ga dobimo po združitvi $F_{v,W'}$ in $F_{v,W''}$, sestoji iz natanko enega cikla, bi na tak način lahko konstruirali paralelen strogi obhod.

Izkaže se, da ni moč vedno konstruirati paralelnega 2-stabilnega obhoda grafa tako, da združimo dva različna Eulerjeva obhoda grafa. Pri tem najprej omenimo, da so Eulerjevi grafi brez prereznih povezav. V nasprotnem primeru bi bila vsota stopenj vseh vozlišč v povezani komponenti grafa, ki jo dobimo z odstranitvijo prerezne povezave, enaka dvakratniku vseh povezav v njej, torej sodo število. Hkrati pa stopnja vseh vozlišč, razen tistega, ki je sosednje prerezni povezavi (ta je v na novo konstruiranem grafu liha), ostane soda, kar je absurdno. Analogno lahko dokažemo tudi, da morebitno prerezno vozlišče v Eulerjevem grafu, v nobeni izmed povezanih komponent ne more biti lihe stopnje. Problem torej tiči v prereznih vozliščih, ki graf razdelijo v dve povezani komponenti in imajo pri tem v obeh povezanih komponentah stopnjo 2. V tem primeru namreč v grafu, ob upoštevanju paralelnosti, ne moremo najti dveh dovolj različnih Eulerjevih obhodov. Če pogledamo graf G, ki je prikazan na sliki 5.8, lahko hitro preverimo, da ima G paralelni 2-stabilni obhod $v_1 \to v_2 \to v_3 \to v_1 \to v_2 \to v_4 \to v_1 \to v_5 \to v_2 \to v_3 \to v_4 \to v_6 \to v_5 \to v_2 \to v_4 \to v_6 \to v_7 \to v_9 \to v_8 \to v_6 \to v_7 \to v_{10} \to v_8 \to v_{11} \to v_7 \to v_9 \to v_{10} \to v_{11} \to v_7 \to v_{10} \to v_{11} \to v_9 \to v_8 \to v_{11} \to v_9 \to v_{10} \to v_8 \to v_6 \to v_5 \to v_3 \to v_1 \to v_5 \to v_3 \to v_4 \to v_1$. Ker pa je vozlišče v_6 prerezno, iz poljubnega Eulerjevega obhoda W v G z zgoraj opisanim algoritmom ne moremo sestaviti Eulerjevega obhoda, ki bi bil dovolj različen, da bi skupaj tvorila 2-stabilni obhod.

Glavna ideja drugega algoritma je, da s konkatenacijo združimo paralelne 2-stabilne obhode v posameznih blokih grafa G in tako konstruiramo paralelni 2-stabilni obhod v G.

Naj bo G graf, ki zadostuje pogojem iz izreka 5.4. Označimo bloke v G z $B_1, \dots, B_k$ in prerezna vozlišča z $v_1, \dots, v_l$. Za vsak i, $1 \leq i \leq k$, poiščemo paralelni 2-stabilni obhod W_i v B_i. S konkatenacijo nato v ustreznih prereznih vozliščih združimo paralelne 2-stabilne obhode blokov v paralelni 2-stabilni obhod grafa. Pri tem pazimo, da ne ustvarimo kakšne 1-ponovitve ali 2-ponovitve.

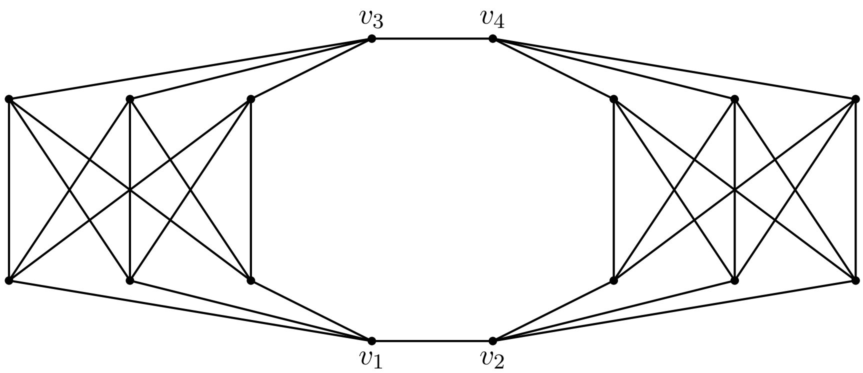
Kot pri prvem predstavljenem algoritmu se tudi v tem primeru izkaže, da ga ne moremo uporabiti v splošnem. Nobenega izmed paralelnih 2-stabilnih obhodov, ki jih ima graf G, prikazan na sliki 5.8, ni moč konstruirati s konkatenacijo paralelnih 2-stabilnih obhodov v blokih. Vozlišče v_6 je edino prerezno vozlišče grafa G in je vsebovano v obeh blokih grafa. Ker je stopnja v_6 v obeh blokih enaka 2, po izreku 5.4 sledi, da



Slika 5.8: Graf, katerega paralelni 2-stabilni obhod ne more biti sestavljen s konkatenacijo dveh Eulerjevih obhodov

nobeden od njiju ne vsebuje paralelnega 2-stabilnega obhoda. Podoben primer se pojavi, kadar v grafu nastopijo mostovi.

Do enakih ugotovitev pridemo tudi, če zahteve nekoliko omejimo in namesto paralelnih 2-stabilnih obhodov v blokih iščemo paralelne 1-stabilne obhode, kjer se 1-ponovitve (ali 2 ponovitve, kadar govorimo o blokih, ki so mostovi) pojavijo le v prereznih vozliščih in potem zanje poskrbimo pri konkatenaciji v 2-stabilni obhod grafa. Graf G, ki je prikazan na sliki 5.9, po izreku 5.4 vsebuje paralelni 2-stabilni obhod. Ampak vozlišča v_1, v_2, v_3 in v_4, ki so v blokih stopnje 3, preprečujejo, da bi v njih našli kakršenkoli paralelni dvojni obhod (trditev 5.2).



Slika 5.9: Graf, katerega paralelni 2-stabilni obhod ne more biti sestavljen s konkatenacijo paralelnih 2-stabilnih (ali 1-stabilnih) obhodov v njegovih blokih

5.2 Antiparalelni dvojni obhodi

Pomen antiparalelnih dvojnih obhodov (predvsem antiparalelnih strogih obhodov) se je v zadnjem času drastično povečal. Poleg že od prej poznane povezave z vložitvami v orientabilne ploskve se je pokazala tudi njihova uporaba v praksi. Pred tem je namreč dolgo časa veljalo, da je možno kompleksne strukture DNK sestavljati samo iz več verig DNK, potem pa so Kočar in sod. v [56] demonstrirali, da je moč polieder sestaviti tudi iz ene verige DNK. Pri tem so v igro kot matematični model prišli antiparalelni strogi obhodi, kajti (kot smo omenili že v uvodu) komplementarne pare vedno tvorijo nasprotno usmerjeni odseki verige DNK, kar predstavlja antiparalelno orientacijo.

Dejstvo, da vsak povezan graf vsebuje antiparalelni dvojni obhod, je opazil že Euler, dokazal pa ga je leta 1895 Tarry.

Trditev 5.6 ([88]) *Vsak povezan graf vsebuje antiparalelni dvojni obhod.*

Dokaz. Naj bo G graf. Označimo z G' podvojeni graf grafa G. V G' vsaki povezavi e iz G ustrezata dve povezavi e' in e''. Iz G konstruiramo usmerjeni graf tako, da za vsako povezavo e iz G povezavi e' in e'', ki ji ustrezata v G', usmerimo v nasprotno smer. Tako dobimo usmerjeni graf $D(G')$, v katerem je za vsako vozlišče njegova vhodna stopnja enaka njegovi izhodni stopnji. Po izreku 1.4 ima $D(G')$ Eulerjev obhod, ki je hkrati antiparalelni dvojni obhod originalnega grafa G. $\square$

5.2.1 Antiparalelni strogi obhodi

V razdelku 1.1.2 smo že govorili o vložitvah grafov z enim licem, ki smo jih kasneje uporabili za karakterizacijo grafov, ki vsebujejo stroge obhode. Za potrebe antiparalelnih strogih obhodov, predstavljenih v nadaljevanju, v tem razdelku pregledamo karakterizacijo grafov, ki imajo vložitev z enim licem v neko orientabilno ploskev.

Xuong je najprej v [101] karakteriziral grafe, ki imajo vložitev z največ dvema licema v neko orientabilno ploskev in pri tem uporabljal Bettijevo število $\beta(G) = |E(G)| - |V(G)| + 1$. Pri tem gre izpostaviti, da že iz dejstva, da imajo orientabilne ploskve sodo Eulerjevo karakteristiko $\chi(\Sigma) = V - E + F$, sledi, da se pri vložitvi grafa G v orientabilno ploskev parnost števila lic in Bettijevo število $\beta(G)$ vedno razlikujeta.

Izrek 5.7 ([101, Theorem 2]) *Povezan graf G s sodim (lihim) Bettijevem številom ima vložitev z največ dvema licema v orientabilno ploskev natanko tedaj, ko v njem obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ima vsaka (vsaka razen ena) povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ sodo število povezav.*

Kasneje so Behzad in sod. v [10] ter Thomassen v [91] predstavili še poseben primer izreka 5.7, ki govori o vložitvah grafov z enim licem v orientabilne ploskve.

Izrek 5.8 ([10], [91]) *Povezan graf G ima vložitev z enim licem v orientabilno ploskev natanko tedaj, ko v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta v ko-drevesu $G - E(T)$ sodo število povezav.*

Povezavo med antiparalelnimi dvojnimi obhodi in vložitvami grafov v orientabilne ploskve so (do neke mere) predstavili že Škoviera in Nedela v [87] ter Thomassen v [90].

Izrek 5.9 *Povezan graf G vsebuje antiparalelni strogi obhod natanko tedaj, ko ima vložitev z enim licem v orientabilno ploskev.*

Dokaz. Naj graf G vsebuje antiparalelni strogi obhod W. W predstavlja edini lični obhod v vložitvi (Π, λ) grafa G, ob tem pa za vsako vozlišče v porodi vozliščno sliko $F_{v,W}$, ki je sestavljena iz enega cikla. Tako ima G vložitev z enim licem v neko ploskev Σ. Ker W vsako povezavo prečka po enkrat v vsako smer, sledi, da je Σ orientabilna ploskev.

Za dokaz preostale implikacije izreka 5.9 naj bo (Π, λ) vložitev grafa G z enim licem v neko orientabilno ploskev Σ. Vložitev z enim licem določa en lični obhod W in za vsako vozlišče v vozliščno sliko $F_{v,W}$, ki vsebuje natanko en cikel. Po trditvi 2.3 sledi, da je W strogi obhod v G. Ker je ob tem Σ orientabilna, W vsako povezavo prečka po enkrat v vsako smer in je torej antiparalelni strogi obhod. □

Izrek 5.10 *Povezan graf G vsebuje antiparalelni strogi obhod natanko tedaj, ko v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ sodo število povezav.*

Dokaz. Po izreku 5.9 povezan graf G vsebuje antiparalelni strogi obhod natanko tedaj, ko ima G vložitev z enim licem v neko orientabilno ploskev. Slednje pa po izreku 5.8 drži natanko tedaj, ko v G obstaja vpeto drevo z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta njegovega ko-drevesa soda. □

5.2.2 Antiparalelni d-stabilni obhodi

Leta 1990 je Thomassen dokazal naslednji izrek in karakteriziral grafe, ki vsebujejo antiparalelne 1-stabilne obhode. S tem je rešil 50 let star odprt problem, ki ga je v [70] postavil Ore, vmes pa so ga delno rešili Troy v [92] ter Eggleton in Skilton v [26].

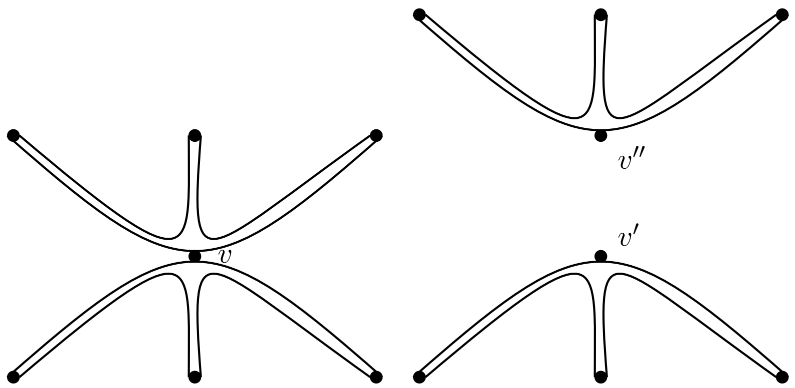
Izrek 5.11 ([90, Theorem 3.3]) *Povezan graf G vsebuje antiparalelni 1-stabilni obhod natanko tedaj, ko je $\delta(G) > 1$ in v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta soda ali pa vsebuje vozlišče v s stopnjo $d_G(v) \geq 4$.*

Neodvisno je bilo do sedaj predstavljenih več posplošitev izreka 5.11. Že Ellis-Monaghan je v [28] opazovala, katere grafe bi bilo moč konstruirati iz ene verige DNK, še pred tem pa sta Fan in Zhu v [31] opazovala grafe, ki bi jih bilo možno konstruirati iz m verig DNK. V nadaljevanju predstavimo našo posplošitev izreka 5.11 v smislu d-stabilnih obhodov in dokaz zanjo.

Izrek 5.12 *Naj bo d naravno število. Graf G vsebuje antiparalelni d-stabilni obhod natanko tedaj, ko je $\delta(G) > d$ in v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče v s stopnjo $d_G(v) \geq 2d + 2$.*

Dokaz. Predpostavimo najprej, da graf G vsebuje antiparalelni d-stabilni obhod W. Iz trditve 3.5 sledi, da je $\delta(G) > d$. Če ob tem velja še $\Delta(G) < 2d + 2$, po lemi 1.8 sledi, da je W tudi antiparalelni strogi obhod grafa G in naprej po izreku 5.10, da v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G-E(T)$ vsebuje sodo število povezav. Zato lahko predpostavimo, da je odslej $\Delta(G) \geq 2d + 2$ ter z $r(W)$ označimo število vozlišč, v katerih ima W netrivialno ponovitev (te so, če je njihov red večji od d v d-stabilnih obhodih dovoljene, kar posledično zaradi simetrije ponovitev pomeni, da lahko nastopajo samo v vozliščih stopnje $\geq 2d + 2$).

Nadaljujemo z indukcijo na $r = r(W)$. Če je $r = 0$, sledi, da je W antiparalelni strogi obhod in ima G posledično, podobno kot zgoraj, vpeto drevo T z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ vsebuje sodo število povezav. Naj bo $r = 1$ in v s stopnjo $d(v) \geq 2d + 2$ edino vozlišče, v katerem ima W netrivialno ponovitev (reda več kot d). Za lažjo predstavo si najprej oglejmo primer, ko ima W v v natanko dve netrivialni ponovitvi $N \subseteq N(v)$ in $N(v) \setminus N$, in konstruirajmo graf G' iz G tako, da vozlišče v glede na N in $N(v) \setminus N$ razdelimo v dve novi vozlišči. Označimo vozlišče, ki je po novem sosednje z vozlišči iz N, z v', in novo vozlišče, ki je sosednje z $N(v) \setminus N$ z v''. Antiparalelni dvojni obhod W uporabimo, da v G' konstruiramo dvojni obhod W'. Postavimo se v poljubno od v različno vozlišče v G in sledimo W. Naj bo $e = xy$ povezava, ki jo trenutno prečkamo. Če je $x \neq v$ in $y \neq v$, dodamo e v W' ter pri tem pazimo, da ne spremenimo vrstnega reda in usmeritve povezav iz W. Če je $x = v$ in $y \in N$, namesto povezave e v W' dodamo $v'y$. Analogno v primerih, ko je $x = v$ in $y \in N(v) \setminus N$, e nadomestimo z $v''y$, ko je $y = v$ in $x \in N$, e nadomestimo z xv' ter, ko je $y = v$ in $x \in N(v) \setminus N$, e nadomestimo z xv''. Konstrukcija novega grafa G' iz G in dvojnega obhoda W' iz W je prikazana na sliki 5.10. Najprej opazimo, da vsaki povezavi e' v G' ustreza natanko ena povezava e v G. Ker W prečka e po enkrat v vsako smer, je tudi povezava e' v W' uporabljena po enkrat v vsaki smeri. Torej je W' antiparalelni dvojni obhod. Za vsako vozlišče $u \in V(G) \setminus \{v', v''\}$ je W' brez netrivialnih ponovitev, saj bi sicer v u netrivialno ponovitev imel tudi W. Za vozlišči v' in v'' smo med konstrukcijo W' poskrbeli, da sta brez netrivialnih ponovitev. Sledi, da je W' antiparalelni strogi obhod v G, in naprej, po izreku 5.10, da ima G' vpeto drevo T' z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ vsebuje sodo število povezav. Lema 4.2 potem implicira, da v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa soda ali pa vsebuje vozlišče v (posledično je torej vsaka povezana komponenta ko-drevesa soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje $\geq 2d+2$).



(a) W pri v v G

(b) W' pri v' in v'' v G'

Slika 5.10: Konstrukcija grafa G' in antiparalelnega strogega obhoda W' v njem s pomočjo grafa G in antiparalelnega d-stabilnega obhoda W. Opozorimo, da med vozlišči v spodnjem in zgornjem delu $N(v)$ (ter $N(v')$ in $N(v''))$ obstajajo poti, ki na sliki niso prikazane.

Naredimo posplošitev in dovolimo, da ima antiparalelni d-stabilni obhod W v v k netrivialnih ponovitev, pri čemer je $k > 2$. Označimo jih z $N_1, \ldots, N_k \subseteq N(v)$ (seveda velja $\bigcup_{1\leq i\leq k} N_i = N(v)$). V tem primeru konstruirajmo graf G' iz G z zamenjavo vozlišča v s k novimi vozlišči $v_1, \ldots, v_k$, ki jih nadalje povežemo z vozlišči iz $N_1, \ldots, N_k$. Pri tem za $1 \leq i \leq k$, vozlišče v_i povežemo z vozlišči iz N_i. Kot v primeru, ko je $k = 2$, konstruiramo dvojni obhod W' v G' iz W tako, da ustrezno zamenjamo povezave, sosednje z v, s povezavami, sosednjimi z novimi vozlišči $v_1, \ldots, v_k$. Z enakimi argumenti kot v primeru, ko je $k = 2$, lahko utemeljimo, da je W' antiparalelni strogi obhod grafa G' in da ima le-ta torej vpeto drevo T' z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ vsebuje sodo število povezav. Po lemi 4.2 v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče v, ki je stopnje $\geq 2d+2$. Prva implikacija iz izreka je torej dokazana za primer, ko ima graf antiparalelni d-stabilni obhod, ki ima le eno vozlišče z netrivialnimi ponovitvami.

Naj bo odslej $r > 1$ in v eno izmed vozlišč, v katerih ima W netrivialno ponovitev. Ponovno uporabimo zgoraj opisano konstrukcijo z razdelitvijo vozlišča v v k novih vozlišč, da iz grafa G dobimo graf G' in v njem poiščemo antiparalelni dvojni obhod W'. Jasno je $r(W') < r(W)$. Zato, po indukciji na r, v G' obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T')$ soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje $\geq 2d+2$. Ker je vozlišče v stopnje $\geq 2d+2$, po lemi 4.2 sledi, da takšno vpeto drevo obstaja tudi v grafu G (lema 4.2 namreč zagotavlja obstoj drevesa, ki ima lahko v lihih komponentah poleg vozlišč stopnje $\geq 2d+2$ tudi v).

Za dokaz preostale implikacije izreka 5.12 naj v grafu G, $\delta(G) > d$, obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče v s stopnjo $d_G(v) \geq 2d+2$. Nadaljujemo z indukcijo na $\xi = \xi_{2d+2}(G)$. Če je $\xi_{2d+2}(G) = 0$, sledi, da v G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ sodo število povezav. Izrek 5.10 implicira, da takšen G vsebuje antiparalelni strogi obhod, ki je, ker je $\delta(G) > d$, po lemi 1.8 hkrati tudi antiparalelni d-stabilni obhod.

Naj bo $\xi = 1$, T vpeto drevo grafa G, ki realizira ξ, in v vozlišče stopnje najmanj $2d+2$ v edini lihi komponenti ko-drevesa $G - E(T)$. Naj bo $\mathcal{G}$ družina grafov, ki jih lahko iz G dobimo tako, da vozlišče v zamenjamo z dvema vozliščema v' in v'', potem pa v' povežemo z $\left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil$ vozlišči iz $N(v)$, v'' pa s preostalimi $\left\lfloor \frac{d(v)}{2} \right\rfloor$ vozlišči. Po lemi 4.3 obstaja graf $G' \in \mathcal{G}$ z vpetim drevesom T' z lastnostjo, da vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ vsebuje sodo število povezav. Izrek 5.10 zagotavlja, da G' vsebuje tudi antiparalelni strogi obhod W'. Sedaj s pomočjo le-tega sestavimo dvojni obhod W v G. Postavimo se v poljubno vozlišče iz $V(G') \cap V(G)$ in sledimo W'. Naj bo $e' = xy$ povezava, ki jo na tej poti trenutno prečkamo. Če velja $x, y \notin \{v', v''\}$, dodamo e' v W, pri tem pa pazimo, da ne spremenimo vrstnega reda in usmeritve povezav iz W'. Če je $x \in \{v', v''\}$, namesto povezave e' v W vstavimo vy. Podobno tudi za $y \in \{v', v''\}$ namesto e' v W vstavimo xv. Ker vsaki povezavi e v G ustreza natanko ena povezava e' iz G' in ker W' le-to prečka po enkrat v vsako smer, sledi, da je tudi W antiparalelni dvojni obhod. Prav tako je za vsako vozlišče $u \in V(G) \setminus \{v'\}$ W brez netrivialnih ponovitev, saj bi sicer v u netrivialno ponovitev imel že W'. Po konstrukciji ima W v v natanko dve netrivialni ponovitvi—$N_{G'}(v')$-ponovitev in $N_{G'}(v'')$-ponovitev. Ker velja $\delta(G) > d$, $|N_{G'}(v')| = \left\lceil \frac{d(v)}{2} \right\rceil > d$ in $|N_{G'}(v')| = \left\lfloor \frac{d(v)}{2} \right\rfloor > d$, je W antiparalelni d-stabilni obhod v G. S tem smo dokazali preostalo implikacijo izreka v primeru, ko ima G vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali vsebuje vozlišče stopnje najmanj $2d+2$ in je $\xi_{2d+2}(G) = 1$.

Naj bo odslej $\xi > 1$, T vpeto drevo v G, ki realizira ξ in v poljubno vozlišče stopnje najmanj $2d+2$ v eni izmed lihih komponent ko-drevesa $G - E(T)$. Kot v primeru, ko je $\xi = 1$, definiramo družino grafov $\mathcal{G}$ in s pomočjo leme 4.4 sklepamo, da obstaja $G' \in \mathcal{G}$ z vpetim drevesom T', za katerega je $\xi_{2d+2}(G', T') < \xi_{2d+2}(G, T)$. Ker T realizira $(2d+2)$-pomanjkljivostno število grafa G, sledi, da je $\xi_{2d+2}(G') < \xi_{2d+2}(G)$. Zato G' po indukciji vsebuje antiparalelni d-stabilni obhod. Kot zgoraj z zamenjavo vozlišč v' in v'' z v konstruirajmo antiparalelni dvojni obhod W v G iz W'. Iz konstrukcije antiparalelnega dvojnega obhoda W je razvidno, da če ima W ponovitev reda $\leq d$ v vozlišču $u \neq v$, ima takšno ponovitev že W' in če ima W ponovitev reda $\leq d$ v vozlišču v, ima W' ponovitev reda $\leq d$ v v' ali v'', kar pa je protislovno. Sledi, da G vsebuje antiparalelni d-stabilni obhod.

S tem je izrek 5.12 dokazan. □

S pomočjo naslednjega izreka, ki je posledica Tuttejevega in Nash-Williamsovega izreka o pakiranju dreves ([93] in [65]), lahko za posebne primere hitro preverimo, ali vsebujejo antiparalelni d-stabilni obhod.

Izrek 5.13 ([59, Theorem 2]) *Vsak* 4-*(po povezavah) povezan graf vsebuje dve po povezavah disjunktni vpeti drevesi.*

Če je G 4-(po povezavah) povezan graf z $\delta(G) > d$ vozliščem stopnje najmanj $2d+2$ ali sodim Bettijevem številom, potem zanj takoj sledi, da vsebuje antiparalelelni d-stabilni obhod. Izrek 5.13 namreč zagotavlja, da v takšnem G obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da ko-drevo $G - E(T)$ vsebuje vsa vozlišča G in ima eno samo povezano komponento. Ta komponenta pa je po predpostavki soda ali pa vsebuje vozlišče dovolj visoke stopnje.

Poglavje 6

Dvojni obhodi s predpisanim tipom povezav

V tem poglavju v izreku 6.3 in izreku 6.8 združimo rezultate o paralelnih in antiparalelnih dvojnih obhodih iz prejšnjega poglavja. Predstavljeni rezultati so v praksi postali posebej zanimivi z objavo članka [55] avtorjev Kočar in sod., ki med drugim označuje tudi razcvet tako imenovanega origamija s proteini, ki je bil v zadnjem desetletju močno v senci DNK origamija. Doslej je bilo karakteriziranih namreč mnogo več paralelnih dimer ovitih vijačnic, ob tem pa se že na primeru tetraedra izkaže, da ga ni moč konstuirati brez uporabe obeh (paralelne in antiparalelne) oblik dimer ovitih vijačnic. Rezultati, predstavljeni v tem poglavju, so tako uporabni kot odgovor na naslednje vprašanje. Za dani nabor parov peptidov, za katere vemo, kakšne dimere bodo posamezni pari tvorili (paralelne ali aniparalelne), nas zanima, kakšne strukture in s pomočjo strogega obhoda kakšne oblike lahko konstruiramo (tudi, ko vemo, kateri peptidi bodo tvorili, kakšne dimere, je le-te še vedno potrebno razporediti na povezave grafa, ki predstavlja želeno strukturo). V ta namen postavimo naslednjo definicijo.

Definicija 6.1 *Naj bo G povezan graf in $E \subseteq E(G)$. Dvojni obhod W v G, katerega vse povezave iz E so antiparalelne in vse povezave iz $E(G) \setminus E$ so paralelne, imenujemo* E-predpisani dvojni obhod.

Analogno za povezan graf G in $E \subseteq E(G)$ definiramo *E-predpisani strogi obhod* kot strogi obhod W v G, katerega vse povezave iz E so antiparalelne in vse povezave iz $E(G) \setminus E$ so paralelne ter *E-predpisani d-stabilni obhod* kot d-stabilni obhod W v G, katerega vse povezave iz E so antiparalelne in vse povezave iz $E(G) \setminus E$ so paralelne.

6.1 E-predpisani dvojni obhodi

Karakterizacijo E-predpisanih dvojnih obhodov je leta 1975 v [94] predstavil Vestergaard ter tako odgovoril na vprašanje, ki ga je pet let pred tem v [95] zastavil Wagner.

Izrek 6.2 ([94, Theorem 2], [36, Theorem VIII.13]) *Naj bo G povezan graf in $E \subseteq E(G)$. G vsebuje E-predpisani dvojni obhod natanko tedaj, ko je $G - E$ sodi graf.*

Kasneje je drugačen dokaz izreka 6.2 v [36] predstavil še Fleischner. Ena izmed že znanih posplošitev izreka 6.2 so tudi predpisani krovni obhodi. Preveriti, ali takšen obhod v grafu obstaja, je NP-poln problem, a je za nekatere posebne primere rešljiv v polinomskem času (kar sta v [16] pokazala Broersma in Göbel).

6.2 E-predpisani strogi obhodi

V tem razdelku predstavimo posplošitev izreka 6.2, ki je bila prvič predstavljena v [4].

Izrek 6.3 *Naj bo G povezan graf, $E \subseteq E(G)$ in $E' = E(G) \setminus E$. Graf G vsebuje E-predpisani strogi obhod natanko tedaj, ko sta izpolnjena oba naslednja pogoja:*

- *je podgraf $G_{E'}$, induciran z E', sodi graf,*
- *v grafu G/E' obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G/E' - E(T)$ soda ali vsebuje E'-vozlišče.*

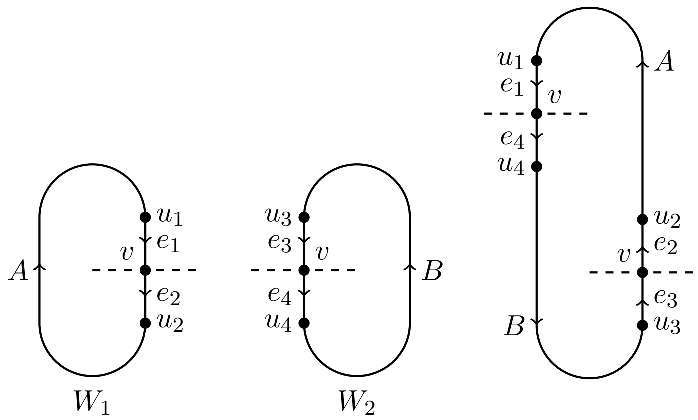
Preden dokažemo izrek 6.3, predstavimo še dve lemi, ki posplošita in povzameta nekatere ugotovitve iz dokazov izreka 2.1 in izreka 5.3.

Lema 6.4 *Naj bo G graf ter W_1 in W_2 dva različna obhoda v njem, ki oba vsebujeta vozlišče v. Potem ju je moč združiti v en obhod W grafa G, ki prečka vse povezave iz W_1 in W_2.*

Dokaz. Označimo vozlišči, ki sta tik pred in tik za v v W_1, z u_1 in u_2, ter vozlišči, ki sta tik pred in tik za v v W_2, z u_3 in u_4. Naj bodo povezave, ki povezujejo u_1, u_2, u_3 in u_4 z v, označene z e_1, e_2, e_3 in e_4. Začnimo hoditi vzdolž W_1. Ko pridemo iz u_1 po e_1 v v, namesto po e_2, nadaljujemo po e_4 proti u_4 in naprej vzdolž W_2. Ko se potem, ko prehodimo celoten W_2, po e_3 vrnemo v v, nadaljujemo po e_2 proti u_2 in naprej po preostanku W_1. Tako smo obhoda W_1 in W_2 uspeli združiti v nov obhod. Konstrukcija novega obhoda je razvidna tudi na sliki 6.1.

□

Lema 6.5 *Naj bo G graf, W dvojni obhod v njem in v takšno vozlišče v G, da ima W v njem vsaj dve netrivialni ponovitvi R_1 in R_2. Naj W uporabi povezavo $e = uv \in R_1$ dvakrat v isto smer. Potem obstaja alternativni dvojni obhod W', ki ohrani orientacijo povezav iz W in ima strogo manj netrivialnih ponovitev v v (in tudi v splošnem).*



(a) W_1 in W_2 (b) W

Slika 6.1: Konstrukcija obhoda iz dveh obhodov s skupnim vozliščem

Dokaz. Izberimo povezavo $e = uv \in R_1$, ki jo R_1 dvakrat uporabi v smeri proti v. Naj bosta $e_2 = vu_2$ in $e_3 = vu_3$ povezavi, ki v R_1 sledita obema nastopoma povezave e v W (pri tem je mogoče, da je e_2 enak e_3). Nadalje naj bosta $e_4 = u_4v$ in $e_5 = vu_5$ povezavi iz R_2 sosednji v tako, da je $u_4e_4ve_5u_5$ podzaporedje v W.

Brez škode za splošnost (sicer bi lahko izbrali drugo začetno vozlišče za W) lahko predpostavimo

$$W = \ldots ueve_2u_2Aueve_3u_3Bu_4e_4ve_5u_5C\ldots,$$

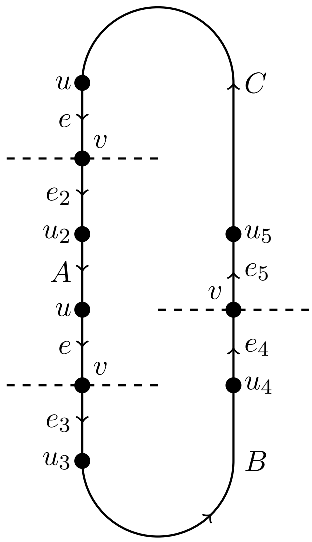
pri tem so A, B in C tri podzaporedja v W med tremi zgoraj omenjenimi ponovitvami v v W (teh je seveda lahko več). Oglejmo si naslednji obhod, ki ga dobimo iz W z zamenjavo podzaporedij A in B v W:

$$W' = \ldots ueve_3u_3Bu_4e_4ve_2u_2Aueve_5u_5C\ldots$$

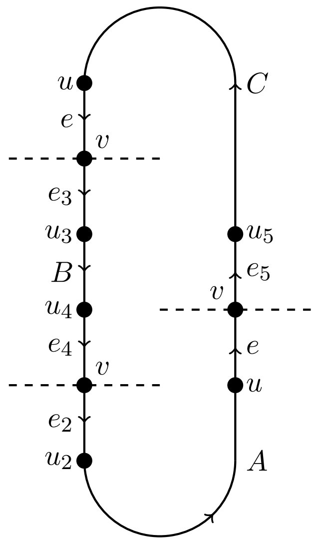
W in W' sta prikazana tudi na sliki 6.2.

Ker W' prečka isto množico povezav v isti smeri kot W, je W' dejansko dvojni obhod, ki obdrži usmeritev povezav iz W. Ker za poljubno vozlišče $x \neq v$ W' prečka par njemu sosednjih povezav e in e' zaporedoma natanko tedaj, ko jih zaporedoma prečka tudi W, je nova množica ponovitev (trivialnih in netrivialnih) dvojnega obhoda W' v x enaka originalni množici ponovitev dvojnega obhoda W v x.

Edine možne nove ponovitve dvojnega obhoda W' v v, ki niso bile vsebovane že v množici ponovitev dvojnega obhoda W v v, so sestavljene iz povezav iz $R_1 \cup R_2$, saj so to edine povezave, pri katerih spreminjamo njihove predhodnike in naslednike v W'. Pri tem sta bila para $e - e_2$ in $e_4 - e_5$ zamenjana z $e_2 - e_4$ in $e - e_5$, kar nadalje pomeni, da sta se ponovitvi R_1 in R_2 v W' združili v novo ponovitev, ki vsebuje vse povezave



(a) W



(b) W'

Slika 6.2: Nižanje števila netrivialnih ponovitev v dvojnem obhodu

iz $R_1 \cup R_2$. Skupno število netrivialnih ponovitev se je torej zmanjšalo za najmanj eno (lahko celo za dve, če je $R_1 \cup R_2$ trivialna ponovitev).

Analogno lahko dokažemo lemo 6.5 tudi, kadar W uporabi e dvakrat v smeri proč od v. $\square$

Ker ni težko najti primera, v katerem dvojni obhod W' iz leme 6.5 ne obstaja, kadar W povezave e ne prečka dvakrat v isto smer, ali če se v pojavi le dvakrat, so pogoji iz leme 6.5 ne le zadostni, temveč tudi potrebni.

V nadaljevanju razdelka dokažemo izrek 6.3.

Dokaz. Naj bo G povezan graf, $E \subseteq E(G)$, $E' = E(G) \setminus E$, W E-predpisani strogi obhod grafa G in v poljubno vozlišče v G, ki je sosednje povezavi iz E'. Ker W prečka povezave iz E' dvakrat v isti smeri, sledi, da je vsaka povezava iz E' sosednja z v, obakrat uporabljena za prihod W v v ali pa obakrat uporabljena za odhod W iz v. Analogno iz dejstva, da W vsako povezavo iz E uporabi po enkrat v vsako smer, sledi, da je vsaka povezava iz E sosednja v uporabljena enkrat za prihod W v v in enkrat za izhod W iz v. Od tod sledi, da bi bilo dejstvo, da je v sosednja lihemu številu povezav iz E' protislovno, saj se v tem primeru vhodna in izhodna stopnja v v W ne bi ujemali.

Nadalje uporabimo W, da konstruiramo dvojni obhod W_E v G/E' po naslednjem postopku. Začnimo v poljubnem vozlišču v $V(G/E') \cap V(G)$ in sledimo W. Naj bo $e = xy$ povezava v W, ki jo v nekem trenutku prečkamo. Če je $xy \in E$, dodamo xy tudi v W_E, pri tem pa pazimo, da se vrstni red in usmeritev povezav iz W ohrani. Če je x E'-vozlišče, je bilo le-to med konstrukcijo grafa G/E' zamenjano z nekim novim vozliščem

z. Zato v tem primeru namesto povezave xy iz W v W_E dodamo zy. Analogno za E'-vozlišče y v W_E dodamo xz. Povezave iz E' v W_E preprosto izpustimo. Trdimo, da je W_E antiparalelni dvojni obhod grafa G/E'. Opazimo, da vsaki povezavi e' v G/E' ustreza natanko ena povezava e v G. Ker W prečka e po enkrat v vsaki smeri, tudi W_E prečka e' po enkrat v vsaki smeri. Od tod sledi, da je W_E antiparalelni dvojni obhod.

Ker je, kot smo omenili v uvodu, G/E' lahko tudi multigraf, si oglejmo graf G', ki ga dobimo tako, da morebitne zanke v G/E' zamenjamo z disjunktnimi potmi dolžine 3, morebitne paralelne povezave pa z disjunktnimi potmi dolžine 2. S pomočjo antiparalelnega obhoda W_E v novem grafu G' konstruiramo antiparalelni dvojni obhod W'. Podobno kot zgoraj se za začetek postavimo v poljubno vozlišče $V(G') \cap V(G/E')$, sledimo W_E in pri tem v W' dodamo vsako povezavo iz $E(G/E') \cap E(G')$, ob tem pa pazimo, da ne spremenimo vrstnega reda ali usmeritve povezav. Prečkanja zank in paralelnih povezav nadomestimo s prečkanji poti, ki so jih v novem grafu nadomestile. Ker vsako povezavo še vedno prečkamo dvakrat in se usmeritve povezav niso spremenile, je tudi W' antiparalelni dvojni obhod. Še več, trdimo, da netrivialne ponovitve v W' nastopijo samo v E'-vozliščih. Pri tem obravnavamo tri različne primere. Naj bo najprej v vozlišče stopnje 2, ki smo ga v G' dodali kot del poti, ki je nadomestila paralelno povezavo. Naj bosta u in w njegova soseda (ki se kot krajišči paralelne povezave pojavita tudi v G/E'). Ker smo uw (in wu) iz W_E v W' nadomestili z uvw in wvu, W' v v nima netrivialnih ponovitev. Analogno velja tudi, kadar je v vozlišče, ki smo ga v G' dodali kot del poti, ki je nadomestila zanko. V drugem primeru v predstavlja vozlišče, ki v svoji okolici nima nobenega E'-vozlišča in tudi samo ni E'-vozlišče. Vsako alternirajoče zaporedje $uevfw$, pri čemer sta u in w soseda vozlišča v v G' ter e in f povezavi, ki ju povezujeta z v, se pojavi v W' natanko tedaj, ko se pojavi tudi v W_E (in še več, tudi v W). Zato bi bila netrivialna ponovitev W' v v protislovna z dejstvom, da je W E-predpisani strogi obhod grafa G. Naj bo v zadnjem primeru v vozlišče, ki samo ni E'-vozlišče, je pa takšen vsaj eden izmed njegovih sosedov, označimo ga z u. Ob tem lahko predpostavimo tudi, da uv ne predstavlja zanke ali paralelne povezave v G/E', saj smo za takšen v poskrbeli že v prvem primeru. Posledično to pomeni, da je u med konstrukcijo grafov G/E' in G' zamenjal neko množico vozlišč $U \subseteq V(G)$, v kateri je le eno vozlišče sosednje v (sicer bi bila povezava uv v G/E' paralelna povezava). Označimo omenjeno vozlišče z u_G. Sledi, da če ima W v v netrivialno N-ponovitev, za katero je $u \in N \subseteq N_{G'}(v)$, ima W v v netrivialno N-ponovitev, za katero je $u_G \in N \subseteq N_G(v)$, protislovje. S tem smo dokazali, da je W' antiparalelni dvojni obhod grafa G', v katerem netrivialne ponovitve nastopajo samo v E'-vozliščih.

Lema 4.8 nam zagotavlja, da v G' s takšnim antiparalelnim dvojnim obhodom obstaja vpeto drevo T' z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G' - E(T')$ soda ali pa vsebuje E'-vozlišče. Nadalje po lemi 4.7 sledi, da takšno vpeto drevo obstaja tudi v G/E'.

Za dokaz preostale implikacije izreka 6.3 naj bo G povezan graf, $E \subseteq E(G)$ in $E' = E(G) \setminus E$. Naj bo podgraf G'_E, induciran s povezavami iz E', sodi podgraf in naj v

G/E' obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G/E' - E(T)$ soda ali pa vsebuje E'-vozlišče.

Povezane komponente podgrafa G'_E, induciranega s povezavami iz E', označimo z $E'_1, \ldots, E'_k$ $(k \geq 1)$. Ker je $G_{E'}$ sodi podgraf, je tudi vsaka njegova povezana komponenta E'_i sodi podgraf in po izreku 5.3 posledično vsebuje paralelni strogi obhod W'_i. Hkrati pa lema 4.8 implicira, da graf G/E' vsebuje antiparalelni dvojni obhod W', v katerem se netrivialne ponovitve pojavijo samo v E'-vozliščih. Preden nadaljujemo z dokazom, omenimo še dva posebna primera. Kadar je $k = 0$, sledi, da je $E = E(G)$ in je G/E' izomorfen grafu G. V tem primeru iz izreka 5.10 sledi, da ima G antiparalelni strogi obhod, ki pa je za dani $E = E(G)$ hkrati tudi E-predpisani strogi obhod. Podobno, kadar je $E = \emptyset$, sledi, da je $k = 1$ in ima G po izreku 5.3 paralelni strogi obhod, ki je za dani $E = \emptyset$ hkrati tudi E-predpisani strogi obhod.

Najprej s pomočjo W' konstruiramo množico sprehodov $\mathcal{W}_\mathcal{E}$ v G, ki bodo skupaj vsako povezavo iz E vsebovali natanko dvakrat (po enkrat v vsako smer). Sprehode v $\mathcal{W}_\mathcal{E}$ bomo označili z $W_{E,i}$, pri čemer bo i naravno število med 1 in skupnim številom sprehodov, vsebovanih v $\mathcal{W}_\mathcal{E}$. Ob tem z V' označimo vozlišča $v_1, \ldots, v_k$, ki v G/E' nastanejo iz povezanih komponent podgrafa G'_E. Naj bo najprej $i = 1$ in $v_j \in V'$, za nek j, poljubno izmed zgoraj omenjenih vozlišč. Začnemo v v_j in sledimo W', dokler ga v celoti ne prehodimo, ter ob tem ponavljamo sledeči postopek. Naj bo $e = xy$ povezava, na kateri se trenutno nahajamo. Dodamo e v $W_{E,i}$ tako, da pri tem ne spremenimo vrstnega reda ali usmeritve povezav iz W'. Če je $x \in V'$ (kot se zgodi že pri prvi dodani povezavi), povezavo e v $W_{E,i}$ zamenjamo z zy, pri čemer je z vozlišče iz G, ki ga je x zamenjal v G/E'. Analogno storimo tudi, kadar je $y \in V'$, le da v tem primeru ob koncu za 1 povečamo še vrednost i. Naravna particija povezav iz $\mathcal{W}_\mathcal{E}$ v dve podmnožici je sledeča. $\mathcal{W}_\mathcal{C}$ sestoji iz vseh obhodov (sklenjenih sprehodov) iz $\mathcal{W}_\mathcal{E}$, $\mathcal{W}'_\mathcal{C}$ pa iz preostanka. Ob tem imajo lahko sprehodi iz druge množice krajišči v isti povezani komponenti E'_i ali pa v dveh različnih E'_i in E'_j, pri čemer $i \neq j$.

V nadaljevanju uporabimo omenjeni podmnožici $\mathcal{W}_\mathcal{C}$ in $\mathcal{W}'_\mathcal{C}$, da ločimo dva primera, kako sprehode iz $\mathcal{W}_\mathcal{E}$ skupaj s paralelnimi strogimi obhodi W'_i v E'_i, $1 \leq i \leq k$, združiti v obhode v novi množici $\mathcal{W}'$. V prvem primeru naj bo $W_C \in \mathcal{W}_\mathcal{C}$ in W'_i eden izmed paralelnih strogih obhodov s skupnim vozliščem iz W_C (vsaj en takšen paralelni strogi obhod W'_i zagotovo obstaja). Naj bo v eno izmed skupnih vozlišč W_C in W'_i. Postavimo se v v in nadaljujemo po W_C. Ko prehodimo celoten W_C in se vrnemo v v, nadaljujemo po W'_i, dokler ga v celoti ne obhodimo in se ponovno vrnemo v v. Tako smo uspeli združiti W_C in W'_i v en obhod, ki ga dodamo v $\mathcal{W}'$. Omenimo, da lahko isti W'_i uporabimo za več različnih W_C. Naj bo v drugem primeru W_{C1} poljuben sprehod iz $\mathcal{W}'_\mathcal{C}$ in W'_i paralelni strog obhod, ki vsebuje zadnje vozlišče (krajišče) v sprehoda W_{C1}. Naj bo W_{C2} sprehod iz $\mathcal{W}'_\mathcal{C}$, ki se začne v v. Takšen sprehod zagotovo obstaja, ker se v nasprotnem primeru skupna vhodna stopnja sprehodov iz $\mathcal{W}_\mathcal{E}$ in paralelnih strogih obhodov $W'_1, \ldots W'_k$ v v ne bi ujemala s skupno izhodno stopnjo. V v združimo sprehoda W_{C1} in W_{C2} v enoten sprehod. Z upoštevanjem enakega argumenta, iz sprehodov v $\mathcal{W}'_\mathcal{C}$, v končno korakih, dobimo sklenjen sprehod (obhod), ki ga lahko, enako kot v prvem primeru, združimo z W'_i in dodamo v $\mathcal{W}'$. Če pri tem nismo uporabili vseh sprehodov iz $\mathcal{W}'_{\mathcal{C}}$, izberemo prvega neuporabljenega in postopek ponovimo.

Tako smo dobili množico obhodov $\mathcal{W}'$ v G, ki skupaj prečkajo vsako povezavo $E(G)$ natanko dvakrat—od tega povezave iz E po enkrat v vsako smer, povezave iz E' pa po dvakrat v isto smer. Ob tem vsak obhod iz $\mathcal{W}'$ vsebuje vsaj eno povezavo iz E'. Če $\mathcal{W}'$ vsebuje več kot en obhod, potem obstaja vozlišče v, ki ga vsebujeta vsaj dva obhoda—W_1 in W_2. Po lemi 6.4 potem sledi, da je možno W_1 in W_2 združiti v nov obhod in tako dobiti novo množico obhodov $\mathcal{W}$, ki še vedno prečka vsako povezavo iz E po enkrat v vsako smer in vsako povezavo iz E' po dvakrat v isto smer ter za njo velja $|\mathcal{W}| < |\mathcal{W}'|$. Po indukciji na število obhodov v $\mathcal{W}'$ sledi, da G vsebuje dvojni obhod W, ki prečka vsako povezavo iz E po enkrat v vsako smer ter vsako povezavo iz E' po dvakrat v isto smer. Če v W obstaja vozlišče z netrivialno ponovitvijo, ki ni hkrati sosednje po vsaj eni povezavi iz E in E', bi to pomenilo, da ima v istem vozlišču (ki ni E'-vozlišče) netrivialno ponovitev že eden izmed paralelnih strogih obhodov W'_i ali pa antiparalelni dvojni obhod W', kar pa je protislovje.

Označimo množico vozlišč, kjer ima W netrivialne ponovitve, z V. V je podmnožica E'-vozlišč. Naj r predstavlja število vozlišč v V. Če je $r = 0$, potem je W strogi obhod in je izrek 6.3 dokazan. Naj bo zato $r \geq 1$ in $v \in V$. Lema 6.5 zagotavlja, da v grafu G obstaja dvojni obhod s strogo manj netrivialnimi ponovitvami v v, ki ohrani ostala vozlišča in povezave iz W nespremenjene. Z dvema indukcijama, prvo na število netrivialnih ponovitev dvojnega obhoda W v v in drugo na r dokažemo, da G vsebuje E-predpisani strogi obhod. $\square$

Omenimo, da so pred kratkim Wang in sod. v [96, 97] predstavili podobno karakterizacijo grafov, ki vsebujejo E predpisane stroge obhode ob dodatnih predpostavkah. V [96] je bila ta predpostavka, da povezave iz E tvorijo graf, ki je unija ciklov, v [97] pa, da tvorijo gozd.

Izrek 6.6 ([96]) *Naj bo G povezan graf in $E \subseteq E(G)$ 2-regularni (ne nujno povezan) podgraf. Potem G vsebuje E-predpisani strogi obhod natanko tedaj, ko je podgraf $G_{E'}$ induciran z $E' = E(G) \setminus E$ sodi graf.*

Izrek 6.7 ([97]) *Naj bo G povezan graf in $E \subseteq E(G)$ gozd. Potem G vsebuje E-predpisani strogi obhod natanko tedaj, ko je podgraf $G_{E'}$ induciran z $E' = E(G) \setminus E$ sodi graf.*

6.3 E-predpisani d-stabilni obhodi

Ker je vsak strogi obhod v grafu G brez vozlišč stopnje $\leq d$ tudi d-stabilni obhod, naslednji izrek sledi iz izreka 6.3.

Izrek 6.8 *Naj bo G povezan graf, d naravno število, $E \subseteq E(G)$ in $E' = E(G) \setminus E$. Graf G vsebuje E-predpisani d-stabilni obhod natanko tedaj, ko sta izpolnjena oba naslednja pogoja:*

- *je podgraf $G_{E'}$, induciran z E', sodi graf,*
- *v grafu G/E' obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G/E' - E(T)$ soda, vsebuje vozlišče v z $d_{G/E'}(v) \geq 2d+2$ ali pa vsebuje E'-vozlišče.*

6.4 Usmerjeni E-predpisani dvojni obhodi

Oglejmo si še primer, ko so povezave iz $E(G) \setminus E$ usmerjene. Predvsem E-predpisani 1-stabilni obhodi bi lahko bili zanimivi za uporabo pri pluženju cest, opisanem v uvodu—v mestih obstajajo tudi enosmerne ceste, ki imajo natančno določeno smer, v katero je dovoljeno voziti.

Karakterizacija grafov z E-predpisanimi strogimi obhodi sledi iz naslednjega izreka, ki sta ga prva dokazala Ford in Fullkerson v [37], kasneje pa neodvisno še Batagelj in Pisanski v [9] ter Fleischner v [34].

Izrek 6.9 ([37, Theorem 7.1]) *Naj bo G šibko povezan mešani graf. Potem so naslednje trditve ekvivalentne:*

(i) za vsak $U \subseteq V(G)$ je $f_G(U) = e(U) - |a^+(U) - a^-(U)|$ sodo naravno število (pri čemer $e(U)$, $a^+(U)$ in $a^-(U)$ preštejejo povezave sosednje z U, loke z začetkom v U in loke s koncem v U);

(ii) G ima Eulerjev obhod W;

(iii) G ima ciklično dekompozicijo S.

Grafe, ki vsebujejo usmerjene E-predpisane stroge obhode, potem karakteriziramo kot:

Izrek 6.10 *Naj bo G šibko povezan mešani graf, $E \subseteq E(G)$ in $E' = E(G) \setminus E$. Graf G vsebuje E-predpisani strogi obhod, v katerem so vsi loki $A = A(G)$ prečkani v predpisano smer, natanko tedaj, ko so izpolnjeni vsi naslednji pogoji:*

- *za vsako vozlišče v podgrafa $G_{E' \cup A} \subseteq G$, induciranega z $E' \cup A$, velja $e(v) = |a^+(v) - a^-(v)|$;*
- *za vsako povezano komponento C v $G_{E' \cup A}$ in za vsak $U \subseteq V(C)$ je $f_C(U)$ sodo naravno število;*

- *v grafu $G/(E' \cup A)$ obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G/(E' \cup A) - E(T)$ soda ali vsebuje $(E' \cup A)$-vozlišče.*

Pri tem prva točka v izreku 6.10 predstavlja analogijo sodega podgrafa v mešanem grafu.

Dokaz. Iz izreka 6.9 sledi, da ima vsaka povezana komponenta C podgrafa $G_{E' \cup A}$, induciranega z $E' \cup A$, Eulerjev obhod W', ki vsako povezavo iz A prečka v želeni smeri. Zato lahko za vsako povezano komponento C v $G_{E' \cup A}$ konstruiramo paralelni dvojni obhod W tako, da dvakrat zapored prečkamo W'. Ker nobena izmed operacij in noben izmed postopkov, opisanih v dokazu izreka 6.3, ne spremeni usmeritve povezav, dokaz nadaljujemo tako, da enostavno izvedemo vse korake, opisane v dokazu izreka 6.3. □

Analogno sledi tudi karakterizacija usmerjenih E-predpisanih d-stabilnih obhodov.

Izrek 6.11 *Naj bo G povezan graf, d naravno število, $E \subseteq E(G)$ in $E' = E(G) \setminus E$. Graf G vsebuje E-predpisani d-stabilni obhod, v katerem so vsi loki $A = A(G)$, prečkani v predpisano smer, natanko tedaj, ko so izpolnjeni vsi naslednji pogoji:*

- *za vsako vozlišče v podgrafa $G_{E' \cup A} \subseteq G$, induciranega z $E' \cup A$, velja $e(v) = |a^+(v) - a^-(v)|$;*
- *za vsako povezano komponento C v $G_{E' \cup A}$ in za vsak $U \subseteq V(C)$ je $f_C(U)$ sodo naravno število;*
- *v grafu $G/(E' \cup A)$ obstaja vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G/(E' \cup A) - E(T)$ soda, vsebuje vozlišče v z $d_{G/(E' \cup A)}(v) \geq 2d+2$ ali pa vsebuje $(E' \cup A)$-vozlišče.*

Dokaz. Zopet upoštevamo dejstvo, da je v grafu G, z $\delta(G) > d$, vsak strogi obhod tudi d-stabilni obhod in dokazujemo analogno kot je dokazan izrek 6.10. □

Poglavje 7

Štetje neekvivalentnih dvojnih obhodov v grafih

Brez težav iz dvojnega obhoda tvorimo nov dvojni obhod. Na primer, zamenjamo smer obhoda ali pa začetno vozlišče. V ta namen za dvojna obhoda W in W' grafa G pravimo, da sta *ekvivalentna*, kadar je možno W' iz W dobiti z: (i) obratom W, (ii) zamikom W (v W izberemo drugo začetno vozlišče), (iii) delovanjem permutacije, inducirane z avtomorfizmom grafa G na W, ali (iv) kombinacijo prej naštetih treh možnosti. Za dvojna obhoda, ki nista ekvivalentna, pravimo, da sta *neekvivalentna*. Ob tem omenimo še, da za dvojna obhoda W in W' pravimo, da sta *različna*, kadar sta različni njuni alternirajoči zaporedji, predstavljeni v enačbi 1.1. Posledično sta seveda različni tudi njuni vozliščni zaporedji, ki ju dobimo, če iz alternirajočih zaporedij izpustimo povezave. Dva različna dvojna obhoda sta lahko ekvivalentna.

V tem poglavju predstavimo dva algoritma za štetje in enumeracijo (algoritma namreč tudi vrneta vse neekvivalentne dvojne obhode in ne le njihovega skupnega števila) neekvivalentnih dvojnih obhodov v grafih. Prvi algoritem temelji na algebraičnih lastnostih dvojnih obhodov ter pri tem čimprej izloči dvojne obhode, ki bi vodili k ponavljanju (tehnika, ki sta jo prva predstavila Faradžev v [32] in Read v [75]). Posledično to pomeni, da algoritem uporablja metodo razveji in omeji. Drugi algoritem izhaja iz povezave med strogimi obhodi in vložitvami grafov z enim licem v ploskve in je zaradi tega omejen na iskanje strogih obhodov (medtem ko prvi deluje tudi za dvojne in d-stabilne obhode). Pri tem uporablja tehniko dinamičnega programiranja. Specializacija drugega algoritma na štetje strogih obhodov (in ne zmožnost preštevanja ostalih vrst dvojnih obhodov) se odraža v njegovi časovni zahtevnosti—drugi algoritem deluje hitreje kot prvi.

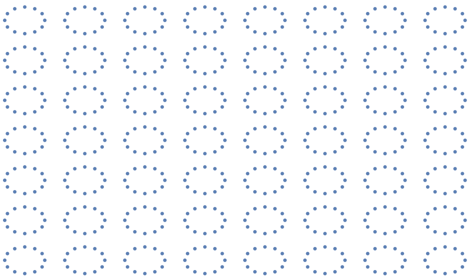
Iskanje neekvivalentnih dvojnih obhodov je zanimivo tudi s praktičnega vidika. Omogoča pregled nad različnimi načini, kako je moč sestaviti neko samosestavljivo nanostrukturo in vnaprej primerjati (vsaj nekatere) lastnosti v strukturah, ki so navzven iste oblike, a jih modeliramo z različnimi dvojnimi obhodi.

7.1 Grupa avtomorfizmov dvojnega obhoda

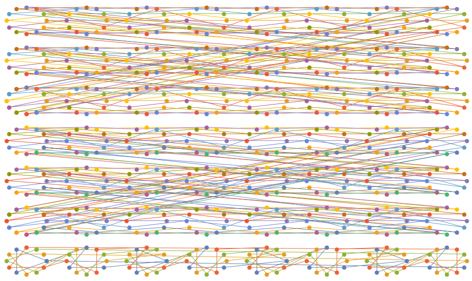
Preden se lotimo samih algoritmov, si oglejmo še, kako izgleda grupa avtomorfizmov dvojnega obhoda. Ob tem najprej ponovimo še nekaj s tem povezanih pojmov. Preslikavo $\rho\colon \Gamma \times X \to X$ imenujemo *delovanje* grupe Γ na množici X, če zadošča pogojema: (i) $\rho(gh, x) = \rho(g, \rho(h, x))$ za vse $g, h \in \Gamma$ ter $x \in X$ in (ii) $\rho(1, x) = x$ za vse $x \in X$ (kjer 1 označuje nevtralni element grupe Γ). Če je x nek izbrani element iz X, potem množico njegovih slik $g \cdot x$ glede na elemente iz grupe Γ imenujemo *orbita točke* x in jo označimo z Γx ali x^Γ, torej $\Gamma x = \{g \cdot x \mid g \in \Gamma\}$. Orbite delovanja določajo particijo množice X in so v bistvu ekvivalenčni razredi, ki jih dobimo z zahtevo, da sta elementa $x, y \in X$ v relaciji, kadar obstaja $g \in \Gamma$ z lastnostjo $g \cdot x = y$. Za vsak $x \in X$ definiramo podgrupo, imenovano *stabilizator* od x, Γ_x, kot vse elemente iz Γ, ki x preslikajo nazaj v x—$\Gamma_x = \{g \in \Gamma \mid g \cdot x = x\}$. Več o delovanjih grup na grafih in avtomorfizmih grafov sta v [43] predstavila Godsil in Royle.

Naj bo G povezan graf z n vozlišči in m povezavami. Z $\mathcal{W}$ označimo množico vseh različnih dvojnih obhodov grafa. Z A označimo grupo avtomorfizmov grafa G, $\mathrm{Aut}(G)$, ki je permutacijska grupa, saj velja $\mathrm{Aut}(G) \subseteq \mathrm{Sym}(V(G))$. Avtomorfizem $\pi \in A$ potem deluje na $\mathcal{W}$ tako, da slika dvojni obhod $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ v $\pi(W) = \pi(w_0), \ldots, \pi(w_{2m})$. Naj bo $\rho : \mathcal{W} \to \mathcal{W}$ *obrat*, ki slika $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ v $W' = w_{2m}, w_{2m-1}, \ldots, w_0$, in naj bo za vsak $i = 0, \ldots, 2m$ preslikava σ_i *i-zamik*, ki slika $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ v $W'' = w_i, \ldots, w_{2m+i}$ (modulo $2m$). Takoj opazimo, da velja $\sigma_0 = \sigma_{2m} = \mathrm{id}$, kjer je id *identiteta* ali identična preslikava. Potem grupa A, grupa $R = \{\mathrm{id}, \rho\}$ in grupa $S = \{\sigma_i \mid i = 0, \ldots, 2m-1\}$ vse delujejo na $\mathcal{W}$ (in njenih podmnožicah, kot so strogi obhodi, d-stabilni obhodi ipd.). Že na primeru cikla C_3 s tremi vozlišči (v_1, v_2 in v_3) lahko opazimo, da elementi grupe R in S med seboj ne komutirajo. Naj bo $W = v_1, v_2, v_3, v_1, v_2, v_3$ edini strogi obhod v C_3. Preslikava $\rho \cdot \sigma_1$ ga namreč preslika v $(\rho \cdot \sigma_1)(W) = v_2, v_1, v_3, v_2, v_1, v_3$, preslikava $\sigma_1 \cdot \rho$ pa v $(\sigma_1 \cdot \rho)(W) = v_3, v_2, v_1, v_3, v_2, v_1$ (gre za različna stroga obhoda, ki pa sta, glede na zgoraj definirano relacijo, ekvivalentna). Grupa $\langle R, S\rangle$ je namreč diedrska grupa vseh simetrij (rotacij in simetrij) pravilnega $(2m)$-kotnika. Orbite delovanja direktnega produkta $\Gamma = A \times \langle R, S\rangle$ na $\mathcal{W}$ predstavljajo ekvivalenčne razrede dvojnih obhodov glede na našo definicijo ekvivalenčnosti dvojnih obhodov. Pri tem se zanašamo na to, da je ekvivalentnost dvojnih obhodov *ekvivalenčna relacija*. Izpolnjuje namreč vse tri za to potrebne kriterije. Če s $\sim$ označimo ekvivalentnost dvojnih obhodov, za dvojne obhode W, W' in W'' veljajo *refleksivnost* (W je v ekvivalenten samemu sebi $W \sim W$), *simetričnost* (iz $W \sim W'$ sledi $W' \sim W$) ter *tranzitivnost* (iz $W \sim W'$ in $W' \sim W''$ sledi $W \sim W''$). Ob tem direktni produkt $\Gamma = A \times \langle R, S\rangle$ predstavlja tudi grupo avtomorfizmov za nek (vsak) dvojni obhod W grafa G.

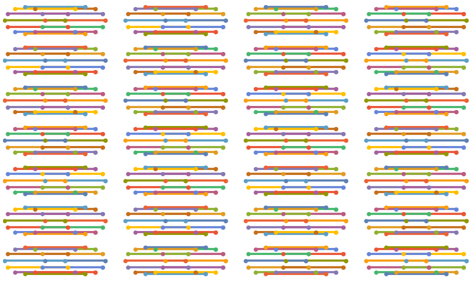
Na sliki 7.1 je grafično prikazano delovanje grupe Γ na $\mathcal{W}$ v primeru tetraedra. Strogi obhodi predstavljajo vozlišča usmerjenega grafa $D(\mathcal{W}, \Gamma)$. Ob tem med vozliščema U in W, v digrafu $D(\mathcal{W}, \Gamma)$, obstaja usmerjena povezava natanko tedaj, ko v Γ obstaja element, ki slika U v W. Stroge povezane komponente digrafa $D(\mathcal{W}, \Gamma)$ predstavljajo natanko orbite delovanja Γ. Vozlišča grafov na sliki 7.1 tako predstavljajo 672 različnih strogih obhodov tetraedra (pridobljenih z metodo sestopanja). Pri tem Γ razdeli $\mathcal{W}$ v 3 orbite velikosti 288, 288 in 96, medtem ko grupa A razdeli $\mathcal{W}$ v 28 orbit velikosti 24, grupa R razdeli $\mathcal{W}$ v 336 orbit velikosti 2, grupa S pa razdeli $\mathcal{W}$ v 56 orbit velikosti 12.



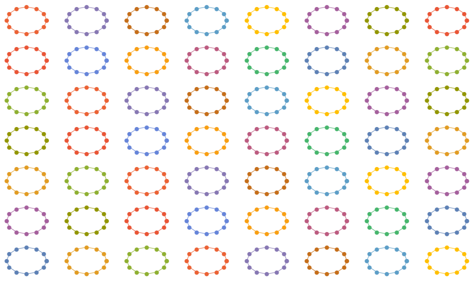
(a) $\mathcal{W}$



(b) Delovanje A na $\mathcal{W}$



(c) Delovanje R na $\mathcal{W}$



(d) Delovanje S na $\mathcal{W}$

Slika 7.1: Grafični prikaz delovanja grup A, R in S na množici $\mathcal{W}$ vseh 672 strogih obhodov tetraedra. Vozlišča (vseh 672) grafa predstavljajo stroge obhode, pri čemer sta dve vozlišči povezani natanko tedaj, ko med strogima obhodoma, ki ju predstavljata, obstaja element iz A, R ali S (odvisno od slike), ki enega preslika v drugega. Zaradi lažje predstave je na slikah (b) in (d) izpuščenih nekaj povezav. Tako bi morali 28 kopij C_{24} na sliki (b) nadomestiti z 28 kopijami K_{24}, 56 kopij C_{12} na sliki (d) pa s 56 kopijami K_{12}.

Zgoraj definirani digraf $D(\mathcal{W}, \Gamma)$ je precej gost. Zato definiramo še en usmerjen graf in pri tem namesto grupe Γ uporabimo le njene generatorje (definirani v nadaljevanju). Grupa S je generirana z elementom σ_1, grupa R pa z elementom ρ. Nadalje v primeru tetraedra velja $A \cong S_4$. Znano dejstvo je, da je moč minimalne množice generatorjev vsake končne simetrične grupe največ 2. Če vozlišča tetraedra označimo s števili 1, 2, 3 in 4, velja $A = \langle \alpha_1, \alpha_2 \rangle$, pri čemer je $\alpha_1 = (1\,2)$ in $\alpha_2 = (1\,2\,3\,4)$. Od tod sledi, $\Gamma = \langle \alpha_1, \alpha_2, \sigma_1, \rho \rangle$. Ni težko preveriti, da $W = 1, 3, 4, 2, 3, 1, 2, 4, 1, 2, 3, 4, 1$ predstavlja strogi obhod tetraedra. Na sliki 7.2 je prikazana okolica strogega obhoda W v tako definiranem digrafu $D(\mathcal{W}, (\alpha_1, \alpha_2, \sigma_1, \rho))$.

$$\begin{tikzcd}
2,3,4,1,3,2,1,4,2,1,3,4,2 & & 2,4,1,3,4,2,3,1,2,3,4,1,2 \\
& 1,3,4,2,3,1,2,4,1,2,3,4,1 \arrow[ul, "\alpha_1"] \arrow[ur, "\alpha_2"'] \arrow[dl, "\rho"'] \arrow[dr, "\sigma_1"] & \\
1,4,3,2,1,4,2,1,3,2,4,3,1 & & 3,4,2,3,1,2,4,1,2,3,4,1,3
\end{tikzcd}$$

Slika 7.2: Okolica vozlišča $1,3,4,2,3,1,2,4,1,2,3,4,1$ v digrafu $D(\mathcal{W}, (\alpha_1, \alpha_2, \sigma_1, \rho))$.

7.1.1 Grafi s trivialno grupo avtomorfizmov

Oglejmo si primer, ko ima graf G z m vozlišči trivialno grupo avtomorfizmov $\mathrm{Aut}(G) = \{\mathrm{id}\}$ in je torej grupa avtomorfizmov Γ za vsak dvojni obhod grafa G enaka diedrski grupi vseh simetrij (rotacij in simetrij) pravilnega $(2m)$-kotnika. Naj bosta $W = w_0, w_1, W_1, w_0, w_1, W_2$ in $W' = w_0, w_1, W_1', w_1, w_0, W_2'$ dva dvojna obhoda, pri čemer so W_1, W_2, W_1' in W_2' podzaporedja vozliščnih zaporedij W in W'. Dvojna obhoda W in W' očitno nista ekvivalentna, ker W prečka povezavo w_0w_1 dvakrat v isti smeri, medtem ko jo W' prečka v vsako smer po enkrat. Ob tem hitro opazimo, da vsi netrivialni elementi iz Γ, ki ohranijo W, zamaknejo prvo pojavitev podzaporedja w_0w_1 v drugo pojavitev (drugo pa v prvo) ter W_1 v W_2 (W_2 pa v W_1). Od tod tudi sledi, da mora biti v tem primeru dolžina podzaporejda W_1 enaka dolžini podzaporedja W_2. Še več, W_1 in W_2 morata biti enaka. Analogno mora v primeru W' edini element iz Γ, ki ga ohrani, najprej narediti obrat, potem pa dobljeni dvojni obhod zamakniti za $|W_1'| + 4$ mesta (ali pa ga najprej zamakniti za $|W_1'| + 4$ mesta in potem narediti obrat). Le tako se namreč podzaporedje w_0, w_1 preslika v podzaporedje w_0, w_1. Če sta $W_1' = w_{11}', \dots w_{1\ell_1}'$ in $W_2' = w_{21}', \dots w_{2\ell_2}'$, mora ob tem veljati še $w_{1i}' = w_{1(\ell_1 - i)}'$ in $w_{2j}' = w_{2(\ell_2 - j)}'$ za $0 \leq i \leq \ell_1$ in $0 \leq j \leq \ell_2$. Od tod sledi, da imajo v grafih s trivialno grupo avtomorfizmov netrivialne stabilizatorje samo dvojni obhodi, ki so ene izmed naslednjih oblik:

(i) $W = w_0, w_1, W_1, w_0, w_1, W_1$,

(ii) $W = w_0, w_1, w_2, w_3, \dots, w_3, w_2, w_1, w_0, w_2', w_3', \dots, w_3', w_2'$.

Točka *(i)* drži le v primeru, ko je G Eulerjev graf in je w_0, w_1, W_1 njegov Eulerjev obhod. Za vsak drugi dvojni obhod W pa je $\Gamma_W = \{\mathrm{id}\}$. Nobeden izmed predstavljenih primerov pa ne nastopi pri stabilnih obhodih reda > 2 in pri strogih obhodih v grafih z minimalno stopnjo > 2. V obeh opisanih strukturah namreč nastopijo 2-ponovitve.

7.2 Leksikografska urejenost dvojnih obhodov

Razdelek začnemo z definicjo *linearne urejenosti.* Množica X je z relacijo $R \subseteq X \times X$ linearno urejena, če je relacija R:

(i) *refleksivna*: $R(x, x)$,

(ii) *tranzitivna*: $R(x, y) \wedge R(y, z) \implies R(x, z)$,

(iii) *antisimetrična*: $R(x, y) \wedge R(y, x) \implies x = y$,

(iv) *sovisna*: $R(x, y) \vee R(y, x)$.

Naj bosta W in W' dvojna obhoda grafa G, ki ima n vozlišč in m povezav. Potem lahko postavimo naslednje definicije. Predpostavimo, da so vozlišča v G linearno urejena kot $v_0 < v_1 < \ldots < v_{n-1}$ in da sta vozlišči v_0 in v_1 sosednji.

Definicija 7.1 *Naj bosta* $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ *in* $W' = w'_0, \ldots, w'_{2m}$ *dvojna obhoda. Tedaj je* W leksikografsko manjši (ali enak) *kot* W', $W \leq_{lex} W'$, *če je* $W = W'$, *ali pa za najmanjši indeks* i, *v katerem se* W *in* W' *razlikujeta, velja* $w_i < w'_i$.

Ker je opisana leksikografska urejenost hkrati tudi linearna urejenost, velja, da ima vsaka končna množica ekvivalentnih dvojnih obhodov S leksikografsko najmanjšega predstavnika, ki ga imenujemo *kanonični predstavnik* množice S. V tem primeru za tak dvojni obhod rečemo, da je *kanonični dvojni obhod* (množice S).

Lema 7.2 *Naj bo* Γ *grupa avtomorfizmov dvojnih obhodov grafa* G. *Dvojni obhod* W *grafa* G *je* kanoničen, *ko za vsak* $\pi \in \Gamma$ *velja* $W \leq_{lex} \pi(W)$.

Dokaz. Končno množico dvojnih obhodov, ki so ekvivalentni dvojnemu obhodu W, dobimo natanko tako, da na njem uporabimo vsakega izmed avtomorfizmov vsebovanih v grupi Γ. □

Ker Γ vsebuje tudi vse zamike in obrate, sledi, da se vsak kanonični dvojni obhod grafa začne s podzaporedjem v_0, v_1.

Definicija 7.3 *Naj bo* G *graf z* m *povezavami in* $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ *njegov dvojni obhod.* Začetni odsek *dvojnega obhoda* W, *označen z* $\mathrm{init}(W)$, *je najkrajše podzaporedje* W, *ki se začne z* w_0 *in vsebuje vsa vozlišča iz* $V(G)$.

Pri tem je v začetnih zaporedjih še vedno pomemben tudi vrstni red vozlišč.

Lema 7.4 *Naj bosta* W *in* W' *dva različna dvojna obhoda grafa* G *z enakim začetnim odsekom. Potem za vsak avtomorfizem grafa* π *v* $Aut(G)$ *velja, da je* W *različen od* $\pi(W')$ *(in da je* W' *različen od* $\pi(W)$*).*

Dokaz. Naj bo $\pi : V(G) \longrightarrow V(G)$ avtomorfizem grafa G, ki slika W v W', kjer imata W in W' enaka začetna odseka. Tedaj sledi, da je $\pi\mid_{\mathrm{init}(W)} = \mathrm{id}$. Po definiciji 7.3 pa je $V(G) \subseteq \mathrm{init}(W)$, od koder sledi, da je $\pi = \pi\mid_{\mathrm{init}(W)} = \mathrm{id}$ in torej, da je W enak W'. $\square$

Iz ekvivalentnosti sledi tudi naslednja lema.

Lema 7.5 *Vsak dvojni obhod je ekvivalenten nekemu kanoničnemu dvojnemu obhodu.*

V nadaljevanju nekoliko omilimo definicijo začetnega odseka in definiramo i-začetni odsek dvojnega obhoda.

Definicija 7.6 *Naj bo $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ dvojni obhod. Potem je i-*začetni odsek *dvojnega obhoda W podzaporedje prvih i vozlišč v W, označeno z $W_i = w_0, \ldots, w_{i-1}$.*

Za razliko od začetnega odseka dvojnega obhoda, i-začetni odsek dvojnega obhoda ne vsebuje nujno vseh vozlišč iz $V(G)$.

Definicija 7.7 *Naj bo Γ grupa avtomorfizmov dvojnih obhodov grafa G. Dvojni obhod W grafa G je i-*kanoničen*, če za vsak $\pi \in \Gamma$ velja $W_i \leq_{lex} \pi(W_i)$.*

Lema 7.8 *Dvojni obhod W dolžine $2m$ je kanoničen natanko tedaj, ko je i-kanoničen za vsak $1 \leq i \leq 2m$.*

Dokaz. Najprej predpostavimo, da je dvojni obhod $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ i-kanoničen za vsak $1 \leq i \leq 2m$ ob tem pa ni kanoničen. Ker je W $2m$-kanoničen, za vsak $\pi \in \Gamma$ velja $W_{2m} \leq_{\mathrm{lex}} \pi(W_{2m})$. Če W ni kanoničen, torej obstaja $\pi \in \Gamma$, za katerega sledi, da je $w_i = \pi(w_i)$ za vsak $0 \leq i \leq 2m-1$ in $\pi(w_{2m}) < w_{2m}$. To pa je protislovje, saj velja $w_0 = w_{2m}$, $\pi(w_0) = \pi(w_2 m)$ in $w_0 = \pi(w_0)$.

Za dokaz preostale implikacije naj bo Γ grupa avtomorfizmov dvojnih obhodov grafa G z m vozlišči in W kanonični dvojni obhod (dolžine $2m$). Predpostavimo, da za nek i, $1 \leq i \leq 2m$, W ni i-kanoničen. Sledi, da obstaja avtomorfizem dvojnega obhoda $\pi \in \Gamma$, za katerega velja $\pi(W_i) <_{\mathrm{lex}} W_i$. Ker je W kanoničen, za π, tako kot za vsak drug avtomorfizem iz Γ, velja, da je $W \leq_{\mathrm{lex}} \pi(W)$. Po definiciji 7.1 nadalje sledi, da če je j najmanjši takšen indeks, da je w_j različen od $\pi(w_j)$, že prej sledi $w_j < \pi(w_j)$. Za $i < j$ je potem $W_i = \pi(W_i)$, medtem ko za vsak $i \geq j$, W_i vsebuje w_j, od koder sledi $W_i <_{\mathrm{lex}} \pi(W_i)$, kar pa je protislovno s predpostavko, da W za nek i ni i-kanoničen. $\square$

Omenimo, da bi lahko i iz leme 7.8 omejili z dolžino začetnega odseka dvojnega obhoda W.

Pri iskanju vseh neekvivalentih dvojnih obhodov grafa bomo za vsak ekvivalenčni razred v $\mathcal{W}$ želeli poiskati po enega predstavnika—leksikografsko najmanjšega (ali kanoničnega) predstavnika. Preden opišemo algebraičen algoritem v naslednjem razdelku, opomnimo, zakaj moramo pri tem preveriti vse avtomorfizme iz grupe avtomorfizmov grafa G in ne le generatorje iz poljubne generirajoče množice te grupe.

7.2.1 Generatorji grupe avtomorfizmov in kanoničnost

Če je Γ grupa, za podmnožico S njenih elementov, za katero velja, da lahko vsak element grupe zapišemo kot produkt elementov iz S in njihovih inverzov, pravimo, da S generira grupo Γ. Vsak $\gamma \in S$ pa je potem *generator grupe*. Primer grafa G na sliki 7.3 nam pokaže, da za preverjanje kanoničnosti dvojnega obhoda ni dovolj, da kanoničnot preverimo le na neki množici, ki generira grupo avtomorfizmov grafa $\mathrm{Aut}(G)$. Naj bo

$$W = 1, 2, 4, 3, 5, 2, 4, 5, 3, 2, 5, 4, 3, 2, 1$$

strogi obhod omenjenega grafa G. Grupa avtomorfizmov grafa G ima 6 elementov: $\mathrm{Aut}(G) = \{\mathrm{id}, (34), (35), (45), (345), (354)\}$. Označimo avtomorfizem grafa G (354) s φ in dvojni obhod, ki ga dobimo, če φ uporabimo na W, z W', $W' = \varphi(W)$. Ker velja

$$W' = 1, 2, 3, 5, 4, 2, 3, 4, 5, 3, 4, 3, 5, 2, 1$$

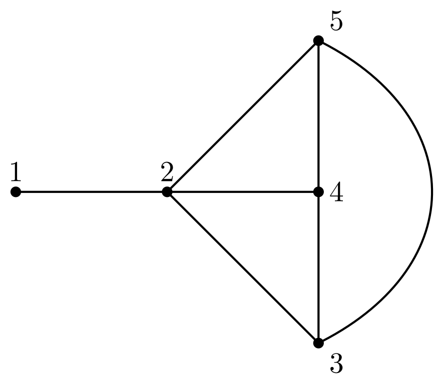
in $W <_{\mathrm{lex}} W'$, W ni kanoničen. Oglejmo si sedaj množico $\{(35), (453)\}$, ki generira grupo avtomorfizmov $\mathrm{Aut}(G)$. Označimo (35) s φ_1 in (345) s φ_2. Ker velja

$$\varphi_1(W) = 1, 2, 4, 5, 3, 2, 4, 3, 5, 2, 3, 4, 5, 2, 1$$

in

$$\varphi_2(W) = 1, 2, 5, 4, 3, 2, 5, 3, 4, 2, 3, 5, 4, 2, 1,$$

sledi, da je $W <_{\mathrm{lex}} \varphi_1(W)$ in $W <_{\mathrm{lex}} \varphi_2(W)$. Torej množica $\{(35), (453)\}$ strogi obhod W vedno preslika v leksikografsko večji strogi obhod, ob tem pa W ni kanoničen (saj v $\mathrm{Aut}(G)$ obstaja element, ki W preslika v leksikografski manjši strogi obhod).



Slika 7.3: Primer grafa G, ko z množico, ki generira grupo avtomorfizmov dvojnih obhodov grafa G ni moč preveriti kanoničnosti dvojnega obhoda

7.3 Algebraičen pristop k štetju neekvivalentnih dvojnih obhodov

Metoda *sestopanja* je sistematično pregledovanje vseh možnih rešitev. Ponazorimo jo lahko z drevesom stanj, kjer rešitev najdemo v listih drevesa ali pa je rešitev pot od korena do lista (v našem primeru). Ko neka pot od korena do lista ni več obetavna, se vrnemo nazaj in poskusimo po drugi poti. Če je $x = (x_1, \ldots, x_n)$ rešitev, ki jo iščemo, in S_i množica možnih odločitev na i-tem koraku, velja, da je $x_i \in S_i$. Če se ob tem zgodi, da dopustnih rešitev ni več, se vrnemo za en korak nazaj, izberemo drug x_{i-1} in nadaljujemo. Pri sestopanju je v najslabšem primeru potrebno pregledati celotno drevo. Zato je smiselno čimprej zavreči vse poti, ki ne vodijo k dopustni rešitvi. Ko zavržemo kakšno odločitev, zavržemo celotno poddrevo te odločitve in s tem skrajšamo pregledovanje. Pri algebraičnem pristopu k štetju neekvivalentnih dvojnih obhodov bomo uporabili metodo *razveji in omeji*, ki izboljša metodo sestopanja tako, da že vnaprej pripravi oceno stanj (mi bomo za to uporabili leksikografsko urejenost in kanoničnost). Več o metodi sestopanja, o metodi razveji in omeji ter o drugih algoritmih so napisali Cormen in sod. v [20], Kleinberg in Tardos v [54] ter Kozen v [57].

Dvojne obhode grafa G bomo sestavljali tako, da bomo začeli z nekim vozliščem v ter na vsakem naslednjem koraku dodali vsa možna vozlišča u, za katera bo $W_p u$ podzaporedje nekega dvojnega obhoda grafa G, pri čemer je W_p zaporedje prej dodanih vozlišč. Za vsak ekvivalenčni razred dvojnih obhodov bomo želeli poiskati njegovega kanoničnega predstavnika. Zato bomo takoj, ko se izkaže, da obstaja leksikografsko manjši ekvivalenten dvojni obhod od tistega, ki ga trenutno sestavljamo, prekinili njegovo sestavljanje in se vrnili za en korak nazaj.

Naj bo odslej G povezan graf z m vozlišči in n povezavami ter Γ grupa avtomorfizmov dvojnih obhodov grafa G. Predpostavimo, da so vozlišča v G linearno urejena kot $v_0 < v_1 < \ldots < v_{n-1}$ in da sta vozlišči v_0 in v_1 sosednji. Iz dejstva, da v opisanem primeru sledi, da se vsak kanonični dvojni obhod grafa začne s podzaporedjem v_0, v_1, sledi, da lahko algoritem že v začetku prilagodimo tako, da vrača le dvojne obhode, ki se začnejo z v_0, v_1. Dejstvo, da v dvojnem obhodu vsaka povezava nastopi dvakrat, pa nam kljub ugotovitvi, da se vsak kanonični dvojni obhod grafa začne s podzaporedjem v_0, v_1, preprečuje, da upoštevamo le še delovanje grupe $\mathrm{Aut}(G)$ in pozabimo na obrate in zamike. Označimo vozlišča tetraedra z 1, 2, 3 in 4. Če fiksiramo povezavo 12 in ne dovolimo zamikov in obratov, temveč le delovanja grupe $\mathrm{Aut}(G)$, sta stroga obhoda $W_1 = 1, 2, 3, 1, 2, 4, 3, 1, 4, 2, 3, 4$ in $W_2 = 1, 2, 3, 4, 1, 3, 4, 2, 1, 3, 2, 4$ kanonična. A s kombinacijo zamika za dve mesti in avtomorfizma (13)(24) lahko W_2 preslikamo v W_1.

Definicija 7.9 *Naj bo G graf z m vozlišči, $p \leq 2m$ neko naravno število in $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$ zaporedje vozlišč grafa G. W_p je* delni dvojni obhod *grafa G, če v G obstaja dvojni obhod W, ki se začne s podzaporedjem, enakim W_p.*

Analogno definiramo tudi *delni strogi obhod* in *delni d-stabilni obhod.* Naj bo W_p delni dvojni obhod dolžine p. Potem $\mathcal{W}_p$ predstavlja množico vseh dvojnih obhodov grafa G, katerih p-začetni obhod je enak W_p. Medtem ko je W_p leksikografsko manjši od drugega delnega obhoda W'_p, če velja $W_p = W'_p$ ali pa za prvi indeks i, kjer se razlikujeta, velja $w_i < w'_i$, pa za W_p pravimo, da je *kanoničen*, če je kanoničen vsaj eden izmed dvojnih obhodov v $\mathcal{W}_p$. *Stabilizator* delnega dvojnega obhoda W_p je definiran kot podmnožica tistih avtomorfizmov iz Γ, ki vsaj enega izmed dvojnih obhodov iz $\mathcal{W}_p$ preslikajo nazaj v en (ne nujno enak) dvojni obhod iz $\mathcal{W}_p$.

Če je $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$ nek delni dvojni obhod, ki smo ga sestavili z algoritmom, pravimo, da so *dopustna vozlišča* tisti sosedi, ki jih lahko v naslednjem koraku dodamo in dobimo nov delni dvojni obhod W_{p+1}. Analogno velja tudi, kadar gradimo paralelne ali antiparalelne dvojne obhode ter d-stabilne obhode, le da je v tem primeru potrebno nekoliko več pozornosti. Paziti moramo, da novo dodano vozlišče ne bo povzročilo kakšne netrivialne ponovitve prenizkega reda ali pa, da bi pomenilo, da neka povezava nima pravilne orientacije.

Najprej predstavimo tri pomožne algoritme, ki jih za svoje delovanje potrebuje osnovni algoritem 7.4. Algoritem 7.1 na vsakem koraku pregleda vse dopustne sosede zadnjega vozlišča w_{p-1}, zbrane v V', ki je bilo dodano v delni dvojni obhod $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$. Za vsak $v \in V'$ določi, ali je delni dvojni obhod $W'_{p+1} = w_0, \ldots, w_{p-1}, v$ kanonični delni dvojni obhod glede na delovanje množice A (W_{p+1} je torej $(p+1)$-začetni odsek nekega dvojnega obhoda, ki je kanoničen glede na delovanje $A \subseteq \Gamma$ in nadalje je W' torej $(p+1)$-kanoničen glede na delovanje A). Opozorimo, da v tem primeru ne velja nujno, da je $A = \mathrm{Aut}(G)$ kot zgoraj. V primeru, da je ta pogoj izpolnjen, doda W' v vrsto delnih dvojnih obhodov.

Algoritem 7.1 PODALJŠAJ DELNI DVOJNI OBHOD

Vhod: delni dvojni obhod $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$,
 $A \subseteq \Gamma$,
 vrsta Q delnih dvojnih obhodov skupaj s pripadajočimi podmnožicami Γ
Izhod: posodobljeno vrsto Q

```
V' = DOPUSTNI SOSEDI(w_{p-1})
V'' = KANONIČNO OBREŽI DOPUSTNE SOSEDE(V', W_p, A)
for v ∈ V'' do
    W_{p+1} = w_0 ... w_{p-1}, v
    A_v = OBREŽI(A, W_{p+1})
    if W_{p+1} kanonični delni dvojni obhod then
        dodaj (W_{p+1}, A_v) v Q
```

Na vsakem koraku uporabljamo grupo avtomorfizmov dvojnih obhodov Γ (ali njeno podmnožico), da ugotovimo, ali je iz sestavljenega delnega dvojnega obhoda $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$ še moč dobiti kanonični dvojni obhod (torej ali je W_p kanoničen). Ker vemo, da to velja za W_p, lastnost pa bi radi ohranili tudi vnaprej, za W_{p+1}, nas zanimajo tisti avtomorfizmi, ki ohranijo $(p+1)$-začetni odsek (torej tisti, ki so v stabilizatorju delnega dvojnega obhoda W_{p+1}). Za to poskbimo v algoritmu 7.2. Ker smo v prejšnjem koraku algoritem 7.2 klicali na W_p, je v tekočem koraku v praksi potrebno preveriti samo, kaj se dogaja z vozliščem z indeksom p. Ob tem poudarimo, da dokler dvojni obhod ni v celoti sestavljen, ne moremo preveriti vseh avtomorfizmov, saj nekateri zamiki delni dvojni obhod zamaknejo tako, da še ne moremo vedeti, katera vsa vozlišča se bodo na dvojnem obhodu, dobljenem iz tega dvojnega obhoda, pojavila na prvih p mestih. Vse take avtomorfizme na tem koraku ohranimo.

Algoritem 7.2 OBREŽI

Vhod: množica avtomorfizmov dvojnih obhodov A,
  delni dvojni obhod W_p
Izhod: obrezana množica avtomorfizmov dvojnih obhodov A'

```
A' = ∅
for π ∈ A do
  if π v stabilizatorju delnega dvojnega obhoda W_p, ali če za π še ne moremo določiti,
  če je v stabilizatorju W_p then
    dodaj π v A'
return A'
```

Algoritem 7.3 na vsakem koraku pregleda vse dopustne sosede zadnjega vozlišča w_{p-1}, zbrane v $V \subseteq N(w_{p-1})$, ki je bilo zadnje dodano v delni dvojni obhod $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$. Pri tem za vsak $v \in V$ dobimo delni dvojni obhod oblike $W_{p+1} = w_0, \ldots, w_{p-1}, v$. Množico takšnih delnih dvojnih obhodov označimo $\mathcal{W}_{p+1}$. Ogledamo si orbite, ki jih dobimo pri delovanju $\mathrm{Aut}(G) \cap A$ (ne zamikamo in obračamo) na $\mathcal{W}_{p+1}$ ter za dva delna obhoda pravimo, da sta v isti orbiti O omenjenega delovanja, kadar obstaja avtomorfizem iz $\mathrm{Aut}(G) \cap A$, ki prvega preslika v drugega. Potem za vsako tako orbito O izberemo vozlišče v, ki je bilo na mesto z indeksom $p+1$ dodano v leksikografsko najmanjšem delnem dvojnem obhodu te orbite. Pri tem opozorimo, da je v praksi mogoče algoritem 7.3 znatno pohitriti, saj moramo primerjati le vozlišče na mestu p. Algoritem 7.2 namreč zagotavlja, da so za vsak $\pi \in \mathrm{Aut}(G) \cap A$ vozlišča $w_0, \ldots, w_{p-1}$ fiksirana.

Glavni rezultat tega razdelka predstavlja algoritem 7.4.

Do konca razdelka dokažemo pravilnost delovanja algoritma 7.4.

Izrek 7.10 *Če je W dvojni obhod, ki ga vrne algoritem 7.4, sledi, da je W kanoničen.*

Dokaz. Delni dvojni obhod W_p, ki ga algoritem 7.1 doda v Q je i-kanoničen, za vsak $1 \leq i \leq p$. Za $p = 2m$ to pomeni, da je dvojni obhod, ki ga algoritem 7.1 doda v Q (in ga potem algoritem 7.4 vrne kot element množice L), i-kanoničen, za vsak $1 \leq i \leq 2m$. Po lemi 7.8 sledi, da je vsak tak W kanoničen. □

Dvojni obhodi, ki jih vrne algoritem 7.4, so med seboj neekvivalenti. V nasprotnem primeru bi namreč nek ekvivalenti razred imel dva kanonična predstavnika, kar pa je v nasprotju z lemo 7.2.

Algoritem 7.3 KANONIČNO OBREŽI DOPUSTNE SOSEDE

Vhod: delni dvojni obhod $W_p = w_0, \ldots, w_{p-1}$,
množica dopustnih sosedov $V \subseteq N(w_{p-1})$,
množica avtomorfizmov $A \subseteq \Gamma$

Izhod: množica $V' \subseteq V$, ki za vsako orbito O delovanja $Aut(G) \cap A$ na $\mathcal{W}_{p+1}$ vsebuje v, za katerega je $W_{p+1} = w_0, \ldots, w_{p-1}, v$ leksikografsko najmanjši delni dvojni obhod v O

```
if A = ∅ ali A = {id} then
  return V
V' = ∅
for v ∈ V do
  V'' = {v}
  v' = v
  for π ∈ Aut(G) ∩ A do
    dodaj π(v) v V''
    if (w_0, ..., w_{p-1}, π(v)) <_lex (w_0, ..., w_{p-1}, v') then
      v' = π(v)
  dodaj (v') v V'
  V = V \ V''
return V'
```

Algoritem 7.4 ALGEBRAIČNO PREŠTEJ DVOJNE OBHODE

Vhod: graf G z m povezavami,
grupa avtomorfizmov dvojnih obhodov Γ v grafu G

Izhod: seznam vseh kanoničnih neekvivalentnih dvojnih obhodov L

```
W_1 = v_0, v_1
A = Γ
A = OBREŽI(A, W_1)
Q = {(W_1, A)}
while Q ni prazna do
  (W, A) = referenca na začetku Q
  odstrani (W, A) iz Q
  if |W| = 2m then
    dodaj W v L
  else
    PODALJŠAJ DELNI DVOJNI OBHOD(W, A, Q)
return L
```

Izrek 7.11 *Naj bo W kanonični dvojni obhod. Potem algoritem 7.4 vrne W.*

Dokaz. Predpostavimo nasprotno. Naj bo $W = w_0, \ldots, w_{2m}$ kanonični dvojni obhod, ki ga algoritem 7.4 ne vrne. Na začetku razdelka smo omenili, da se vsi kanonični dvojni obhodi začnejo s podzaporedjem v_0, v_1. Obstaja maksimalno naravno število i, za katero velja, da je W_i i-začetni odsek nekega kanoničnega dvojnega obhoda, ki ga je algoritem 7.4 vrnil kot rezultat (i je lahko enak 1). Naj bo $\mathcal{W}_i$ množica vseh takih (kanoničnih) dvojnih obhodov. Naj bo $V_{\mathcal{W},i+1}$ množica vozlišč, ki imajo v dvojnih obhodih iz $\mathcal{W}_i$ indeks $i+1$. Po predpostavki sledi, da $w_{i+1} \notin V_{\mathcal{W},i+1}$. Ker je tudi W dvojni obhod, je bilo na $i+1$ koraku algoritma 7.4 (natančneje algoritma 7.3) za vsak dvojni obhod iz $\mathcal{W}_i$ vozlišče w_{i+1} v množici V' dopustnih vozlišč. Ker ga algoritem 7.4 (natančneje algoritem 7.3) ni dodal, sledi, da v isti orbiti delovanja grupe avtomorfizmov $\mathrm{Aut}(G) \subseteq \Gamma$, v kateri je W, leži še nek leksikografsko manjši dvojni obhod $W' \in \mathcal{W}_i$. To pa je v protislovju z dejstvom, da je W kanoničen. $\square$

Da namesto dvojnih obhodov v splošnem štejemo le stroge ali le d-stabilne obhode, je potrebno le spremeniti, kaj so dopustni sosedi vozlišča v, ki smo ga na i-tem koraku dodali v dvojni obhod. Pri strogih obhodih moramo tako paziti, da se ne pojavi nobena netrivialna ponovitev, pri d-stabilnih obhodih pa, da se ne pojavi nobena ponovitev reda $\leq d$. Podobno lahko preštevamo tudi paralelne ali antiparalelne dvojne obhode. Za povezavo $e = uv$, ki je bila v dvojnem obhodu že prečkana, si je potrebno zapomniti, ali smo jo prečkali v smeri od u proti v ali pa v obratni smeri. Glede na to (in dejstva, ali štejemo paralelne ali antiparalelne obhode) potem ustrezno popravimo dopustne sosede vozlišča u in v.

7.4 Topološki pristop k štetju neekvivalentnih strogih obhodov

V tem razdelku na kratko opišemo algoritem za štetje neekvivalentnih strogih obhodov, ki temelji na topoloških lastnostih, predstavljenih v poglavju 2.

7.4.1 Obhodna ekvivalentnost vložitev

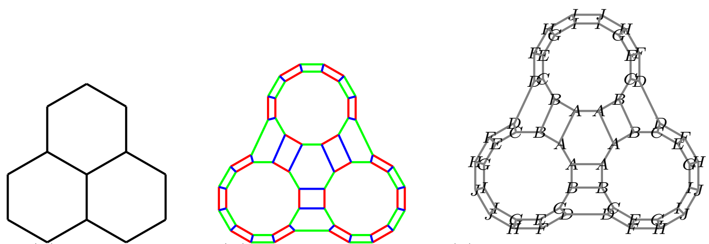
Že v uvodu smo ponovili osnovne definicije topološke teorije grafov. V tem poglavju bomo poleg teh uporabljali tudi rezultate, ki so jih predstavili Gross in Tucker v [47], Pisanski in Žitnik v [74] ter White v [100].

Poleg kombinatoričnih vložitev, ki uporabljajo rotacijske sheme, ciklične permutacije in oznake povezav, lahko vložitve grafov opišemo tudi z zemljevidi. Pri tem bomo sledili definicijam, predstavljenim v [74]. *Zemljevid* je celična vložitev grafa v ploskev. Poenostavljeno, vsako lice grafa G z ℓ povezavami razdelimo v 2ℓ *praporjev*, tj. trojica med seboj incidenčnega vozlišča, povezave in lica, tako da vsaka *pol povezava* ustreza enemu praporju. Vsaka povezava $e = uv$ je sestavljena iz dveh pol povezav ali lokov (v bolj uveljavljeni terminologiji) uv in vu. Zemljevid M potem definiramo kot množico praporjev $\Phi(M)$ in treh *involucij* (funkcij, ki so same sebi inverzne) brez fiksnih točk τ_0, τ_1 in $\tau_2 \colon \Phi(M) \to \Phi(M)$ z naslednjima lastnostima:

(i) $\tau_0\tau_2 = \tau_2\tau_0$, ki je brez fiksnih točk, ter

(ii) delovanje grupe $\langle \tau_0, \tau_1, \tau_2 \rangle$ na $\Phi(M)$ ima le eno orbito.

Orbite $V(M)$ delovanja $\langle \tau_1, \tau_2 \rangle$ so vozlišča, orbite $E(M)$ delovanja $\langle \tau_0, \tau_2 \rangle$ so povezave in orbite $F(M)$ delovanja $\langle \tau_0, \tau_1 \rangle$ so lica. Z v_ϕ, e_ϕ in f_ϕ označimo vozlišče, povezavo in lice, ki pripadajo praporju ϕ. Opomnimo, da $(V(M), E(M))$ predstavljata graf $G = \mathrm{Skel}(M)$, ki je bil vložen in mu pravimo 1-*skeletni graf* zemljevida. Če v grafu G in njegovem dualu ni zank, se za zemljevid M uporablja izraz *praporno enostaven* in je lahko vsak prapor identificiran s trojico (v_ϕ, e_ϕ, f_ϕ). Na žalost to ne velja za vse grafe, ki jih želimo obravnavati. Primer pravkar razloženega je prikazan na sliki 7.4.



(a) Graf G (b) Praporni graf (c) Orbite delovanja $\mathrm{Aut}(G)$

Slika 7.4: Graf G skupaj s prapornim grafom in orbitami delovanja $\mathrm{Aut}(G)$

Izberimo preslikavo $\lambda\colon E(G) \to \{-1, 1\}$. Definiramo 2-regularni graf Q_λ, katerega vozlišča so $\Phi(M)$, njegove povezave pa za vsak $\phi \in \Phi(M)$ dobimo kot:

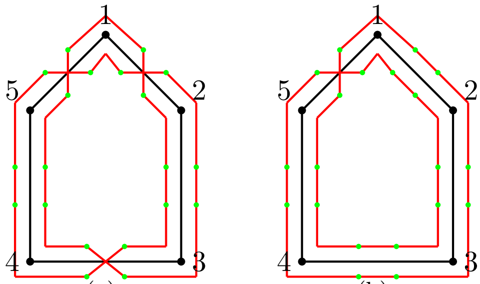
(i) $\phi \sim \tau_1(\phi)$,

(ii) $\phi \sim \tau_0(\phi)$, kadar je $\lambda(e_\phi) = 1$, in $\phi \sim \tau_2\tau_0(\phi)$, kadar je $\lambda(e_\phi) = -1$.

Graf Q_λ je sestavljen iz enega ali več sodih ciklov. Kadar ima Q_λ eno povezano komponento, mu rečemo *(neusmerjen) zemljevidni obhod*. Če izberemo začetni prapor ϕ_0 in usmeritev, lahko Q_λ dodelimo strogi obhod z naslednjim postopkom. Začnimo v izbranem ϕ_0 in prečkamo zemljevidni obhod v izbrani smeri, da dobimo obhod $(\phi_0, \phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_{4m} = \phi_0)$. Potem je $W(Q_\lambda) = (v_{\phi_0}, v_{\phi_2}, v_{\phi_4}, \ldots, v_{\phi_{4m}})$ strogi obhod. Ker z zamiki in obrati ohranimo ekvivalentni strogi obhod W, je vseeno, kateri začetni prapor ϕ_0 in usmeritev izberemo.

Pri tem omenimo, da lahko povezave med praporji v grafu Q_λ narišemo tako, da ne sekajo črt, ki predstavljajo povezave 1-skeletnega grafa grafa G, razen na sredi nekaterih povezav, kjer zemljevidni obhod seka tudi samega sebe. Takšna presečišča se pojavljajo natanko za povezave e, za katere velja, da je $\lambda(e) = -1$. Opozorimo, da kadar predstavljamo zemljevidne obhode, le-ti ne sekajo sami sebe v bližini vozlišč 1-sekeletnega grafa. Ta lastnost se ujema s kemičnim vidikom uporabe, ki so ga v [6] predstavili Bašić in sod.

Za aplikativno uporabo v večini primerov zadostuje, da strogi obhod poiščemo za dano fiksno vložitev. Za namene preostalih primerov pa pravimo, da je zemljevid M *združljiv* s strogim obhodom W, če obstaja zemljevidni obhod Q, za katerega velja $W = W(Q)$. Takoj, ko v grafu G obstaja vozlišče stopnje 4 ali več, se lahko zgodi, da v takšnem grafu obstaja strogi obhod, ki ni združljiv z nekim zemljevidom. Po drugi strani pa lahko različni zemljevidni obhodi porodijo isti strogi obhod kot v primeru grafa C_5, vloženega v ravnino na sliki 7.5.



Slika 7.5: Primer dveh različnih zemljevidnih obhodov, ki porajata isti strogi obhod

Zgornje sledi iz dejstva, da si lahko strogi obhod predstavljamo kot zaporedje vozlišč in nas pri tem ne zanima, če (in katera) povezava v s strogim obhodom združljivim zemljevidom seka samo sebe (v teoriji kombinatoričnih vložitev to pomeni, da nas ne zanimajo oznake na povezavah vložitve, temveč le njene vozliščne slike). Celo več, v grafu, ki ima minimalno stopnjo vsaj 3, strogi obhod enolično določa zemljevid s katerim je združljiv (iz podzaporedja treh vozlišč u, v in w v strogem obhodu W lahko natanko določimo ali povezava uv v z W združljivem zemljevidu seka samo sebe).

Klasična definicija ekvivalentnosti kombinatoričnih vložitvev pravi, da sta dve kombinatorični vložitvi (Π, λ) in (Π', λ') ekvivalentni, kadar lahko eno iz druge dobimo tako, da lokalno rotacijo okoli nekaterih vozlišč zamenjamo z njihovimi inverzi in ob tem obrnemo še oznake na njim sosednjih povezavavah. Ob tem smo že v uvodu omenili, da sta dve vložitvi ekvivalentni natanko tedaj, ko imata enaki množici ličnih obhodov. Nadalje smo v poglavju 2 pojasnili povezavo med strogimi obhodi in vložitvami grafov. Strogi obhod namreč predstavlja edini lični obhod v množici ličnih obhodov $\mathcal{W}$ za neko vložitev. Od tod sledi, da strogi obhod W do ekvivalence natančno določa vložitev: podzaporedje eve' implicira, da sta e in e' zaporedni v π_v, medtem ko podzaporedje $eve'ue''$ določa oznako povezave e'—$\lambda(e') = 1$ natanko tedaj, ko je $\pi_(e) = e'$ in $\pi_u(e') = e''$ ali $\pi_u(e'') = e'$ in $\pi_v(e') = e$. Ker za vozliščno zaporedje storgega obhoda, oznake na povezavah nimajo nobenega pomena, za vložitve grafov definiramo novo ekvivalenčno relacijo (ki ignorira oznake na povezavah).

Definicija 7.12 *Dve vložitvi* (Π, λ) *in* (Π', λ') *sta* obhodno ekvivalentni*, ko lahko eno iz druge dobimo tako, da lokalno rotacijo okoli nekaterih vozlišč zamenjamo z njihovimi inverzi.*

Analogno velja za zemljevide s katerimi predstavljamo vložitve. Obhodno ekvivalentnim vložitvam pripadajo enaki strogi obhodi:

Izrek 7.13 *Naj bosta* M *in* M' *dva obhodno ekvivalentna zemljevida (*Γ *in* Γ' *dve obhodno ekvivalentni vložitvi) ter* $\mathcal{W}$ *in* $\mathcal{W}'$ *množici vseh neekvivalentnih strogih obhodov, prvih združljivih z* M *in drugih združljivih z* M' *(združljivih z* Γ *in* Γ'*). Potem velja, da je* $\mathcal{W} = \mathcal{W}'$ *ali* $\mathcal{W} \cap \mathcal{W}' = \emptyset$.

Dokaz. Zamenjava lokalnih rotacij z njihovimi inverzi okoli nekaterih vozlišč ohranja vozliščne slike nespremenjene. To pa nadalje pomeni, da lahko vsak strogi obhod W združljiv z vložitvijo Γ konstruiramo tudi v vložitvi Γ', ki je z Γ obhodno ekvivalentna. $\square$

Za primer omenimo, da ima tako 3-bipiramida 54 neekvivalentnih vložitev, a le 6 obhodno neekvivalentnih vložitev.

Strogi obhod W je moč v neki vložitvi Π *realizirati* natanko tedaj, ko obstaja vložitev Π', ki je s Π obhodno ekvivalentna, in je W ekvivalenten Π' pripadajočemu strogemu obhodu.

Naj bo $\mathcal{M}(G) = \{M_1, \ldots, M_k\}$ množica vseh neizomorfnih zemljevidov (vložitev), katerih 1-skeletni graf je G. Da dobimo vse neekvivalentne stroge obhode grafa G, moramo za vsak zemljevid v $\mathcal{M}(G)$ posebej poiskati vse neekvivalentne stroge obhode, ki so z njim združljivi. Pri tem nam izrek 7.13 zagotavlja, da bodo takšni strogi obhodi med seboj neekvivalentni, kar nadalje pomeni, da lahko stroge obhode za vsak zemljevid iščemo vzporedno brez kasnejše dodatne primerjave. V nadaljevanju predpostavljamo, da je množica $\mathcal{M}(G)$ vnaprej poznana, in se na tem mestu z generiranjem le-te ne ukvarjamo.

7.4.2 Naivni pristop

Najprej v algoritmu 7.5 predstavimo naivni pristop, ki ima eksponentno časovno zahtevnost. Pri tem generiramo 2^m možnosti glede na to, kakšna je oznaka $\lambda(e)$ za vsako izmed m povezav 1-skeletnega grafa G zemljevida M (s spremembo oznake združujemo lica v vložitvi). Za vsak generiran element moramo na koncu preveriti še, ali je povezan (ter tako predstavlja strogi obhod).

Klic Kanonični obhod(W, A) v algoritmu 7.5 vrne kanonično obliko strogega obhoda W. Preverba, ali je Q_λ povezana, je lahko narejena v času $O(m)$. Ker moramo preveriti vse podmnožice $E(G)$, $|E(G)| = m$, je skupna časovna zahtevnost algoritma 7.5, ki najde vse stroge obhode fiksne vložitve (torej vse stroge obhode, ki so združljivi z zemljevidom M), $O(2^m m)$. Da najdemo vse neekvivalentne stroge obhode grafa G,

Algoritem 7.5 PREŠTEJ ZEMLJEVIDNE OBHODE

Vhod: zemljevid M s $4m$ praporji
Izhod: seznam L neekvivalentnih strogih obhodov v M

```
G = Skel(M)
A = Aut(G)
L = {}
for ℰ ⊆ E(G) do
   definiraj λ: E(G) → {−1, 1} tako, da je λ(e) = 1 natanko tedaj, ko je e ∈ ℰ, sicer
   je λ(e) = −1
   if Q_λ povezan then
      dodaj KANONIČNI OBHOD(W(Q_λ), A) v L
return L
```

moramo algoritem 7.5 uporabiti za natanko eno vložitev vsake orbite obhodovne ekvivalenčne realcije.

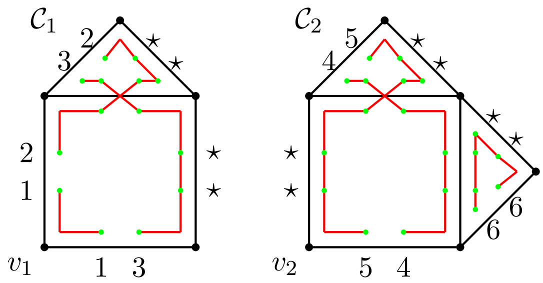
7.4.3 Dinamično programiranje

Dinamično programiranje je metoda, ki sistematično pregleduje vse možne poti v reševanju problema in temelji na pravilu optimalnosti, da je vsako podzaporedje optimalnega zaporedja tudi optimalno. Osnova dinamičnega programiranja je rekurzivna enačba, imenovana Bellmanova enačba, in je za vsak problem različna. V splošnih primerih ne moremo na vsakem tekočem koraku dobiti dela rešitve, ampak množico potencialnih rešitev, ki jih na koncu rekonstruiramo in povežemo v končno rešitev. Podobno kot pri sestopanju lahko takoj, ko ugotovimo, da neka komponenta ne vodi k optimalni rešitvi, le-to zavržemo.

Za potrebe algoritma, ki deluje na podlagi dinamičnega programiranja, definiramo *delni zemljevidni obhod* lica $f \in F(M)$ kot podgraf grafa Q, induciranega na praporjih $\{\phi \mid f_\phi = f\}$. Analogno je delni zemljevidni obhod podmnožice lic $\mathcal{F} \subseteq F(M)$ podgraf grafa Q, induciran na praporjih $\{\phi \mid f_\phi \in \mathcal{F}\}$. Delni zemljevidni obhod je vedno unija ciklov in poti, tako lahko rečemo, da je delni zemljevidni obhod *dopusten*, kadar ne vsebuje nobenega cikla.

S pravilno izbiro podmnožice lic zemljevida dobimo ploskev z robom, pri čemer je ta rob disjunktna unija ciklov $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_r$. Na vsakem izmed teh ciklov izberemo referenčno vozlišče $v_i \in \mathcal{C}_i$ in usmeritev. *Oznako* $\sigma(\widetilde{Q})$ delnega zemljevidnega obhoda $\widetilde{Q}$ dobimo po naslednjem postopku. Prečkaj vsak cikel, ki je na robu ploskve. Pri tem začnemo v referenčnem vozlišču in sledimo izbrani usmeritvi. Vsak prapor ϕ, ki ga pri tem prečkamo, označimo s simbolom. Če je stopnja ϕ v zemljevidnem obhodu enaka 2, pri tem izberemo simbol $\star$, v nasprotnem, kadar je stopnja ϕ enaka 1, pa najprej preverimo, kakšen je prapor, ki leži na nasprotni strani poti v zemljevidnem obhodu $\widetilde{Q}$ (ker je ϕ stopnje 1, je jasno del neke poti zemljevidnega obhoda). Če je bil le-ta že označen, tudi za ϕ izberemo isti simbol. Sicer pa izberemo najmanjše neuporabljeno naravno število. Slika 7.6 prikazuje primer, kjer smo iz večjega zemljevida izbrali 5 lic. Pri tem je rob sestavljen iz dveh ciklov, označenih s $\mathcal{C}_1$ in $\mathcal{C}_2$. Označeni sta tudi referenčni vozlišči v_1 in v_2 (izbrana smer pa je v smeri urinega kazalca). Oznaka delnega zemljevidnega obhoda iz primera na sliki 7.6 je potem

$$(1, 2, 3, 2, \star, \star, \star, \star, 3, 1, \star, \star, 4, 5, \star, \star, \star, \star, 6, 6, 4, 5, \star, \star).$$



Slika 7.6: Delni zemljevidni obhod skupaj z oznakami

Naj bosta $\mathcal{F}, \mathcal{F}' \subset F(M)$ takšna, da je $\mathcal{F} \cap \mathcal{F}' = \emptyset$. Naj bosta $\widetilde{Q}$ in $\widetilde{Q}'$ njuna pripadojoča delna zemljevidna obhoda. Pravimo, da sta $\widetilde{Q}$ in $\widetilde{Q}'$ *združljiva*, če za vsako povezavo, ki je skupna $\mathcal{F}$ in $\mathcal{F}'$, drži ena od naslednjih trditev: (i) vsi ustrezajoči si praporji so stopnje 1 ali pa (ii) vsi pripadajoči praporji so stopnje 2. Če sta delna zemljevidna obhoda $\widetilde{Q}$ in $\widetilde{Q}'$ združljiva, ju lahko *združimo*. Pri tem vse skupne povezave, ki vsebujejo prapor stopnje 1, navzkrižno združimo, da dobimo nov delni zemljevidni obhod $\widetilde{Q} \circ \widetilde{Q}'$.

Pri tem opazimo, da za to, da dobimo $\sigma(\widetilde{Q} \circ \widetilde{Q}')$, potrebujemo le $\sigma(\widetilde{Q})$ in $\sigma(\widetilde{Q}')$. Najprej v enem izmed njiju spremenimo oznako, tako da bodo nastopali sami različni simboli (razen $\star$, ki se lahko pojavi v obeh). V primeru na sliki 7.6 je za to že poskrbljeno, saj oznaka v $\mathcal{C}_1$ uporablja simbole $1, 2$ in 3, oznaka v $\mathcal{C}_2$ pa simbole $4, 5$ in 6. Potem si oglejmo pare $(\phi, \tau_0\tau_2(\phi))$, kjer prapor ϕ pripada skupni povezavi. Glede na pripadajoči oznaki nastopi eden izmed naslednjih primerov:

(i) dvakrat $\star$– v tem primeru ju ignoriramo;

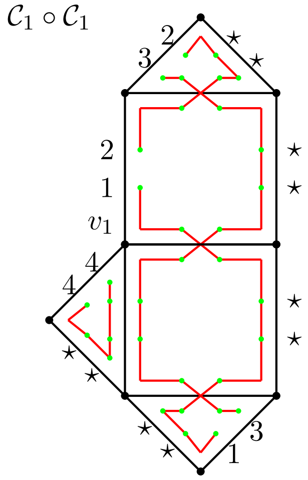
(ii) dve različni števili—v tem primeru spremenimo oznako, tako da obakrat uporabimo nižje izmed števil;

(iii) dve enaki števili—v tem primeru ju ignoriramo, saj dobljeni delni zemljevidni obhod ne bo dopusten.

Eden izmed načinov, kako združiti $\mathcal{C}_1$ in $\mathcal{C}_2$ iz slike 7.6, je, da združitev poteka prek (edine skupne) povezave z oznakama 1 in 3 ter povezavo z oznakama 5 in 4. Oznaka novega delnega zemljevidnega obhoda z začetkom v v_1 je potem

$$(1, 2, 3, 2, \star, \star, \star, \star, \star, \star, 3, 1, \star, \star, \star, \star, 4, 4)$$

(prikazano na sliki 7.7).



Slika 7.7: Primer združitve delnih zemljevidnih obhodov s slike 7.6

Algoritem začne z enim licem, ki mu na vsakem koraku dodamo eno novo lice. Če množico lic zapišemo kot $\mathcal{F}_i = \{f_1, \ldots, f_i\}$, za $i = 0, \ldots, |F(M)|$, si v pripravi na izvedbo algoritma za vsak f_i pripravimo seznam vseh dopustnih oznak (izpustimo torej tiste, v katerih nastopajo same $\star$). V imeniku potem kot ključe hranimo dopustne oznake, kot vrednosti pa število ponovitev enakega lica z enako oznako. Naj bo $\mathcal{D}_1$ imenik, ki hrani vse dopustne oznake lica f_1, in naj bodo vse vrednosti v njem enake 1. Imenik $\mathcal{D}_i$ bo vseboval vse dopustne oznake $\mathcal{F}_i$ in njihova števila. Da dobimo $\mathcal{D}_{i+1}$, moramo vsako oznako iz $\mathcal{D}_i$ združiti z vsako dopustno oznako lica f_{i+1}. Če je tudi dobljena oznaka dopustna, povečamo vrednost, shranjeno pod ključem, enakim dobljeni oznaki v $\mathcal{D}_{i+1}$ za število, shranjeno pod ključem v $\mathcal{D}_i$. Končamo, ko na zadnjem koraku sestavimo celoten zemljevid in iz vseh lic po opisanem postopku dobimo en cikel.

Časovna zahtevnost opisanega algoritma zavisi od vrstnega reda lic, ki jih na vsakem koraku dodajamo. Na vsakem koraku namreč potrebujemo oznako roba ploskve, ki jo tvorijo dodana lica, in od njene dolžine tudi zavisi, koliko posamezni korak prinese k skupni časovni zahtevnosti. V najslabšem primeru bi v nekem koraku na robu nastopilo vseh m povezav. Število korakov je odvisno od števila lic, pri tem pa je bolje imeti več kratkih lic kot malo dolgih. Časovna zahtevnost opisanega algoritma je tako $O(mf)$, kjer m predstavlja število povezav grafa G, f pa število lic za dano vložitev grafa. Podobno kot pri naivnem algoritmu 7.5 je potrebno, da preštejemo vse neekvivalentne stroge obhode grafa G, opisani algoritem uporabiti na natanko eni vložitvi vsake orbite obhodovne ekvivalenčne relacije.

Z dodatnimi pogoji lahko algoritem hitro popravimo, da šteje tudi paralelne in antiparalelne stroge obhode. Po drugi strani pa posplošitev za nestroge (torej za dvojne in d-stabilne) obhode ni mogoča.

7.4.4 Optimizacija za kubične in simetrične grafe

V razdelku predstavimo dve ideji, kako lahko za določene družine grafov algoritem, opisan v 7.4.3, še izboljšamo.

Izrek 7.14 *Za vsak kubični graf G vse njegove vložitve ležijo v istem ekvivalenčnem razredu za relacijo obhodne ekvivalentnosti.*

Dokaz. Kot smo omenili že pred in v dokazu izreka 7.13, so za stroge obhode in posledično obhodno ekvivalente vložitve pomebne le vozliščne slike, ne pa tudi oznake na povezavah vložitve. Potem izrek hitro sledi iz dejstva, da je vozliščna slika (definirana v razdelku 2.2) vozlišča stopnje 3 vedno enaka in je imuna na rotacije. Posledično namreč to velja tudi za lokalne lastnosti poljubnega strogega obhoda W. Za vozlišče v stopnje 3 in njegove sosede v_1, v_2 in v_3 se v strogem obhodu vedno pojavijo naslednja 3 podzaporedja: v_1, v, v_2 in v_2, v, v_3 ter v_3, v, v_1 (pri tem zanemarimo usmeritve). $\square$

Za kubični graf G je torej dovolj, da algoritem, opisan v 7.4.3, uporabimo samo enkrat na poljubni vložitvi grafa G. Od tod sledi, da je časovna zahtevnost algoritma, opisanega v 7.4.3, za kubične grafe $O(mf)$.

Naj bo C nek cikel v grafu. Označimo podgraf, ki leži v "notranjosti" območja, sklenjenga s C, z X ter območje grafa, ki leži "zunaj" C, z Y. Če ima graf G avtomorfizem π, za katerega velja: (i) $\pi^2 = \mathrm{id}$, (ii) $\pi(C) = C$ in $\pi(X) = Y$ (po (i) hkrati tudi $\pi(Y) = X$), potem lahko časovno zahtevnost algoritma, opisanega v 7.4.3, prepolovimo. To storimo tako, da v pripravi na algoritem, opisani v 7.4.3, izberemo samo cikle iz X in C ter algoritem zaključimo, brž ko kot zadnji cikel dodamo C. Označimo množico delnih strogih obhodov, ki smo jih pri tem dobili, z $\mathcal{W}_X$. Da dobimo vse stroge obhode, le še zlepimo vsak delni strogi obhod iz $\mathcal{W}_X$ z vsakim delnim strogim obhodom iz $\mathcal{W}_X$.

Obe opisani izboljšavi lahko hkrati uporabimo na nanocevkah (posebni družini fulerenov), ki izpolnjujejo oba pogoja. Ob tem lahko za fulerene v pripravi na algoritem, opisani v 7.4.3, uporabimo tudi spiralne kode (podrobneje sta jih v [38] opisala Fowler in Rogers), ki nam zagotavljajo, da bo pri dodajanju ciklov, ki se dogaja v algoritmu, opisanem v 7.4.3, najdaljši cikel čimkrajši.

7.5 Numerični rezultati

V tabelah 7.1, 7.2 in 7.3 so zbrana števila neekvivalentnih strogih obhodov za platonična telesa, prizme in nekatere druge zanimive poliedre, za katere obstaja velika verjetnost, da jih bodo v kratkem s pomočjo nove strategije, ki temelji na samosestavljanju, izdelali tudi v laboratorijih. Pri tem d predstavlja stopnjo grafa (kadar je le-ta regularen), n število vozlišč, m število povezav, ST število strogih obhodov, aST število antiparalelnih strogih obhodov in pST število paralelnih strogih obhodov v grafu. CPU čas predstavlja čas (v sekundah), potreben za dotični izračun. Za primerjavo je v oklepaju zapisan še CPU čas, potreben pri sistematičnem preverjanju vseh možnosti (ko najprej, brez izločanja, generiramo vse dvojne obhode ter potem za vsakega preverimo ali je kanoničen).

graf	d	n	m	ST		pST	
				#	CPU čas (s)	#	CPU čas (s)
tetraeder	3	4	6	3	0.003 (0.003)	0	-
kocka	3	8	12	40	0.009 (0.012)	0	-
oktaeder	4	6	12	21479	1.86 (4.470)	262	0.056 (0.111)
dodekaeder	3	20	30	2532008	1962.620 (4943.810)	0	-

Tabela 7.1: Število strogih obhodov in paralelnih strogih obhodov v platoničnih telesih

graf	d	n	m	ST		aST	
				#	CPU čas (s)	#	CPU čas (s)
$K_2 \square C_3$	3	6	9	25	0.004 (0.004)	2	0.004 (0.004)
$K_2 \square C_4$	3	8	12	40	0.010 (0.012)	0	-
$K_2 \square C_5$	3	10	15	634	0.047 (0.059)	10	0.005 (0.005)
$K_2 \square C_6$	3	12	18	3604	0.377 (0.576)	0	-
$K_2 \square C_7$	3	14	21	21925	3.210 (4.060)	76	0.024 (0.035)
$K_2 \square C_8$	3	16	24	134008	26.060 (32.920)	0	-
$K_2 \square C_9$	3	18	27	833685	210.760 (285.460)	536	0.332 (0.507)
$K_2 \square C_{10}$	3	20	30	5212520	1719.770 (2258.790)	0	-

Tabela 7.2: Število strogih obhodov in antiparalelnih strogih obhodov v prizmah

graf	d	n	m	ST		aST	
				#	CPU čas (s)	#	CPU čas (s)
4-piramida	-	5	8	52	0.003 (0.004)	4	0.003 (0.003)
3-bipiramida	-	5	9	470	0.009 (0.018)	0	-

Tabela 7.3: Število strogih obhodov in antiparalelnih strogih obhodov v 4-piramidi in 3-bipiramidi

Vsi izračuni so bili narejeni s pomočjo algoritma 7.4 implementiranega s pomočjo matematičnega programskega orodja SageMath in podporo računalniških sredstev v SageMathCloud [80], kjer je na voljo 8GB bralno-pisalnega pomnilnika (RAM) in štiri centralno procesne enote (CPU).

7.6 Preverjanje obstoja antiparalelnega dvojnega obhoda v grafih

Ob koncu omenimo še nekoliko lažji problem—preverjanje, ali antiparalelni dvojni obhod v grafu sploh obstaja, in konstrukcijo vsaj enega izmed antiparalelnih dvojnih obhodov. Leta 1988 so Furst in sod. v [39] predstavili polinomski algoritem za preverjanje obstoja vpetega drevesa T z lastnostjo, da ima vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ sodo število povezav. Pri tem so uporabili metodo parnosti matroidov, natančneje algoritem za iskanje parnosti vpetih dreves, ki sta ga predstavila Gabow in Stalman v [41]. Slednji za neko particijo povezav grafa v množice velikosti 2 poišče drevo, ki vsebuje čimveč parov. Leta 1990 je Thomassen nadgradil omenjeni algoritem, da v polinomskem času preveri, ali graf vsebuje vpeto drevo T z lastnostjo, da je vsaka povezana komponenta ko-drevesa soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje najmanj 4.

Izrek 7.15 ([90, Theorem 3.4], [11, Theorem 3.1]) *Obstaja polinomski algoritem, ki preveri, ali graf G vsebuje vpeto drevo T, za katerega je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče v, $d_G(v) \geq 4$.*

Leta 1998 sta Benevant López in Soler Fernández v [11] popravila napako, ki jo je v svojem dokazu zagrešil Thomassen, in natančneje opisala, kako iz vpetega drevesa dobiti antiparalelni 1-stabilni obhod. Pri tem sta najprej opazila, da lahko vozlišča stopnje 2 ignoriramo, saj ima antiparalelni 1-stabilni obhod le eno možnost, kako jih prečka. Glavna ideja algoritma je, da v grafu G poišče podgraf H, induciran z vozlišči stopnje 3, in se vsaka povezava e grafa G subdivizira na enega izmed dveh načinov, odvisna od tega, ali je e del podgrafa H. V tako dobljenem grafu G' se subdivizirane povezave vedno označi tako, da imata enako oznako po dve povezavi, ki sta subdiviziji dveh v G sosednjih povezav. Tako ima G' particijo povezav v dve množici. Ker ima algoritem za problem parnosti dreves polinomsko časovno zahtevnost, zadostuje, da ima G vpeto drevo z želenimi lastnostmi iz izreka 7.15 natanko tedaj, ko ima G' vpeto drevo, sestavljeno iz parov povezav z enakimi oznakami. To nadalje dokažemo tako, da iz vpetega drevesa T' v G' sestavimo vpeto drevo T v G tako, da povezavo $e \in E(G)$ v T vstavimo natanko tedaj, ko je v vpetem drevesu T' vsebovana celotna pot, ki je v G' nadomestila e. Od tod potem sledi, da za poljubno povezavo e v povezani komponenti C ko-drevesa $G - E(T)$ nastopi še ena povezava. Ker e ni del T, na poti, ki je nadomestila e v G', obstaja povezava, ki ni vsebovana v T'. To pa posledično pomeni, da še ena z e sosednja povezava ni v T in je zato del povezane komponente C.

Če obravnavamo graf G z minimalno stopnjo $\delta(G) > d$ ter za H vzamemo podgraf, induciran na vozliščih stopnje $d+1$, lahko z istim algoritmom v polinomskem času poiščemo tudi vpeto drevo T, za katerega je vsaka povezana komponenta ko-drevesa $G - E(T)$ soda ali pa vsebuje vozlišče stopnje najmanj $2d+2$. Podobno kot v primeru antiparalelnih 1-stabilnih obhodov pri grafih z $\Delta(G) < 2d+2$ že iz lihosti izraza $|E(G)| - |V(G)| + 1$ sledi, da iskano vpeto drevo ne obstaja.

Nadalje sta pri konstrukciji antiparalelnega 1-stabilnega obhoda iz vpetega drevesa T Benevant López in Soler Fernández uporabila operaciji, poimenovani *križanje* in *3-zamenjava*, in z njuno pomočjo postopoma širila antiparalelni dvojni obhod v T na antiparalelni 1-stabilni obhod celotnega grafa. Obe za neko vozlišče v in antiparalelni dvojni obhod W ali množico obhodov $\mathcal{W}$ grafa G spreminjata, kako si pari povezav iz $E(v)$ sledijo v W. Prva tako združi dva obhoda iz $\mathcal{W}$ v enega in je poseben primer konstrukcije, predstavljene v dokazu leme 6.4. Druga pa za vozlišče v stopnje > 3 v antiparalelnem dvojnem obhodu W z opisano zamenjavo odstrani morebitne 1-ponovitve v v, ostali del W pa pri tem pusti nedotaknjen. Torej je le posebni primer konstrukcije, predstavljene v dokazu leme 6.5.

Iz ugotovitev v zgornjih dveh odstavkih sledi, da lahko tudi antiparalelne d-stabilne obhode višjega reda z uporabo nekoliko spremenjene konstrukcije (uporabo metod iz dokazov leme 6.4 in leme 6.5 namesto križanj in 3-zamenjav), opisane v [11], najdemo v polinomskem času. Prav tako to posledično velja tudi za E-predpisane stroge in d-stabilne obhode iz izrekov 6.3 in 6.8.

Poglavje 8

Dvojna pokritja in pokritveni obhodi

V tem poglavju predstavimo možnost nadaljnje uporabe rezultatov prejšnjih poglavij v teoriji grafov, posebej v teoriji pokritij grafov.

Množica podgrafov $\mathcal{G}$ grafa G je *pokritje grafa* G, če je vsaka povezava iz G vsebovana v vsaj enem grafu iz $\mathcal{G}$. Pri tem opozorimo, da grafi iz pokritja niso nujno paroma disjunktni niti niso paroma različni. Pokritje je sodo, če je vsak graf iz $\mathcal{G}$ sodi graf. Sodo pokritje $\mathcal{G}$ grafa G imenujemo *sodo dvojno pokritje* ali krajše *dvojno pokritje*, če je vsaka povezava iz G vsebovana v natanko dveh grafih iz $\mathcal{G}$.

8.1 Domneva o dvojnem pokritju

Glede obstoja dvojnega pokritja sta Szekeres [86] in Seymour [82] v sedemdesetih letih prejšnjega stoletja neodvisno podala naslednjo domnevo, ki še vedno ostaja nerešen problem. Pri tem bomo odslej (pa vse do konca poglavja 8) pri sodem dvojnem pokritju dodatno privzeli, da so vsi podgrafi, vsebovani v sodem dvojnem pokritju, cikli.

Domneva 8.1 ([82], [86]) *Vsak graf brez mostov ima sodo dvojno pokritje.*

Goddyn je kasneje predstavil še strožjo domnevo.

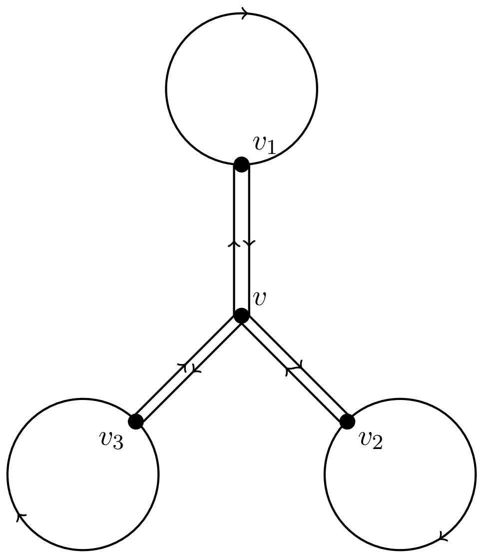
Domneva 8.2 *Naj bo G graf brez mostov in C poljuben cikel v njem. Potem ima G sodo dvojno pokritje, ki vsebuje C kot enega izmed podgrafov.*

Snarki so kubični grafi brez mostov in s kromatičnim indeksom, enakim 4. Slednje pomeni, da povezav v snarku ni moč pobarvati z le tremi barvami, ne da bi bili vsaj dve sosednji povezavi pobarvani enako (izrek 1.2 zagotavlja, da je kromatični indeks kubičnega grafa 3 ali 4).

Jaeger [52] je dokazal, da snarki predstavljajo edini nerešen primer pri dokazovanju domneve 8.1. Ta pogoj so kasneje še omejili Goddyn [42] ter Alspach in sod. [2], ki so dokazali, da je notranji obseg grafa brez mostov, ki nima sodega dvojnega pokritja, najmanj 8 in da takšen graf zagotovo vsebuje subdivizijo Petersenovega grafa.

8.2 Pokritveni obhodi

Naj bo G graf in v njegovo poljubno vozlišče stopnje d, kjer je $d \geq 2$. Označimo sosede vozlišča v z $v_1, \ldots, v_d$. Pravimo, da ima dvojni obhod W grafa G *povratek* v vozlišču v, če za katerikoli i, $1 \leq i \leq d$, velja naslednje: ko W zapusti v po povezavi vv_i, se vrne v v prek povezave v_iv, preden bi prečkal katero drugo izmed povezav v_jv (ali vv_j) $1 \leq j \leq d$ in $i \neq j$. Primer povratka je moč videti na sliki 8.1.



Slika 8.1: Dvojni obhod s tremi povratki v vozlišču v

Opozorimo, da povratek v vozlišču v dvojnega obhoda W ne pomeni nujno tudi povratka v vozlišču v dvojnega obhoda W', ki ga dobimo tako, da W prečkamo v nasprotni smeri.

Definicija 8.3 Pokritveni obhod *grafa G je* 1*-stabilni obhod brez povratkov.*

Ker je v paralelnem dvojnem obhodu vsaka povezava uporabljena dvakrat v isti smeri, hitro sledi, da je vsak paralelni 1-stabilni obhod (posledično tudi vsak paralelni d-stabilni obhod, kjer je $d > 1$) hkrati pokritveni obhod. To pa ima za posledico naslednje.

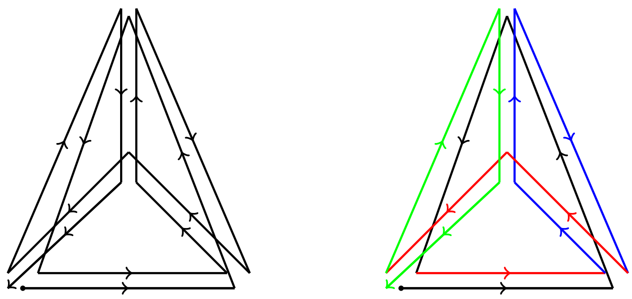
Posledica 8.4 *Vsak Eulerjev graf vsebuje pokritveni obhod.*

Dokaz. Po napisanem zgoraj zadošča, da pokažemo, da vsak Eulerjev graf vsebuje paralelni 1-stabilni obhod, kar pa sledi iz izreka 5.4. □

Poglavje zaključimo z dokazom leme, ki bi v prihodnosti (zadoščalo bi pokazati, da vsak snark vsebuje pokritveni obhod) lahko pripomogla k dokazu domneve 8.1.

Lema 8.5 *Če graf G vsebuje pokritveni obhod, potem ima tudi sodo dvojno pokritje.*

Dokaz. Naj bo W pokritveni obhod grafa G. Konstruirajmo množico podgrafov $\mathcal{G}$ grafa G z naslednjim postopkom. V grafu G izberemo poljubno začetno vozlišče v. Naj bo u takšen sosed vozlišča v v G, da W vsaj enkrat prečka povezavo $e = uv$ v smeri od v proti u. Sledimo pokritvenemu obhodu W in si pri tem zapomnimo, katera vozlišča in povezave (ter v kakšnem vrstnem redu) smo pri tem prečkali. Vsakič, ko naletimo na vozlišče, v katerem smo že bili, označimo ga z x, podgraf, porojen s povezavami, ki smo jih prečkali med obema ponovitvama vozlišča x skupaj z vozliščem x, dodamo v $\mathcal{G}$. Morebitni ostanek (vozlišča in povezave), ki smo jih prečkali pred prejšnjim obiskom vozlišča x in še niso bili dodana v $\mathcal{G}$, uporabimo pri naslednjem podgrafu, ki ga bomo sestavili. Prav tako vanj dodamo tudi vozlišče x. Končamo, ko prehodimo celoten pokritveni obhod W in se ponovno vrnemo v vozlišče v. Konstrukcija je prikazana na sliki 8.2.



Slika 8.2: Primer konstrukcije sodega dvojnega pokritja iz pokritvenega obhoda v tetraedru (enako obarvane povezave na desnem grafu pripadajo istemu podgrafu pokritja)

Trdimo, da je tako konstruirana množica grafov $\mathcal{G}$ sodo dvojno pokritje. Ker W prečka vsako povezavo in ker vsako povezavo iz W dodamo v $\mathcal{G}$ kot del nekega podgrafa, je vsaka povezava iz G vsebovana v vsaj enem grafu iz $\mathcal{G}$. Množica $\mathcal{G}$ je torej pokritje grafa G.

Ker se vsaka povezava v W pojavi dvakrat, se vsaka povezava dvakrat pojavi tudi v množici $\mathcal{G}$ in je posledično vsebovana v največ dveh grafih iz $\mathcal{G}$. Recimo, da obstaja povezava, ki nastopi v le enem grafu iz $\mathcal{G}$ in jo označimo z $e = vu$. Iz predstavljene konstrukcije je razvidno, da vsakič, ko se vrnemo v vozlišče, v katerem smo že bili, ustvarimo nov podgraf, ki ga dodamo v množico $\mathcal{G}$. Edini primer, ko lahko povezava v nekem grafu nastopi dvakrat, je, če si vozlišča v W sledijo v vrstnem redu $A \to v \to u \to B \to u \to v$, pri čemer sta A in B podmnožici vozlišč grafa $V(G)$, ki ne vsebujeta vozlišč u ali v. V tem primeru bi namreč v $\mathcal{G}$ najprej dodali podgraf, porojen z $u \to B \to u$, $A \to v \to u$ pa bi ostal kot ostanek, ki bi mu ob vrnitvi v u morali dodati še eno kopijo povezave $e = vu$. A takšen W bi imel povratek v vozlišču u, kar pa je v protislovju s predpostavko, da je W pokritveni obhod, od koder sledi, da je množica $\mathcal{G}$ res sodo dvojno pokritje grafa G. $\square$

Poglavje 9

Zaključek

V zaključku povzamemo nekatere najzanimivejše in najpomembnejše rezultate, predstavljene v prejšnjih poglavjih. Pri tem izpostavimo predvsem:

(i) matematični model samosestavljivh struktur, ki so ga v praksi uspešno uporabili Gradišar in sod. v [46], Kočar in sod. v [55, 56] ter Ljubetič in sod. v [61] (matematični model je objavljen tudi v [33, 53]);

(ii) novo (naravno porojeno) ekvivalenčno relacijo med vložitvami grafov (definicija 7.12), ki predstavlja osnovo algoritma za iskanje neekvivalenčnih dvojnih obhodov in pomaga pri konstrukciji samosestavljivih struktur z optimalnimi lastnostmi ([6, 7]);

(iii) popolno karakterizacijo grafov, ki vsebujejo dvojne, stroge in d-stabilne obhode ter paralelno in antiparalelno obliko le-teh ([4, 33, 77, 78]);

(iv) teoretične rezultate, ki bi v prihodnosti lahko služili pri nadaljnjem raziskovanju lastnosti psevdoploskev in pri dokazovanju domneve o dvojnih pokritjih (domneva 8.1) (povezava med psevdoploskvami in antiparalelnimi d-stabilnimi obhodi je objavljena v [77]).

9.1 Matematični model samosestavljive strukture

Polieder P, ki ga sestavlja polipeptidna veriga, naravno predstavimo z grafom poliedra $G(P)$. Samosestavljiva struktura nastane tako, da se odseki, ki tvorijo ovite vijačnice, povežejo v dimere in hkrati tudi zaklenejo v stabilno poliedrsko strukturo. Tako vsaka povezava grafa $G(P)$ v tehnološkem smislu predstavlja dva odseka, ki tvorita dimer ovitih vijačnic.

Postopek za konstruiranje samosestavljih struktur je sledeč: (i) v grafu $G(P)$ poiščemo strogi obhod W in (ii) identificiramo pare povezav v W, kar naj bi za rezultat dalo začetni graf $G(P)$. Povezave grafa $G(P)$ na tak način identificiramo s parom odsekov, ki tvori dimer, težje pa je natančno predstaviti vozlišča grafa—pari odsekov, ki zaporedoma ležijo v verigi, naj bi se stikali tudi v vozliščih grafa. Pogoj, da je strogi obhod brez netrivialnih ponovitev, zagotavlja, da vozlišče ne razpade v množico več vozlišč nižje stopnje. Primer takšnega razpada je med drugim prikazan na sliki 1.1.

Matematični model strogega obhoda hkrati omogoča, da na polipeptidno strukturo, ki je predstavljena z grafom G z minimalno stopnjo $\delta(G) \geq 3$, naknadno obesimo dodatne reaktivne dele (kar bi lahko vodilo do vozlišč stopnje 1 ali 2).

Izrek 2.4 o karakterizaciji grafov, ki vsebujejo stroge obhode, ter njegova posledica 2.5, zagotavljata, da je (vsaj v teoriji) vsak graf in posledično tudi vsak polieder možno konstruirati iz verig odsekov, ki tvorijo ovite vijačnice. Da je to tudi v praksi mogoče, pa je odvisno od ortogonalnosti uporabljenih peptidov—lastnosti, da vsak izmed peptidov dimer tvori le z natanko tistim peptidom, ki bo, v za matematični model uporabljenem strogem obhodu, ležal na isti povezavi grafa G. Izbira primernih peptidov predstavlja kombinatorični problem (problem izpolnjevanja omejitev). Ob tem na verjetnost za nastanek želene samosestavljive strukture vpliva tudi zaporedje, v katerem so peptidi povezani v verigo.

Po drugi strani je dolgo časa veljalo, da so lahko kompleksne strukture DNK sestavljene samo iz več verig DNK, dokler niso Kočar in sod. [56] demonstrirali, da je moč polieder sestaviti tudi iz ene verige DNK. Pri tem so za matematični model uporabili antiparalelni strogi obhod. Ključno vlogo v tem primeru igra dejstvo, da komplementarne pare vedno tvorijo nasprotno usmerjeni odseki verige DNK, kar pa v našem matematičnem modelu ustreza antiparalelnim povezavam in posledično antiparalelnim strogim obhodom.

9.2 Raznolikost dvojnih obhodov

Graf G vsebuje več strogih obhodov, že tetraeder ima tri, ko odmislimo začetno vozlišče in smer obhoda, kot je Klavžar analitično dokazal v [46]. Zato želimo v praksi za dani polieder izbrati strogi obhod, ki bo imel največjo verjetnost, da se uspešno sestavi v samosestavljivo nanostrukturo želene oblike. Prvi korak na poti k temu je, da poiščemo vse stroge obhode v grafu poliedra $G(P)$. Algoritem, opisan v razdelku 7.4, ki temelji na topoloških lastnostih grafa, se izkaže za izredno uporabnega, saj je za kubične grafe, ki predstavljajo glavnino poliedrov, trenutno zanimivih v praksi, njegova časovna zahtevnost le $O(mf)$, pri čemer m predstavlja število povezav, f pa število lic grafa $G(P)$ v neki izbrani vložitvi.

9.3 Karakterizacija grafov z dvojnimi obhodi

Karakterizacija grafov, povezanih z različnimi dvojnimi obhodi, je zaradi uporabe v topološki teoriji grafov matematike zanimala že dolgo časa. Tako je Ore že leta 1951 izpostavil problem karakterizacije grafov, ki vsebujejo antiparalelne 1-stabilne obhode, a odgovor dobil šele slabih 40 let kasneje (delno Troy [92], popolno Thomassen [90]).

Že pred tem so karakterizacijo grafov, ki vsebujejo 1-stabilne obhode, neodvisno predstavili Sabidussi [79] ter Eggleton in Skilton [26].

V ta namen v tabeli 9.1 zberemo pogoje, ki jih mora graf izpolnjevati, da vsebuje dvojni, strogi ali d-stabilni obhod ter paralelno in antiparalelno obliko le-teh. Podobni (a ne popolni) tabeli je moč najti tudi v [53] in [77]. Pri tem ponovimo, da je XT vpeto drevo grafa G z lastnostjo, da ima vsaka komponenta njegovega ko-drevesa sodo število povezav, medtem ko je $XT(d)$ vpeto drevo grafa G z lastnostjo, da je vsaka komponenta njegovega ko-drevesa soda ali pa vsebuje vsaj eno vozlišče stopnje vsaj d.

OBHOD	TIP POVEZAVE		
	brez	paralelni	antiparalelni
dvojni	$\forall G$ (Trditev 1.5)	Eulerjev (Trditev 5.1)	$\forall G$ (Trditev 5.6)
strogi	$\forall G$ (Izrek 2.4)	Eulerjev (Izrek 5.3)	$\exists XT$ (Izrek 5.10)
d-stabilni	$\delta(G) > d$ (Trditev 3.5)	$\delta(G) > d \wedge$ Eulerjev (Izrek 5.4)	$\delta(G) > d \wedge \exists XT(2d+2)$ (Izrek 5.12)

Tabela 9.1: Potrebni pogoji, da graf vsebuje dvojni obhod s podanimi lastnostmi

Pogoji iz tabele 9.1 so povzeti tudi v izrekih 6.2, 6.3 in 6.8, ki govorijo o E-predpisanih obhodih, saj so paralelni in antiparalelni dvojni obhodi robni primeri le-teh.

9.4 Psevdoploskve

V poglavju 2 smo najprej pokazali, da graf G vsebuje strogi obhod natanko tedaj, ko zanj obstaja vložitev z enim licem v neko ploskev. Podobno smo v razdelku 5.2 pokazali, da ima graf G antiparalelni strogi obhod natanko tedaj, ko zanj obstaja vložitev z enim licem v neko orientabilno ploskev. Potem smo uporabili že znane karakterizacije grafov, ki imajo vložitve z enim licem (Behdad in sod. v [10] ter Edmonds v [25]), da smo karakterizirali grafe, ki imajo stroge in antiparalelne stroge obhode. Izkaže se, da lahko nasprotno izrek 5.12, ki govori o antiparalelnih d-stabilnih obhodih, uporabimo za karakterizacijo grafov z drugimi zanimivimi lastnostmi.

Stisnjeni odprti disk je topološki prostor, ki ga dobimo, če v k kopijah *odprtega diska* identificiramo njihova središča v eno točko. *Psevdoploskev* nadalje dobimo z omilitvijo definicije 1.11—za razliko od ploskev pri psevdoploskvah dovolimo, da so okolice točk poleg odprtih diskov in poldiskov homeomorfne tudi stisnjenim odprtim diskom. Psevdoploskev lahko tako dobimo na enega izmed naslednjih načinov:

(i) iz ene ploskve z identifikacijo njenih točk;

(*ii*) iz dveh ali več ploskev, v katerih paroma identificiramo točke na eni ploskvi s točkami na drugih ploskvah;

(*iii*) s kombinacijo prejšnjih dveh načinov.

Psevdoploskev je *orientabilna psevdoploskev* natanko tedaj, ko so vse ploskve, uporabljene med zgoraj opisano konstrukcijo, orientabilne. O vložitvah z enim licem lahko seveda govorimo le v primeru, ko je psevdoploskev konstruirana na način, opisan v točki (*i*).

Izrek 5.12 tako karakterizira tudi grafe, ki imajo vložitev z enim licem v psevdoploskve, dobljene iz orientabilne ploskve z identifikacijo njenih točk, tako da za vsako vozlišče v in vsako njegovo okolico N, ki je homeomorfna odprtemu disku, velja, da ima v $d+1$ sosedov v N. Pri tem se novo konstruirane točke ujemajo z vozlišči z netrivialnimi ponovitvami. Ob tem omenimo, da ima v v primeru, ko je bil v, dobljen z identifikacijo k kopij odprtih diskov v stisnjen odprti disk, k disjunktnih okolic homeomorfnih odprtemu disku.

Takšna karakterizacija je pomembna, ker je o vložitvah grafov v psevdoploskve, za razliko od vložitev grafov v ploskve, znanega dokaj malo. Nekaj rezultatov je vseeno moč najti v [1] avtorja Abramsa in Slilatyja ter v [71] avtorja Petroelja.

Literatura

[1] L. Abrams, D. C. Slilaty, *Algebraic characterizations of graph imbeddability in surfaces and pseudosurfaces*, J. Knot Theory Ramifications **15** (2006), 681–694.

[2] B. Alspach, L. Goddyn, C. Q. Zhang, *Graphs with the circuit cover property*, Trans. Amer. Math. Soc. **344** (1994), 131–154.

[3] D. Archdeacon, C. P. Bonnington, J. Širáň, *A Nebeský-type characterization for relative maximum genus*, J. Combin. Theory Ser. B **73** (1998), 77–98.

[4] D. Archdeacon, L. A. Goddyn, J. Rus, *E-restricted double traces*, v pripravi.

[5] N. Bašić, *Algebraic approach to several families of chemical graphs*, doktorska disertacija, Univerza v Ljubljani, 2016.

[6] N. Bašić, D. Bokal, T. Boothby, J. Rus, *An algebraic approach to enumerating non-equivalent double traces in graphs*, MATCH Commun. Math. Comput. Comput. Chem. (2017), v tisku.

[7] N. Bašić, D. Bokal, T. Pisanski, J. Rus, *Graph embeddings yield natural strong trace realizations*, v pripravi.

[8] N. Bašić, R. Jerala, T. Pisanski, *Stable polyhedral self-assembly from dimers*, v pripravi.

[9] V. Batagelj, T. Pisanski, *On partially directed eulerian multigraphs*, Publ. Ins. Math. (Beograd) (N. S.) **25 (39)** (1977), 16–24.

[10] M. Behzad, G. Chartrand, L. Lesniak-Foster, *Graphs and Digraphs*, Prindle, Weber and Schmidt, Boston, 1979.

[11] E. Benevant López, D. Soler Fernández, *Searching for a strong double tracing in a graph*, Top **6** (1998), 123–138.

[12] D. Bhatia, S. Mehtab, R. Krishnan, S. S. Indi, A. Basu, Y. Krishnan, *Icosahedral DNA nanocapsules by modular assembly*, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **48** (2009), 4134–4137.

[13] R. F. Boyer, *Concepts in Biochemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001.

[14] S. Božič, T. Doles, H. Gradišar, R. Jerala, *New designed protein assemblies*, Curr. Opin. Chem. Bio. (2013), 940–945.

[15] J. L. Brenner, B. C. Lindon, *Doubly eulerian trails on rectangular grids*, J. Graph Theory **8** (1984), 379–385.

[16] H. J. Broersma, F. Göbel, *k-Traversable Graphs*, University of Twente, 1987.

[17] L. Campagna, P. F. Lemieux, *The snow ploughing problem solved by a graph theory algorithm*, Civil Eng. Systems **1** (1984), 337–341.

[18] J.-H. Chen, N. C. Seeman, *Synthesis from DNA of a molecule with the connectivity of a cube*, Nature **350** (1991), 631–633.

[19] X.-S. Cheng, S.-Y. Liu, H. Zhang, W.-Y. Qiu, *Fabrication of a family of pyramidal links and their genus*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **63** (2010), 623–636.

[20] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, C. Stein, *Introduction to Algorithms*, MIT Press, 3rd ed., 2009.

[21] S. M. Douglas, H. Dietz, T. Liedl, B. Högberg, F. Graf, W. M. Shih, *Self-assembly of DNA into nanoscale three-dimensional shapes*, Nature **459** (2009), 414–418.

[22] J.-W. Duan, Z. Zheng, P.-P. Zhou, W.-Y. Qiu, *The architecture of DNA Sierpinski links*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **67** (2012), 817–832.

[23] J.-W. Duan, W. Li, X.-W. Li, G. Hu, W.-Y. Qiu, *Molecular design of DNA polyhedra based on genus*, J. Math. Chem. **52** (2014), 2380–2394.

[24] R. L. Duda, *Protein chainmail*, Cell **94** (1998), 55–60.

[25] J. Edmonds, *On the surface duality of linear graphs*, J. Res. Natl. Bur. Stand. Sec. B: Math. & Math. Phys. **69B** (1965), 121.

[26] R. B. Eggleton, D. K. Skilton, *Double tracings of graphs*, Ars Combin. **17A** (1984), 307–323.

[27] R. B. Eggleton, D. K. Skilton, *Graphs with eulerian chains*, Bull. Austral. Math. Soc. **29** (1984), 389–399.

[28] J. Ellis-Monaghan, *Transition polynomials, double covers, and biomolecular computing*, Congressus Numerantium **166** (2004), 181–192.

[29] J. Ellis-Monaghan, A. McDowell, I. Moffatt, G. Pangborn, *DNA origami and the complexity of Eulerian circuits with turning costs*, Nat. Comput. **14** (2015), 491–503.

[30] L. Euler, *Solutio problematis ad geometrian situs pertinentis*, Commentarii Academiae Scientarum Imperialis Petropolitanae **8** (1741), 128–140.

[31] H. Fan, X. Zhu, *Oriented walk double covering and bidirectional double tracing*, J. Graph Theory **29** (1998), 89–102.

[32] I. A. Faradžev, *Constructive enumeration of combinatorial objects*, Problémes combinatoires et théorie des graphes, Colloq. Internat. CNRS, Orsay (1976), 131–135.

[33] G. Fijavž, T. Pisanski, J. Rus, *Strong traces model of self-assembly polypeptide structures*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **71** (2014), 199–212.

[34] H. Fleischner, *Eulerian graphs*, v: Selected Topics in Graph Theory 2 (L. W. Beineke, R. J. Wilson, ured.), Academic Press, London-New York 1983, 17–53.

[35] H. Fleischner, *Eulerian Graphs and Related Topics. Part 1. Vol. 1.*, North-Holland, Amsterdam, 1990.

[36] H. Fleischner, *Eulerian Graphs and Related Topics. Part 1. Vol. 2.*, North-Holland, Amsterdam, 1991.

[37] L. R. Ford Jr., D. R. Fulkerson, *Flows in Networks*, Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1962.

[38] P. W. Fowler, K. M. Rogers, *Spiral codes and Goldberg representations of icosahedral fullerenes and octahedral analogues*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. **41** (2001), 108–111.

[39] M. L. Furst, J. L. Gross, L. A. McGeoh, *Finding a maximum-genus graph imbedding*, J. Assoc. Comput. Mach. **35** (1988), 523–534.

[40] H. N. Gabow, *An efficient implementation of Edmond's algorithm for maximum matching on graphs*, J. Assoc. Comput. Mach. **23** (1976), 221–234.

[41] H. N. Gabow, M. Stallman, *An augmenting path algorithm for linear matroid parity*, Combinatorica **6** (1986), 123-150.

[42] L. Goddyn, *A girth requirement for the double cycle cover conjecture*, v: Annals of Discrete Mathematics 27 - Cycles in Graphs (B. R. Alspach, C. D. Godsil, ured.), North-Holland Mathematics Studies 27 (1985), 13–26.

[43] C. Godsil, G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Graduate Texts in Mathematics vol. 207, Springer-Verlag, New York, 2001.

[44] R. P. Goodman, R. M. Berry, A. J. Turberfield, *The single-step synthesis of a DNA tetrahedron*, Chem. Commun. **12** (2004), 1372–1373.

[45] H. Gradišar, R. Jerala, *De novo design of orthogonal peptide pairs forming parallel coiled-coil heterodimers*, J. Peptide Sci. **17** (2011), 100–106.

[46] H. Gradišar, S. Božič, T. Doles, D. Vengust, I. Hafner Bratkovič, A. Mertelj, B. Webb, A. Šali, S. Klavžar, R. Jerala, *Design of a single-chain polypeptide tetrahedron assembled from coiled-coil segments*, Nature Chem. Bio. **9** (2013), 362–366.

[47] J. L. Gross, T. W. Tucker, *Topological Graph Theory*, Wiley-Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1987.

[48] U. B. Hagemann, J. M. Mason, K. M. Müller, K. M. Arndt, *Selectional and mutational scope of peptides sequestering the Jun-Fos coiled-coil domain*, J. Mol. Biol. (2008), 73–88.

[49] X. He, L. Dong, W. Wang, N. Lin, Y. Mi, *Folding single-stranded DNA to form the smallest 3D DNA triangular prism*, Chem. Commun. **49** (2013), 2906–2908.

[50] Y. He, T. Ye, M. Su, C. Zhang, A. E. Ribbe, W. Jiang, C. Mao, *Hierarchical self-assembly of DNA into symmetric supramolecular polyhedra*, Nature **452** (2008), 198–201.

[51] Y. Q. Huang, Y. P. Liu, Y. M. Chu, *Bidirectional double tracings and the maximum genus of a graph* (v kitajščini), Acta Math. Sci. Ser. A Chin. Ed. **24** (2004), 530–536.

[52] F. Jaeger, *A survey of the cycle double cover conjecture*, v: Annals of Discrete Mathematics 27 - Cycles in Graphs (B. R. Alspach, C. D. Godsil, ured.), North-Holland Mathematics Studies 27 (1985), 1–12.

[53] S. Klavžar, J. Rus, *Stable traces as a model for self-assembly of polypeptide nanoscale polyhedrons*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **70** (2013), 317–330.

[54] J. Kleinberg, É. Tardos, *Algorithm Design*, Addison-Wesley, 2005.

[55] V. Kočar, S. Božič Abram, T. Doles, N. Bašić, H. Gradišar, T. Pisanski, R. Jerala, *TOPOFOLD, the designed modular biomolecular folds: polypeptide-based molecular origami nanostructures following the footsteps of DNA*, WIREs Nanomed. Nanobiotechnol. **7** (2015), 218–237.

[56] V. Kočar, J. S. Schreck, S. Čeru, H. Gradišar, N. Bašić, T. Pisanski, J. P. K. Doye, R. Jerala, *Design principles for rapid folding of knotted DNA nanostructures*, Nature Comm. **7** (2016), 1–8.

[57] D. C. Kozen, *The Design and Analysis of Algorithms*, Springer, 1992.

[58] D. König, *Theorie der Endlichen und Unedlichen Graphen*, Chelsea Publ. Comp., New York, 1950 (prvič objavljeno v Akad. Verlagsges., Leipzig, 1936).

[59] S. Kundu, *Bounds on the number of disjoint spanning trees*, J. Combin. Theory Ser. B **17** (1974), 199–203.

[60] S.-Y. Liu, H. Zhang, W.-Y. Qiu, *The HOMFLY polynomial for a family of polyhedral links*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **67** (2012), 65–90.

[61] A. Ljubetič, I. Drobnak, H. Gradišar, R. Jerala, *Design the structure and folding pathway of modular topological bionanostructures*, Chem. Commun. **52** (2016), 5220–5229.

[62] J. M. Mason, M. A. Schmitz, K. M. Müller, K. M. Arndt, *Semirational design of Jun-Fos coiled coils with increased affinity: Universal implications for leucine zipper prediction and design*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **103** (2006), 8989–94.

[63] B. D. McKay, A. Piperno, *Practical graph isomorphism, II*, J. Symbolic Comput. **60** (2014), 94–112.

[64] B. Mohar, C. Thomassen, *Graphs on Surfaces*, The Johns Hopkins University Press, 2001.

[65] C. St. J. A. Nash-Williams, *Edge-disjoint spanning trees of finite graphs*, J. London Math. Soc. **36** (1961), 445–450.

[66] C. St. J. A. Nash-Williams, *Acyclic detachments of graphs*, v: Graph Theory and Combinatorics (R. J. Wilson, ured.), Pitman, San Francisco (1979), 87–97.

[67] C. St. J. A. Nash-Williams, *Connected detachments of graphs and generalized euler trails*, J. London Math. Soc. **31** (1985), 17–29.

[68] C. St. J. A. Nash-Williams, *Detachments of graphs and generalized Euler trails*, v: Surveys in Combinatorics (I. Anderson, ured.), Cambridge Univ. Press, London (1985), 137–151.

[69] C. St. J. A. Nash-Williams, *Amalgamations of almost regular edge-colourings of simple graphs*, J. Combin. Theory Ser. B **43** (1987), 322–342.

[70] O. Ore, *A problem regarding the tracing of graphs*, Elem. Math. **6** (1951), 49–53.

[71] W. S. Petroelje, *Imbedding graphs in pseudosurfaces*, magistrsko delo, Western Michigan University, 1971.

[72] T. Pisanski, *Vložitve grafov v sklenjene ploskve*, magistrsko delo, Univerza v Ljubljani, 1978.

[73] T. Pisanski, P. Potočnik, *Graphs on surfaces*, v: Handbook of Graph Theory (J. L. Gross, J. Yellen, ured.), CRC Press LLC (2003), 611–624.

[74] T. Pisanski, A. Žitnik, *Representing graphs and maps*, v: Topics in Topological Graph Theory (L. W. Beineke, R. J. Wilson, ured.), Encyclopedia Math. Appl., vol. 128, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2009), 151–180.

[75] R. C. Read, *Every one a winner*, Annals Discrete Math. **2** (1978), 107–120.

[76] G. Ringel, *The combinatorial map theorem*, J. Graph Theory **1** (1977), 141–155.

[77] J. Rus, *Antiparallel d-stable traces and a stronger version of Ore problem*, J. Math. Biol. (2016), v tisku, DOI: 10.1007/s00285-016-1077-2.

[78] J. Rus, *Parallelism of stable traces*, poslano v objavo (2016).

[79] G. Sabidussi, *Tracing graphs without backtracking*, Operations Research Verfahren XXV, Symp. Heidelberg, Teil **1** (1977), 314–332.

[80] The Sage Developers, Sage Mathematics Software (Version 7.4.(2016-10-18)) (2016), `http://www.sagemath.org`.

[81] N. C. Seeman, *At the crossroads of chemistry, biology, and materials: structural DNA nanotechnology*, Chem Biol. **10** (2003), 1151–1159.

[82] P. D. Seymour, *Sums of circuits*, v: Graph Theory and Related Topics (J. A. Bondy, U. S. R. Murty, ured.), Academic Press, New York 1979, 341–355.

[83] W. M. Shih, J. D.Quispe, G. F. Joyce, *A 1.7-kilobase single-stranded DNA that folds into a nanoscale octahedron*, Nature **427** (2004), 618–621.

[84] S. Stahl, *Generalized embedding schemes*, J. Graph Theory **2** (1978), 41–52.

[85] E. Steinitz, *Polyeder und Raumeinteilungen* (v Nemščini), Encyclopédie der mathematischen Wissenschaften, Band **3** (Geometries) (1922), 1–139.

[86] G. Szekeres, *Polyhedral decomposition of cubic graphs*, Bull. Austral. Math. Soc. **8** (1973), 367–387.

[87] M. Škoviera, R. Nedela, *The maximum genus of a graph and doubly eulerian trails*, Boll. Unione Mat. Ital. **7** (1990), 541–551.

[88] G. Tarry, *Le problème des labyrinthes*, Nouv. Ann. **3** (1895), 187–190.

[89] C. Thomassen, *Retracting-free double tracings of graphs*, Ars Combin. **19** (1985), 63–68.

[90] C. Thomassen, *Bidirectional retracting-free double tracings and upper embeddability of graphs*, J. Combin. Theory Ser. B **50** (1990), 198–207.

[91] C. Thomassen, *Embeddings and minors*, v: Handbook of Combinatorics (R. L. Graham, M. Grötschel, L. Lovász, ured.), North-Holland (1995), 302–349.

[92] D. J. Troy, *On traversing graphs*, Amer. Math. Monthly **73** (1966), 497–499.

[93] W. T. Tutte, *On the problem of decomposing a graph into n connected factors*, J. London Math. Soc. **36** (1961), 221–230.

[94] P. D. Vestergaard, *Doubly traversed euler circuits*, Arch. Math. **26** (1975), 222–224.

[95] K. Wagner, *Graphentheorie* (v nemščini), BI-Hochsultaschenbücher, Bd. 248, Bibliograph. Inst. AG, Mannheim, 1970.

[96] J. Wang, G. Hu, M. Ji, *Almost parallel strong trace model of self-assembly polypeptide nanostructure*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **77** (2017), 783–798.

[97] J. Wang, X. Jin, M. Ji, *On the existence of F-strong trace of a graph when F induces a forest*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **77** (2017), 799–812.

[98] W. Watkins, *Introduction to Graph Theory*, Oliver & Boyd, 1972.

[99] D. B. West, *Introduction to Graph Theory*, Prentice Hall, Upper Saddle River, 1996.

[100] A. T. White, *Graphs of Groups on Surfaces*, North-Holland Mathematics Studies, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 2001.

[101] N. H. Xuong, *How to determine the maximum genus of a graph*, J. Combin. Theory Ser. B **26** (1979), 217–225.

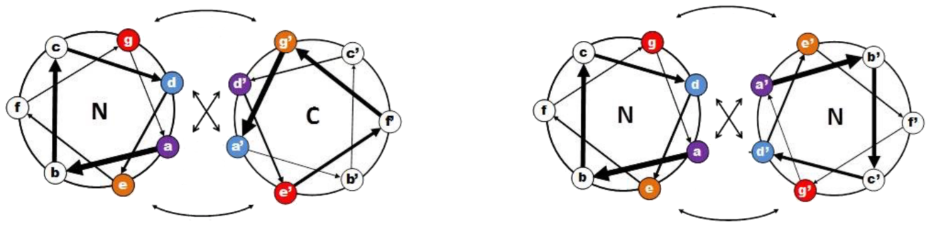
[102] N. H. Xuong, *Upper-embeddable graphs and related topics*, J. Combin. Theory Ser. B **26** (1979), 226–232.

[103] N. Zeilberger, A. Giorgetti, *A correspondence between rooted planar maps and normal planar lamba terms*, Log. Methods Comput. Sci. **11** (2015), 1–39.

[104] C. Zhang, S. H. Ko, M. Su, Y. Leng, A. E. Ribbe, W. Jiang, C. Mao, *Symmetry controls the face geometry of DNA polyhedra*, J. Amer. Chem. Soc. **131** (2009), 1413–1415.

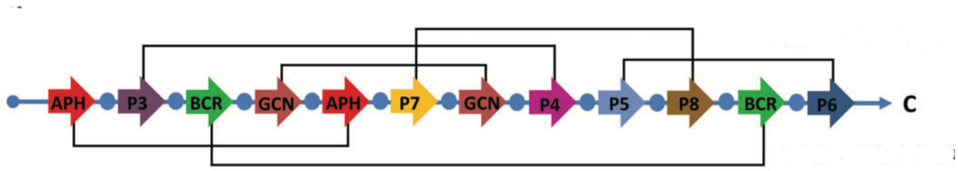
[105] J. Zimmermann, M. P. J. Cebulla, S. Mönninghoff, G. von Kiedrowski, *Self-assembly of a DNA dodecahedron from 20 trisoligonucleotides with C_{3h} linkers*, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **47** (2008), 3626–3630.

Dodatek

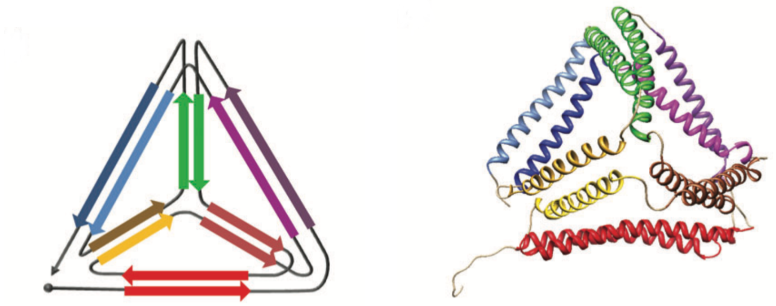


(a) Antiparalelna orientacija (b) Paralelna orientacija

Slika A.1: Prikaz elektrostatskih in hidrofobnih interakcij med heptadama dveh peptidov, zduženih v ovito vijačnico, ki vplivajo na njeno stabilnost. Pri tem v primeru antiparalelne orientacije elektrostatske interakcije nastopijo med aminokislinami na mestih e in e' ter g in g', hidrofobne interakcije pa med aminokislinami na mestih a in d' ter d in a'. V primeru paralelne orientacije se elektrostatske interakcije pojavijo med aminokislinami na mestih e in g' ter g in e', hidrofobne interakcije pa med aminokislinami na mestih a in a' ter d in d'.

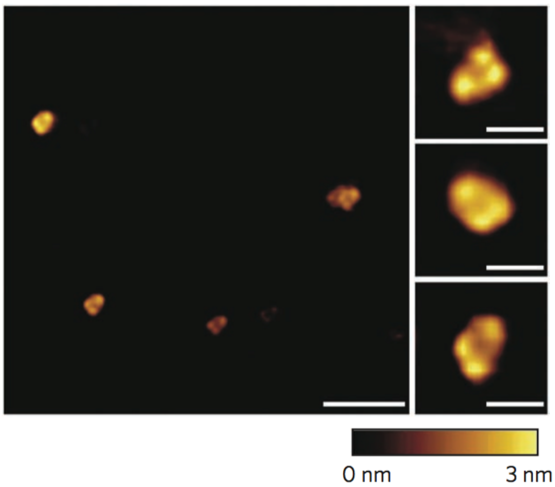


Slika A.2: 12 odsekov (peptidov), ki tvorijo ovite vijačnice s fleksibilinimi povezovalci, povezanimi v polipeptidno verigo, ki je bila v [46] uporabljena za konstrukcijo samosestavljivega tetraedra `TET12`. Pri tem `P3` in `P4`, `GNC`$_{\mathtt{sh}}$, `P7` in `P8` ter `P5` in `P6` tvorijo 4 paralelne dimere, `APH` ter `BCR` pa 2 antiparalelna dimera.



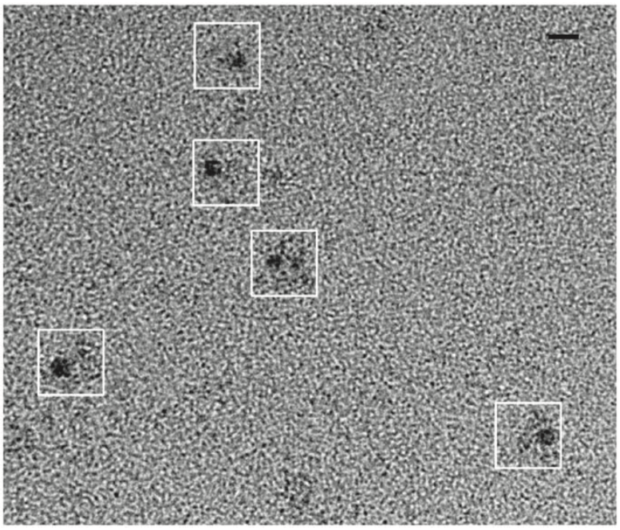
(a) Shematski prikaz (b) Molekularni model

Slika A.3: Shematski prikaz in molekularni model tetraedra, katerega povezave tvorijo ortogonalni pari ovitih vijačnic polipeptidne verige, prikazane na sliki A.2

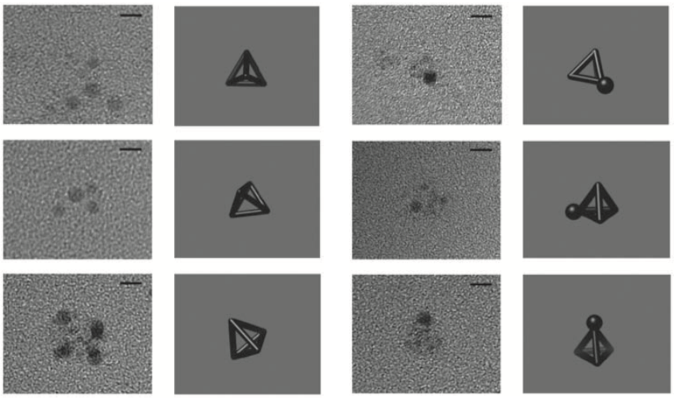


Slika A.4: Polipeptidna tetraedrska nanostruktura prikazana z mikroskopijo na atomsko silo (AFM). Skala na levi sliki je 100 nm, pri povečanih slikah na desni pa 20 nm[1]

[1]Slika polipeptidne tetraedrske nanostrukture z mikroskopijo na atomsko silo (AFM) je bila pridobljena pri prof. dr. Romanu Jerali.



(a)



(b)

Slika A.5: Polipeptidna tetraedrska nanostruktura prikazana z mikroskopijo na prenos elektronov (TEM). Pri tem so odseki prikazani na slikah (b), na sliki (a) označeni z belimi kvadrati. Skala na vseh slikah je 5 nm.[2]

[2]Slika polipeptidne tetraedrske nanostrukture z mikroskopijo na prenos elektronov (TEM) je bila pridobljena pri prof. dr. Romanu Jerali.

aminokislina	tročrkovna oznaka	enočrkovna oznaka
alanin	Ala	A
cistein	Cys	C
aspartat/asparaginska kislina	Asp	D
glutamat/glutaminska kislina	Glu	E
fenilalanin	Phe	F
glicin	Gli	G
histidin	His	H
izolevcin	Izo	I
lizin	Lys	K
levcin	Leu	L
metionin	Met	M
asparagin	Asn	N
prolin	Pro	P
glutamin	Gln	Q
arginin	Arg	R
serin	Ser	S
treonin	Thr	T
valin	Val	V
triptofan	Trp	W
tirozin	Tyr	T

Tabela A.1: Seznam dvajsetih najpogostejših aminokislin

peptid	aminokislinska sestava
APH	MKQLEKELKQLEKELQAIEKQLAQLQWKAQARKKKLAQLKKKLQA
BCR	DIEQELERAKASIRRLEQEVNQUERSRMAYLQTLLAK
GCN_{sh}	QLEDKVEELLSKNYHLENEVARLKKLVG
P3	SPEDEIQQLEEEIAQLEQKNAALKEKNQALKYG
P4	SPEDKIAQLQKQIQALKQENQQLEEENAALEYG
P5	SPEDENAALEEKIAQLKQKNAALKEEIQALEYG
P6	SPEDKNAALKEEIQALEEENQALEEKIAQLKYG
P7	SPEDEIQALEEKNAQLKQEIAALEEKNQALKYG
P8	SPEDKIAQLKEENQQLEQKIQALKEENAALEYG
START	MYHHHHHHSRAG
LINK	SGPG
STOP	SGTS

Tabela A.2: Aminokislinska sestava peptidov, ki so bili v [46] uporabljeni za konstrukcijo samosestavljivega tetraedra TET12

Seznam slik