

# 六个苯环生成的六角系统的自由度

刘乙瑾, 邓凯\*

北方民族大学, 数学与信息科学学院, 宁夏 银川

收稿日期: 2023年9月25日; 录用日期: 2023年10月19日; 发布日期: 2023年10月26日

---

## 摘要

设  $M$  是图  $G$  的一个完美匹配,  $S$  是  $M$  的一个子集。若  $S$  不被  $G$  中其它完美匹配所包含, 则称  $S$  是  $M$  的一个强迫集。包含边数最少的强迫集的势称为  $M$  的强迫数, 图  $G$  中所有完美匹配的强迫数的和称作图  $G$  的自由度。图的强迫多项式是最近提出的刻画全体强迫数分布的一种计数多项式。在本文中, 利用强迫多项式, 计算了所有由六个苯环生成的六角系统的自由度, 并对比了它们的平均自由度。

## 关键词

完美匹配, 强迫数, 六角系统, 自由度

---

# The Degrees of Freedom of a Hexagonal Systems Generated by Six Benzene Rings

Yijin Liu, Kai Deng\*

School of Mathematics and Information Science, North Minzu University, Yinchuan Ningxia

Received: Sep. 25<sup>th</sup>, 2023; accepted: Oct. 19<sup>th</sup>, 2023; published: Oct. 26<sup>th</sup>, 2023

---

\* 通讯作者。

---

## Abstract

Let  $M$  be a perfect matching of a graph  $G$ , and  $S$  be a subset of  $M$ .  $S$  is called a forcing set of  $M$  if  $S$  is not contained in other perfect matchings of  $G$ . The cardinality of a forcing set with the least number of edges is defined as the forcing number of  $M$ . The sum of forcing numbers of all perfect matchings of  $G$  is called the degree of freedom of  $G$ . The forcing polynomial of a graph is a recently proposed counting polynomial that characterizes the distribution of all forcing numbers. In this paper, the degrees of freedom of all hexagonal systems generated by six benzene rings were calculated using forcing polynomials, and their average degrees of freedom were compared.

## Keywords

Perfect Matching, Forcing Number, Hexagonal System, Degree of Freedom

---

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

设  $G$  是一个简单无向图, 分别用  $V(G)$  和  $E(G)$  表示图  $G$  的顶点集和边集. 图  $G$  中的一个独立边集合或没有公共端点的边集合称作是图  $G$  的一个匹配, 覆盖了图  $G$  的所有顶点的匹配叫做图  $G$  的完美匹配. 完美匹配是解决一些实际问题的重要模型, 有着广泛的应用, Lovász 和 Plummer [1] 的著名专著中系统总结了匹配理论的发展结果.

六角系统是一个2-连通平面二部图, 其每一个内面边界是一个正六边形或苯环, 也可以看作是由相同的正六边形拼接构成的. 理论化学研究中将苯类碳氢化合物的碳原子和氢原子视为顶点, 原子之间的化学键作为边, 再删去氢原子, 该模型得到的苯类碳氢化合物的碳原子骨架或分子图是一个六角系统. 苯类碳氢化合物中碳碳双键的集合恰好对应其分子图中的一个完美匹配, 化学家称其为 Kekulé 结构 [2]. Klein 和 Randić [3]发现固定一个 Kekulé 结构的少量双键后, 分子图中其它双键的分配是唯一确定的, 确定一个 Kekulé 结构所需固定的最少双键数目被定义为该 Kekulé 结构的内自由度, 分子图中所有 Kekulé 结构内自由度的和称为该分子图的自由度, 分子图的自由度与其共振能量密切相关, 是反映分子稳定性的图不变量. 随后, Harary 等 [4]将内自由度概念拓展到了一般图

的完美匹配上, 提出了完美匹配的强迫数概念.

设  $M$  是图  $G$  的一个完美匹配,  $S \subseteq M$ . 若  $S$  不被  $G$  中其它完美匹配所包含, 则称  $S$  是  $M$  的一个强迫集. 包含边数最少的强迫集称作是  $M$  的最小强迫集, 其势定义为  $M$  的强迫数, 记为  $f(G, M)$ . 图  $G$  中所有完美匹配的强迫数的和称作图  $G$  的自由度, 记为  $IDF(G)$ . 图  $G$  中所有完美匹配的强迫数的最小值  $f(G)$  和最大值  $F(G)$  分别称为  $G$  的最小强迫数和最大强迫数. Adams 等 [5]证明了求解最大度为3的二部图中单个完美匹配的强迫数是 NP-完全的, Afshani 等 [6]进一步证明了求解最大度为4的二部图的最小强迫数也是 NP-完全的.

图中完美匹配数目通常是指数级的, 实际上一般图的完美匹配计数问题是 #P-完全的 [1]. 为研究图中所有完美匹配的强迫数的分布, Adams 等 [5]提出了图  $G$  的强迫谱, 它是  $G$  中所有完美匹配强迫数的集合. 进一步考虑强迫谱中强迫数的重数, 张和平等 [7]定义了图  $G$  的强迫多项式:

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

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

设图  $G$  中所有完美匹配的集合为  $\mathcal{M}(G)$ , 则公式(1)可改写为:

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

根据公式(1), 可得  $F(G, x)|_{x=1} = \Phi(G)$ , 其中  $\Phi(G)$  是  $G$  中完美匹配个数, 以及自由度计算公式  $IDF(G) = \frac{d}{dx} F(G, x)|_{x=1}$ . 早期 Klein 和 Randić [3]利用转移矩阵方法得到了 Zigzag 六角链或 Fibonacene 六角链的自由度计算公式. 借助计算机, 文献 [8–10]得到了富勒烯图  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{72}$  的自由度. 近些年, 利用强迫多项式计算得到了一些图类的自由度, 例如 cata-型六角系统 [7], 平行四边形六角系统 [11], 苊系统 [12], polyomino 图 [13], 线性亚苯基系统 [14]等. 本文将计算六个苯环生成的所有六角系统的自由度.

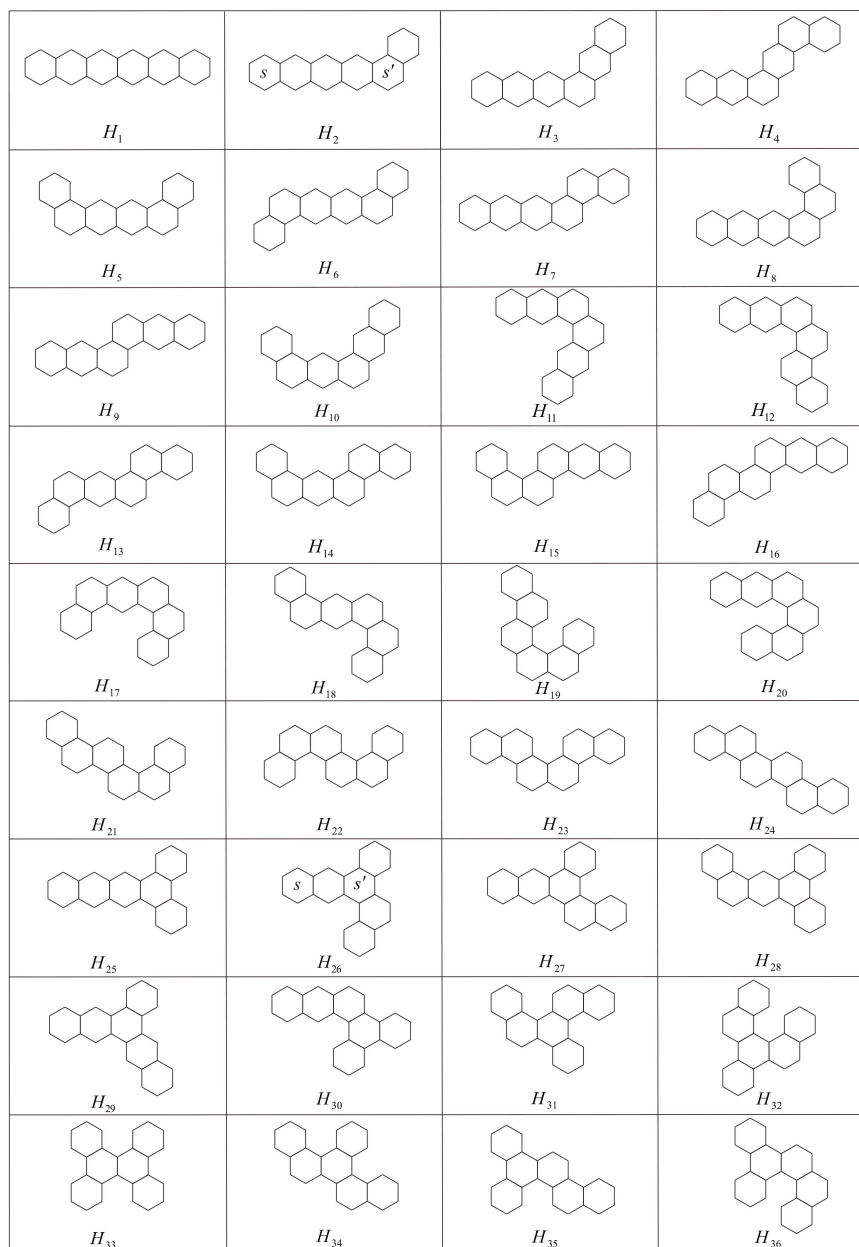
## 2. 六个苯环生成的六角系统

给定数目的苯环生成的不同六角系统的计数是经典的细胞生长问题和苯类碳氢化合物同分异构体研究的主要内容, 该计数问题目前仍然是公开的, 详细的介绍可看参见文献 [15]及其所列参考文献. 如果包含苯环个数相等的两个六角系统, 经过旋转、对称、平移等变换可以重合, 那么称它们是相同的.

如果一个六角系统的内对偶图是一棵树, 那么称这个六角系统是 cata-型六角系统(即没有3个六角形共用一个顶点), cata-型六角系统都有完美匹配. 如果 cata-型六角系统的内对偶图是一条路(没有3度顶点), 那么称其为六角链. 如果六角链的内对偶图是一条直线, 那么称其为线性六角链(见图 1  $H_1$ ). 形如图 1 中  $H_{24}$  的六角链也叫 Zigzag 链. 如果 cata-型六角系统中一个线性六角链不能包含于其它线性六角链, 那么称其为极大线性六角链. cata-型六角系统中的一个六边形至多与3个其它的六边形相邻, 仅与一个其它六边形相邻的叫做末端六边形. 如果一个六边形恰好与两个其它六边

形相邻, 且其两条融合边能同时在某个完美匹配中, 那么称这个六边形是 kink. 如果一个六边形恰好与三个其它六边形相邻, 那么称这个六边形是分叉的(对应内对偶图的一个3度顶点). 除 cata-型外, 其它都称作是 peri-型六角系统.

由六个苯环生成的所有不同六角系统的数目是81个, 其中有完美匹配的51个 [16], cata-型有36个 [17]. 图 1中是由六个苯环生成的所有不同的36个 cata-型六角系统, 其中前24个是六角链, 后12个是有分叉的. 图 2中是有完美匹配的全部15个 peri-型六角系统.



**Figure 1.** All cata-condensed hexagonal systems generated by six benzene rings

**图 1.** 六个苯环生成的所有cata-型六角系统

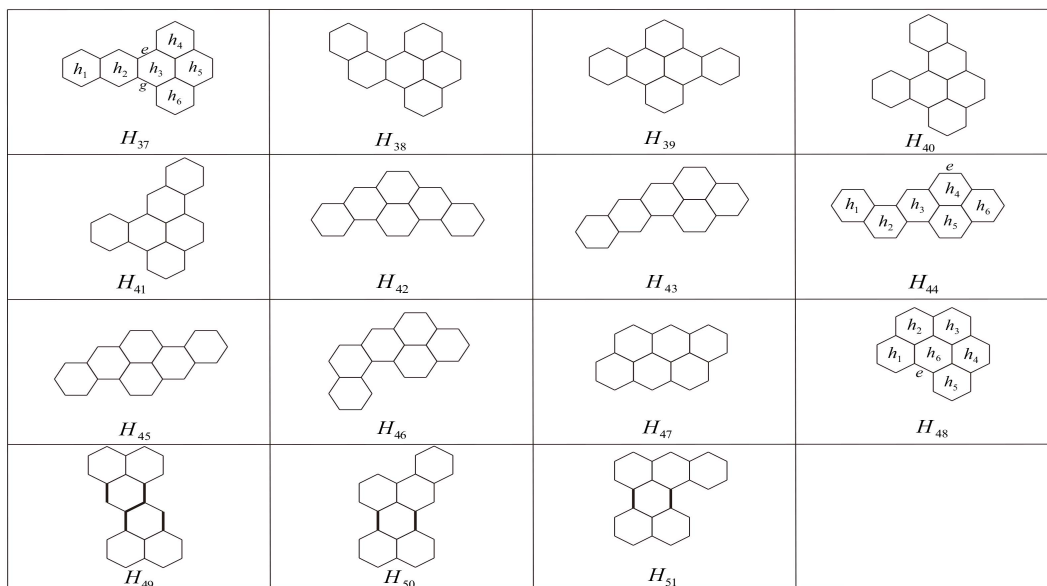


Figure 2. All peri-condensed hexagonal systems generated by six benzene rings

图 2. 六个苯环生成的所有 peri-型六角系统

如果六角系统  $H$  中的一条边属于其某个完美匹配, 那么称这条边是  $H$  中的一条允许边, 否则称为禁止边.  $H$  中所有允许边导出的子图的连通分支称作  $H$  的基本分支. 图 2 中的最后 3 个六角系统中有禁止边, 其中的加粗边是禁止边.

### 3. 自由度的计算

设  $M$  是图  $G$  的一个完美匹配, 如果  $G$  中的一个圈  $C$  的边在  $M$  和  $E(G) \setminus M$  中交替出现那么称  $C$  是  $M$ -交错圈. 令  $c(M)$  表示图  $G$  中互不相交的  $M$ -交错圈的最大个数, Pachter 和 Kim 证明了下面的极大极小定理.

**定理3.1** [18] 设  $G$  是平面二部图,  $M$  是  $G$  的一个完美匹配, 则  $f(G, M) = c(M)$ .

平面图的一个面的边界称作是面圈, 张和平与张福基证明了下面的结果.

**引理3.1** [19] 设  $M$  是平面基本二部图  $G$  的一个完美匹配,  $C$  是  $G$  的一个  $M$ -交错圈, 则  $C$  的内部包含一个  $M$ -交错面圈.

**定理3.2** 设  $H$  是一个由六个苯环生成的六角系统,  $M$  是  $H$  的一个完美匹配, 则  $f(H, M) = h(H, M)$ , 其中  $h(H, M)$  是  $H$  中不交的  $M$ -交错六边形的最大个数.

**证** 设  $\mathcal{A}$  是一个由不交  $M$ -交错圈构成的集合, 且  $|\mathcal{A}| = c(M)$ . 根据定理3.1, 有  $f(G, M) = |\mathcal{A}|$ . 设  $C \in \mathcal{A}$  是一个非六边形圈, 由引理3.1知,  $M$ -交错圈  $C$  的内部包含一个  $M$ -交错六边形  $b$ . 如图 1 和图 2 所示,  $b$  至少有一条边在  $H$  的外面边界上, 因此  $C$  与  $b$  至少有一条公共边. 令  $\mathcal{A}' = (\mathcal{A} \setminus \{C\}) \cup \{b\}$ , 则  $\mathcal{A}'$  仍是一个不交  $M$ -交错圈的集合, 且  $|\mathcal{A}'| = |\mathcal{A}|$ , 但是  $\mathcal{A}'$  中六边形圈的个数比  $\mathcal{A}$  中多 1 个. 以此类推, 可以找到一个最大的不交  $M$ -交错圈的集合使得其中每个  $M$ -交错圈都是一个六边形, 由定理3.1可得  $f(H, M) = h(H, M)$ , 证毕.

**例3.1** 图1中  $H_1$  是线性六角链, 其完美匹配个数  $\Phi(H_1) = 7$ , 且每个完美匹配生成的不交错六边形的最大个数是1. 根据定理3.2,  $H_1$  的每个完美匹配的强迫数都等于1, 由公式(1)知  $F(H_1, x) = 7x$ , 故  $IDF(H_1) = 7$ .

对于非线性链 cata-型六角系统, 利用 kink 和分叉六边形, 文献 [7] 和 [19] 分别给出了计算强迫多项式和自由度的递推公式. 设  $s$  是非线性链 cata-型六角系统  $H$  中的一个末端六边形, 包含  $s$  的极大线性链记作  $H(s)$ ,  $H(s)$  的另一个末端六边形记为  $s'$ , 则  $s'$  是  $H$  中的一个 kink 或分叉六边形. 令  $\overline{H(s)}$  表示由不在  $H(s)$  中的所有六边形构成的  $H$  的子图,  $H \ominus s'$  表示从  $H$  中删去  $s'$  的顶点以及由此产生的所有1度点及其邻接点, 直到没有1度点为止而得到的图. 设  $H(s)$  中包含  $r$  个六边形, 则有下面的结论.

**定理3.3** [7] 设  $H$  是一个 cata-型六角系统,  $s$  是一个末端六边形, 则

$$F(H, x) = F(H \ominus s', x)x + rF(\overline{H(s)}, x)x.$$

**例3.2** 如图1所示, 六角链  $H_2$  中包含末端六边形  $s$  的极大线性链  $H_2(s)$  有5个苯环,  $\overline{H_2(s)}$  是单个苯环, 其强迫多项式为  $2x$ .  $H_2 \ominus s'$  是空图, 空图可以看做是有唯一完美匹配的图, 约定其强迫多项式为1. 由定理3.3可推出,  $F(H_2, x) = 10x^2 + x$ , 其完美匹配数  $\Phi(H_2) = F(H_2, 1) = 11$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_2, x)|_{x=1} = 21$ .

**定理3.4** [7] 设  $G_1, G_2, \dots, G_k$  是图  $G$  的连通分支或基本分支, 则  $F(G, x) = \prod_{i=1}^k F(G_i, x)$ .

**例3.3** 如图1所示, cata-型六角系统  $H_{26}$  中包含末端六边形  $s$  的极大线性链  $H_{26}(s)$  有3个苯环,  $\overline{H_{26}(s)}$  是由一个苯环和一个包含两个苯环的线性链作为连通分支构成的图, 由定理3.4知其强迫多项式为  $2x \times 3x = 6x^2$ .  $H_{26} \ominus s'$  是单个苯环,  $F(H_{26} \ominus s', x) = 2x$ . 根据定理3.3,  $F(H_{26}, x) = 18x^3 + 2x^2$ , 因此  $\Phi(H_{26}) = 20$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_{26}, x)|_{x=1} = 58$ .

与例3.1, 例3.2和例3.3的计算类似, 应用定理3.2, 定理3.3和定理3.4, 通过求解强迫多项式可以得到全部 cata-型六角系统的自由度, 见附表1.

**例3.4** 如图2所示, peri-型六角系统  $H_{37}$  中六边形  $h_3$  的两条边  $e$  和  $g$  要么同时都属于某个完美匹配, 要么都不在某个完美匹配中. 因此可以把  $\mathcal{M}(H_{37})$  划分成两个子集  $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{37}) | e, g \in M\}$ ,  $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{37}) | e, g \notin M\}$ . 容易验证,  $\mathcal{M}_1$  仅包含一个完美匹配, 且使得  $h_3$  是  $H_{37}$  唯一的交错六边形, 根据定理3.2, 该完美匹配的强迫数等于1. 若  $M \in \mathcal{M}_2$ , 将六边形  $h_1$  和  $h_2$  构成的线性链记为  $L_2$ , 六边形  $h_4, h_5$  和  $h_6$  构成的 Zigzag 链记为  $Z_3$ , 则  $M$  在  $L_2$  和  $Z_3$  上的限制  $M|_{L_2}$  和  $M|_{Z_3}$  分别是它们的完美匹配, 且  $H_{37}$  中任一最大不交  $M$ -交错六边形的集合中都不包含  $h_3$ . 因此  $h(H_{37}, M) = h(L_2, M|_{L_2}) + h(Z_3, M|_{Z_3})$ . 根据定理3.2,  $f(H_{37}, M) = f(L_2, M|_{L_2}) + f(Z_3, M|_{Z_3})$ . 由公式(2)知,

$$\begin{aligned} F(H_{37}, x) &= \sum_{M \in \mathcal{M}(H_{37})} x^{f(H_{37}, M)} = \sum_{M \in \mathcal{M}_1} x^{f(H_{37}, M)} + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{f(H_{37}, M)} \\ &= x + \sum_{M \in \mathcal{M}_2} x^{f(L_2, M|_{L_2}) + f(Z_3, M|_{Z_3})} = x + F(L_2, x)F(Z_3, x) \\ &= x + 3x(4x^2 + x) = 12x^3 + 3x^2 + x, \end{aligned}$$

故  $\Phi(H_{37}) = F(H_{37}, 1) = 16$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_{37}, x)|_{x=1} = 43$ .

**例3.5** 如图2所示, 按照 peri-型六角系统  $H_{44}$  中六边形  $h_4$  的边  $e$  是否属于某个完美匹配, 可以把  $\mathcal{M}(H_{44})$  划分为两个子集  $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{44}) | e \notin M\}$ ,  $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{44}) | e \in M\}$ . 若  $M' \in \mathcal{M}_1$ , 则边  $e$  的两条邻接边都属于  $M'$ . 容易验证, 只有  $h_1$  和  $h_4$  是  $M'$ -交错六边形, 根据定理3.2  $f(H_{44}, M') = 2$ , 且  $|\mathcal{M}_1| = 2$ , 因此  $\mathcal{M}_1$  中的所有完美匹配对强迫多项式的贡献是  $2x^2$ . 记  $H_{44}$  中由六边形  $h_1, h_2, h_3, h_5, h_6$  构成的 Zigzag 链为  $Z_5$ . 若  $M'' \in \mathcal{M}_2$ , 则  $M''$  在  $Z_5$  上的限制是  $Z_5$  的一个完美匹配. 注意到,  $\Phi(Z_5) = |\mathcal{M}_2|$ , 且  $H_{44}$  中任意一个包含最多不交  $M''$ -交错六边形的集合中都不包含  $h_4$ , 故  $\mathcal{M}_2$  中的所有完美匹配对强迫多项式的贡献是  $F(Z_5, x) = 8x^3 + 5x^2$ . 由公式(2)知,

$$F(H_{44}, x) = \sum_{M' \in \mathcal{M}_1} x^{f(H_{44}, M')} + \sum_{M'' \in \mathcal{M}_2} x^{f(H_{44}, M'')} = 2x^2 + (8x^3 + 5x^2) = 8x^3 + 7x^2,$$

故  $\Phi(H_{44}) = F(H_{44}, 1) = 15$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_{44}, x)|_{x=1} = 38$ .

与例3.4和例3.5的计算类似, 应用定理3.2和定理3.4, 利用强迫多项式可以得到  $H_{38}$  至  $H_{43}$ , 以及  $H_{45}$  和  $H_{46}$  的自由度, 见附表2.

**例3.6** 如图2所示,  $H_{47}$  是一个平行四边形六角系统, 利用文献[11]中的定理2.5可得其强迫多项式  $F(H_{47}, x) = 8x^2 + 2x$ , 因此  $\Phi(H_{47}) = F(H_{47}, 1) = 10$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_{47}, x)|_{x=1} = 18$ .

**例3.7** 如图2所示,  $\mathcal{M}(H_{48})$  可以划分为两个子集  $\mathcal{M}_1 = \{M \in \mathcal{M}(H_{48}) | e \in M\}$ ,  $\mathcal{M}_2 = \{M \in \mathcal{M}(H_{48}) | e \notin M\}$ . 容易验证,  $\mathcal{M}(H_{48})$  中包含边  $e$  的完美匹配  $M$  是唯一的, 且使得  $h_6$  是唯一的  $M$ -交错六边形, 由定理3.2知  $f(H_{48}, M) = 1$ , 因此  $\mathcal{M}_1$  中的完美匹配对强迫多项式的贡献是  $x$ . 记  $\mathcal{M}(H_{48})$  中由六边形  $h_1, h_2, h_3, h_4, h_5$  构成的六角链为  $L_5$ . 若  $M \in \mathcal{M}_2$ , 则  $M$  在  $L_5$  上限制  $M|_{L_5}$  是  $L_5$  的一个完美匹配, 且  $\Phi(L_5) = |\mathcal{M}_2|$ . 注意到,  $H_{48}$  中任意一个包含最多不交  $M$ -交错六边形的集合中都不可能包含  $h_6$ , 故  $\mathcal{M}_2$  中的所有完美匹配对强迫多项式的贡献是  $F(L_5, x) = 8x^3 + 5x^2$ . 由公式(2)知,  $F(H_{48}, x) = 8x^3 + 5x^2 + x$ , 故  $\Phi(H_{48}) = F(H_{48}, 1) = 14$ , 自由度  $\frac{d}{dx}F(H_{48}, x)|_{x=1} = 35$ .

**例3.8** 如图2所示,  $H_{49}, H_{50}, H_{51}$  都有禁止边, 删去禁止边后得到结构简单的基本分支, 利用定理3.4容易得到它们的强迫多项式及自由度, 见附录表2.

## 4. 结论

图的自由度计算源自对苯类碳氢化合物的稳定性研究, 而六角系统是苯类碳氢化合物的分子图. 目前仅有少量特殊类型的六角系统的自由度是已知的, 例如 cata-型六角系统[7], 平行四边形六角系统[11], 茛系统[12]等. 在本文中, 我们利用强迫多项式方法计算得到了由6个苯环生成的所有有完美匹配的六角系统的自由度. 由  $n$  个苯环生成的不同六角系统的计数是细胞生长问题和苯类碳氢化合物同分异构体研究的主要内容, 已有的结果表明随着  $n$  的增加不同六角系统的个数呈指数型增长, 该计数问题目前仍然是公开的. 一种自然的想法是用归纳的方式, 先考虑所有  $n$  个苯环生成的六角系统的自由度, 再添加一个苯环对  $n+1$  个苯环生成的六角系统进行讨论, 但因数量巨大, 这将是一个十分繁琐的过程.

## 基金项目

宁夏自然科学基金项目(2022AAC03285); 国家自然科学基金项目(12161002); 宁夏大学生创新创业训练计划项目(S202211407035)。

## 参考文献

- [1] Lovász, L. and Plummer, M.D. (2009) Matching Theory. AMS Chelsea Publishing, Providence.
- [2] Cyvin, S.J. and Gutman, I. (1988) Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons. Springer, Berlin.
- [3] Klein, D.J. and Randić, M. (1987) Innate Degree of Freedom of a Graph. *Journal of Computational Chemistry*, **8**, 516-521. <https://doi.org/10.1002/jcc.540080432>
- [4] Harary, F., Klein, D.J. and Živković, T. (1991) Graphical Properties of Polyhexes: Perfect Matching Vector and Forcing. *Journal of Mathematical Chemistry*, **6**, 295-306. <https://doi.org/10.1007/BF01192587>
- [5] Adams, P., Mahdian, M. and Mahmoodian, E.S. (2004) On the Forced Matching Numbers of Bipartite Graphs. *Discrete Mathematics*, **281**, 1-12. <https://doi.org/10.1016/j.disc.2002.10.002>
- [6] Afshani, P., Hatami, H. and Mahmoodian, E.S. (2004) On the Spectrum of the Forced Matching Number of Graphs. *The Australasian Journal of Combinatorics*, **30**, 147-160.
- [7] Zhang, H.P., Zhao, S. and Lin, R.Z. (2015) The Forcing Polynomial of Catacondensed Hexagonal Systems. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **73**, 473-490.
- [8] Vukičević, D. and Randić, M. (2005) On Kekulé Structures of Buckminsterfullerene. *Chemical Physics Letters*, **401**, 446-450. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.11.098>
- [9] Randić, M. and Vukičević, D. (2006) Kekulé Structures of Fullerene  $C_{70}$ . *Croatica Chemica Acta*, **79**, 471-481.
- [10] Vukičević, D., Gutman, I. and Randić, M. (2006) On Instability of Fullerene  $C_{72}$ . *Croatica Chemica Acta*, **79**, 429-436.
- [11] Zhao, S. and Zhang, H.P. (2016) Forcing Polynomials of Benzenoid Parallelogram and Its Related Benzenoids. *Applied Mathematics and Computation*, **284**, 209-218. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2016.03.008>
- [12] Deng, K., Liu, S.H. and Zhou, X.Q. (2021) Forcing and Anti-Forcing Polynomials of Perfect Matching of a Pyrene System. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **85**, 27-46.



- [13] Deng, K., Lü, H.Z. and Wu, T.Z. (2023) Forcing and Anti-Forcing Polynomials of a Type of Polyomino Graphs. *Computational and Applied Mathematics*, **42**, Article 91. <https://doi.org/10.1007/s40314-023-02228-7>
- [14] 邓凯. 线性亚苯基系统的强迫和反强迫多项式[J]. 高校应用数学学报(A辑), 2022, 37(4): 491-500.
- [15] Dias, J.R. (2008) Isomer Enumeration of Practical Benzenoids. *Journal of Mathematical Chemistry*, **44**, 711-724. <https://doi.org/10.1007/s10910-007-9343-6>
- [16] Brunvoll, J., Cyvin, S.J. and Cyvin, B.N. (1987) Enumeration and Classification of Benzenoid Hydrocarbons. *Journal of Computational Chemistry*, **8**, 189-197. <https://doi.org/10.1002/jcc.540080301>
- [17] Konp, J.V., Szymanski, K., Jeričević, Ž. and Trinajstić, N. (1984) On the Total Number of Polyhexes. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **16**, 119-134.
- [18] Pachter, L. and Kim, P. (1998) Forcing Matchings on Square Grids. *Discrete Mathematics*, **190**, 287-294. [https://doi.org/10.1016/S0012-365X\(97\)00266-5](https://doi.org/10.1016/S0012-365X(97)00266-5)
- [19] Zhang, H.P. and Zhang, F.J. (2000) Plane Elementary Bipartite Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **105**, 291-311. [https://doi.org/10.1016/S0166-218X\(00\)00204-3](https://doi.org/10.1016/S0166-218X(00)00204-3)

## 附录

**Table 1.** The degrees of freedom of all cata-condensed hexagonal systems generated by six benzene rings**表 1.** 六个苯环生成的所有 cata-型六角系统的自由度列表

强迫多项式	完美匹配数 $\Phi$	自由度 $IDF$	平均自由度 $\frac{IDF}{\Phi}$
$F(H_1, x) = 7x$	7	7	1
$F(H_2, x) = 10x^2 + x$	11	21	$\frac{21}{11}$
$F(H_3, x) = 12x^2 + x$	13	25	$\frac{25}{13}$
$F(H_4, x) = 12x^3 + 5x^2$	17	46	$\frac{46}{17}$
$F(H_5, x) = 12x^3 + 4x^2$	16	44	$\frac{11}{4}$
$F(H_6, x) = 12x^3 + 4x^2$	16	44	$\frac{11}{4}$
$F(H_7, x) = 14x^2$	14	28	2
$F(H_8, x) = 14x^2$	14	28	2
$F(H_9, x) = 15x^2$	15	30	2
$F(H_{10}, x) = 12x^3 + 5x^2$	17	46	$\frac{46}{17}$
$F(H_{11}, x) = 15x^2$	15	30	2
$F(H_{12}, x) = 12x^3 + 6x^2$	18	48	$\frac{8}{3}$
$F(H_{13}, x) = 16x^3 + 3x^2$	19	54	$\frac{54}{19}$
$F(H_{14}, x) = 16x^3 + 3x^2$	19	54	$\frac{54}{19}$
$F(H_{15}, x) = 12x^3 + 6x^2$	18	48	$\frac{8}{3}$
$F(H_{16}, x) = 12x^3 + 6x^2$	18	48	$\frac{8}{3}$
$F(H_{17}, x) = 16x^3 + 3x^2$	19	54	$\frac{54}{19}$
$F(H_{18}, x) = 16x^3 + 3x^2$	19	54	$\frac{54}{19}$
$F(H_{19}, x) = 18x^3 + 3x^2$	21	60	$\frac{20}{7}$
$F(H_{20}, x) = 6x^3 + 12x^2$	18	42	$\frac{7}{3}$
$F(H_{21}, x) = 18x^3 + 3x^2$	21	60	$\frac{20}{7}$
$F(H_{22}, x) = 18x^3 + 3x^2$	21	60	$\frac{20}{7}$
$F(H_{23}, x) = 18x^3 + 3x^2$	21	60	$\frac{20}{7}$
$F(H_{24}, x) = 20x^3 + x^2$	21	62	$\frac{62}{21}$
$F(H_{25}, x) = 16x^3 + x$	17	49	$\frac{49}{17}$
$F(H_{26}, x) = 18x^3 + 2x^2$	20	58	$\frac{29}{10}$
$F(H_{27}, x) = 18x^3 + 2x^2$	20	58	$\frac{29}{10}$
$F(H_{28}, x) = 16x^4 + 4x^3 + 2x^2$	22	80	$\frac{40}{11}$
$F(H_{29}, x) = 18x^3 + x$	19	55	$\frac{55}{19}$

## Continued

$F(H_{30}, x) = 16x^3 + 3x^2$	19	54	$\frac{54}{19}$
$F(H_{31}, x) = 22x^3$	22	66	3
$F(H_{32}, x) = 22x^3$	22	66	3
$F(H_{33}, x) = 16x^4 + 8x^3$	24	88	$\frac{11}{3}$
$F(H_{34}, x) = 22x^3$	22	66	3
$F(H_{35}, x) = 16x^4 + 4x^3 + 3x^2$	23	82	$\frac{82}{23}$
$F(H_{36}, x) = 16x^4 + 4x^3 + 3x^2$	23	82	$\frac{82}{23}$

**Table 2.** The degrees of freedom of all peri-condensed hexagonal systems generated by six benzene rings**表 2.** 六个苯环生成的所有 peri-型六角系统的自由度列表

强迫多项式	完美匹配数 $\Phi$	自由度 $IDF$	平均自由度 $\frac{IDF}{\Phi}$
$F(H_{37}, x) = 12x^3 + 3x^2 + x$	16	43	$\frac{43}{16}$
$F(H_{38}, x) = 12x^3 + 5x^2$	17	46	$\frac{46}{17}$
$F(H_{39}, x) = 16x^4 + 4x^2$	20	72	$\frac{18}{5}$
$F(H_{40}, x) = 12x^3 + 4x^2$	16	44	$\frac{11}{4}$
$F(H_{41}, x) = 16x^3 + x$	17	49	$\frac{49}{17}$
$F(H_{42}, x) = 8x^3 + 5x^2 + x$	14	35	$\frac{5}{2}$
$F(H_{43}, x) = 11x^2 + x$	12	23	$\frac{23}{12}$
$F(H_{44}, x) = 8x^3 + 7x^2$	15	38	$\frac{38}{15}$
$F(H_{45}, x) = 13x^2$	13	26	2
$F(H_{46}, x) = 8x^3 + 7x^2$	15	38	$\frac{38}{15}$
$F(H_{47}, x) = 8x^2 + 2x$	10	18	$\frac{9}{5}$
$F(H_{48}, x) = 8x^3 + 5x^2 + x$	14	35	$\frac{5}{2}$
$F(H_{49}, x) = 9x^2$	9	18	2
$F(H_{50}, x) = 12x^3 + 3x^2$	15	42	$\frac{14}{5}$
$F(H_{51}, x) = 12x^2$	12	24	2