

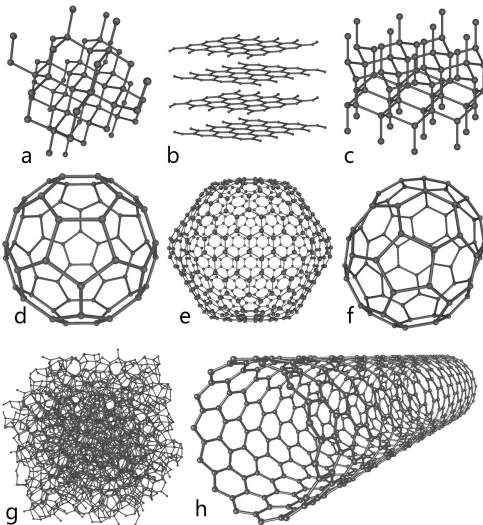
Конференция
«Геометрия, топология и динамика»

Свойства топологических индексов абстрактных и молекулярных графов

А. А. Добрынин

Новосибирск
13–15 декабря 2020 г.

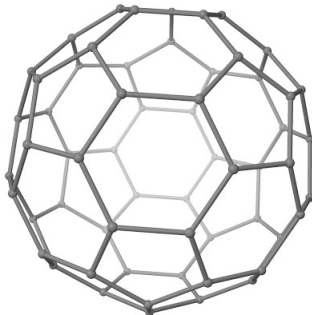
Некоторые формы углерода.



Фуллерены.

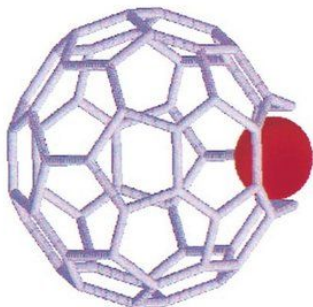
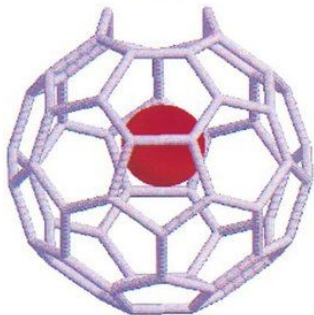
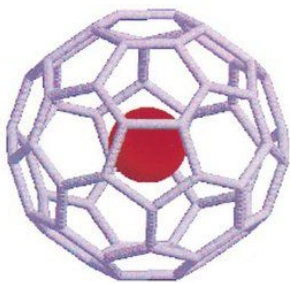
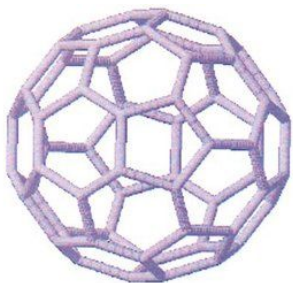
Фуллерен — молекулярное соединение, представляющее собой выпуклые замкнутые многогранники с гранями размер 5 и 6, составленные из трёхкоординированных атомов углерода.

Граф фуллерена — 3-связный плоский кубический граф с гранями размера 5 и 6. Граней размера 5 в точности 12.

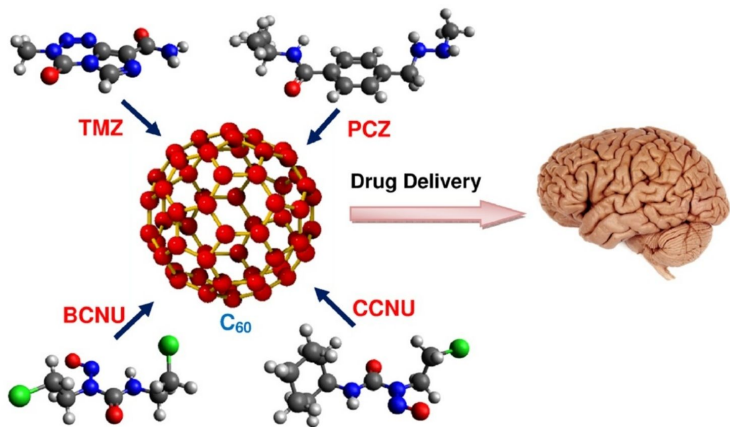


В **IPR фуллерене** каждая пятиугольная грань окружена только шестиугольными гранями (**I**solated **P**entagonal **R**ule).

Контейнер для молекул.



Доставка субстанций.



Топологические индексы — инварианты графов, применяемые в приложениях для оценки сложности структур, упорядочения изомеров, прогнозирования физико-химических свойств химических соединений, включая биологическую активность.

Индекс Винера — сумма расстояний между всеми вершинами графа

$$W(G) = \sum_{\{v,u\} \subseteq V(G)} d(v,u).$$

Трансмиссия вершины v в графе G — сумма расстояний от v до всех других вершин G :

$$tr(v) = \sum_{u \in V(G)} d(v,u).$$

Сложность Винера, C_W , графа — число попарно различных трансмиссий его вершин.

Трансмиссионно иррегулярный граф имеет максимально возможную сложность Винера (равную числу вершин).

Таблица: Количество фуллеренов (N) и IPR фуллеренов (N_{IPR}) с n вершинами (f — число граней).

n	f	N	N_{IPR}
20	12	1	0
24	14	1	0
26	15	1	0
28	16	2	0
30	17	3	0
32	18	6	0
34	19	6	0
36	20	15	0
38	21	17	0
..
58	31	1205	0
60	32	1812	1
62	33	2385	0
64	34	3465	0
66	35	4478	0
68	36	6332	0
70	37	8149	1
72	38	11190	1
..
190	97	131561744	8187581
192	98	145976674	9364975
194	99	159999462	10659863
196	100	177175687	12163298
..
232	102	857934016	95758929

Задачи:

1. Какова структура фуллеренов с максимальным индексом Винера?
2. Какую сложность имеют фуллерены с максимальным индексом Винера? Есть ли трансмиссионно иррегулярные графы в классе фуллеренов?

Источники графов фуллеренов:

1. Данные в сети интернет (миллионы структур).
2. Генераторы графов фуллеренов (миллиарды структур).

Вычислительные средства:

Три компьютера (4/8 ядерные процессоры 4200-4500 MHz, диски 18 Tb).

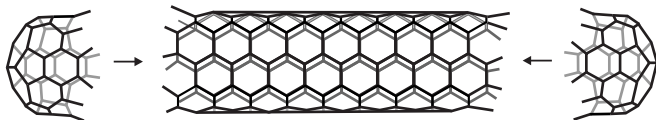
C_n и W_n — **максимальные** сложность Винера и индекс Винера для фуллеренов с n вершинами.

Таблица: Сложность C_n и индекс Винера W графов фуллеренов с C_n .
 Индекс Винера W_n и сложность C_W графов фуллеренов с W_n
 (n — число вершин, D — диаметр графа, t — тип крышки).

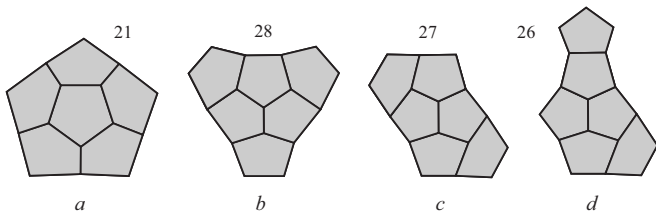
n	C_n	W	D	W_n	C_W	D	t
20	1	500	5	500	1	5	
24	2	804	5	804	2	5	
26	2	987	6	987	2	6	<i>b</i>
28	5	1198	6	1198	5	6	
30	7	1431	6	1435	3	6	<i>a</i>
32	9	1688	6	1696	3	7	<i>b</i>
34	10	1973	7	1978	10	7	
		1978	7				
36	14	2288	7	2298	8	7	<i>c1</i>
38	18	2627	7	2651	4	8	<i>b</i>
40	19	3001	7	3035	4	8	<i>a</i>
...
226	217	288789	31	347998	77	39	<i>d2</i>
228	218	258913	25	365818	57	39	<i>c1</i>
230	221	269286	27	413905	23	45	<i>a</i>
		295719	31				
232	221	292719	28	384714	57	40	<i>c2</i>

Фуллерены с максимальным индексом Винера.

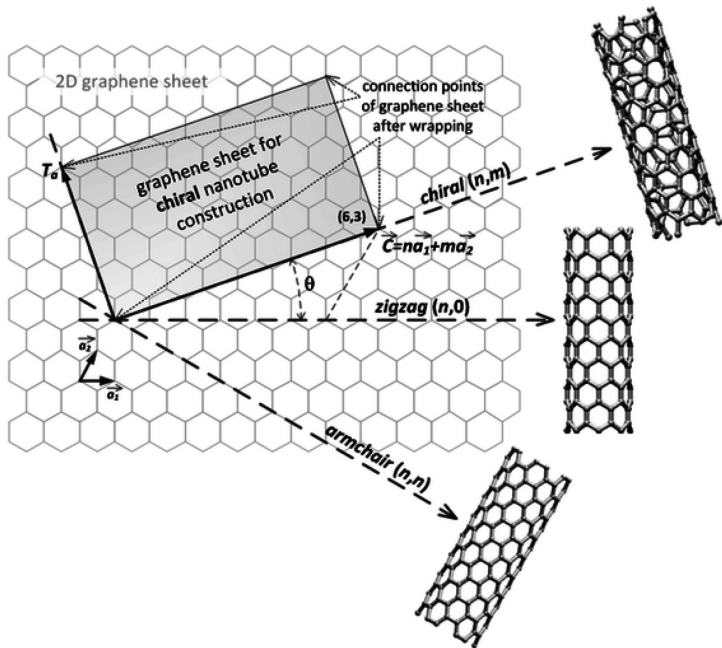
Нанотрубочный фуллерен = нанотрубка + крышки.



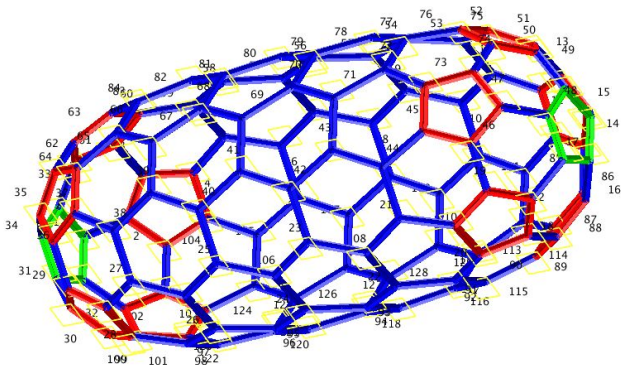
В графах с максимальным индексом Винера 4 типа крышек. В каждом графе крышки имеют одинаковый тип. Указано число фуллеренов с данными крышками, $n \leq 232$.



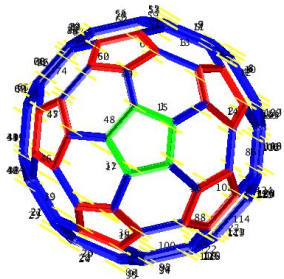
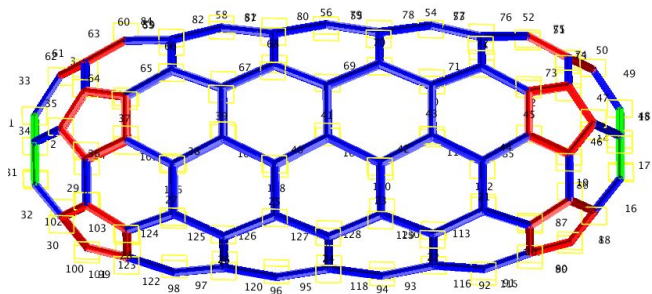
Построение нанотрубок с индексами хиральности (n, m) .



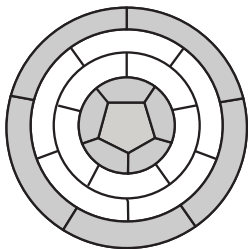
Пример 3D изображения графа фуллерена в Maple. Пятиугольники в его крышках выделены цветом (красный и зеленый).



Вид фуллерена сбоку и со стороны крышки (ребра совмещены).



1. **Тип а.** Крышки этого типа определяют (5,0)-нанотрубочные фуллерены.



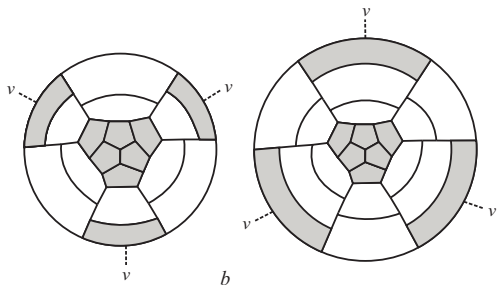
a

Обозначим через G_n граф с числом вершин n .

Утверждение. (Graovac, Ori, Faghani, 2011). Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа *a* и числом вершин $n = 10k$, $k \geq 2$. Тогда $C_W(G_n) = k$, $D(G_n) = 2k - 1$ и для $n \geq 50$,

$$W(G_n) = \frac{1}{30} (n^3 + 1175n - 20100).$$

2. **Тип *b***. Крышки этого типа определяют (3,3)-нанотрубочные фуллерены (см. пример ниже, вершины v отождествляются).



Утверждение. Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа b и числом вершин $n = 6k - 4$, $k \geq 5$. Тогда $C_W(G_n) = \lceil k/2 \rceil$, $D(G_n) = k + 1$ и для $n \geq 26$,

$$W(G_n) = \frac{1}{36} (n^3 + 27n^2 + 156n - 4352).$$

Если фуллерены типов a и b имеют одинаковое число вершин, то фуллерен типа a имеет больший индекс Винера.

3. **Тип с.** Крышки этого типа определяют (4,2)-нанотрубчатые фуллерены, которые разбиваются на два семейства T_{c1} и T_{c2} .

Утверждение. а) Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа с из семейства T_{c1} . Тогда для $n \geq 36$,

$$W(G_n) = \frac{1}{36} (n^3 + 24n^2 + 336n - 7128).$$

Сложность Винера и диаметр G_n показаны в таблице.

семейство T_{c1}			семейство T_{c2}		
n	C_W	D	n	C_W	D
$60k + 96$	$15k + 24$	$10k + 17$	$60k + 76$	$15k + 18$	$10k + 14$
$60k + 48$	$15k + 12$	$10k + 9$	$60k + 88$	$15k + 21$	$10k + 16$
$60k + 72$	$15k + 18$	$10k + 13$	$60k + 112$	$15k + 27$	$10k + 20$
$60k + 84$	$15k + 21$	$10k + 15$	$60k + 64$	$15k + 15$	$10k + 12$

б) Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа c из семейства T_{c2} . Тогда для $n \geq 52$,

$$W(G_n) = \frac{1}{36} (n^3 + 24n^2 + 336n - 7192).$$

Сложность Винера и диаметр G_n показаны в таблице.

семейство T_{c1}			семейство T_{c2}		
n	C_W	D	n	C_W	D
$60k + 96$	$15k + 24$	$10k + 17$	$60k + 76$	$15k + 18$	$10k + 14$
$60k + 48$	$15k + 12$	$10k + 9$	$60k + 88$	$15k + 21$	$10k + 16$
$60k + 72$	$15k + 18$	$10k + 13$	$60k + 112$	$15k + 27$	$10k + 20$
$60k + 84$	$15k + 21$	$10k + 15$	$60k + 64$	$15k + 15$	$10k + 12$

4. **Тип d .** Крышки этого типа определяют (5,1)-нанотрубчатые фуллерены, которые разбиваются на два семейства T_{d1} и T_{d2} .

Утверждение. а) Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа d из семейства T_{d1} . Тогда $W(G_{42}) = 3415$ и для $n \geq 54$,

$$W(G_n) = \frac{1}{36} (n^3 + 15n^2 + 1068n - 22788).$$

Сложность Винера и диаметр G_n показаны в таблице.

семейство T_{d1}			семейство T_{d2}		
n	C_W	D	n	C_W	D
$60k + 126$	$25k + 57$	$10k + 12$	$60k + 106$	$15k + 47$	$10k + 19$
$60k + 78$	$25k + 37$	$10k + 4$	$60k + 118$	$15k + 50$	$10k + 21$
$60k + 102$	$25k + 47$	$10k + 8$	$60k + 142$	$15k + 56$	$10k + 25$
$60k + 114$	$25k + 52$	$10k + 10$	$60k + 94$	$15k + 44$	$10k + 17$

б) Пусть G_n есть фуллерен с крышками типа d из семейства T_{d2} . Тогда $W(G_{46}) = 4322$ и для $n \geq 58$,

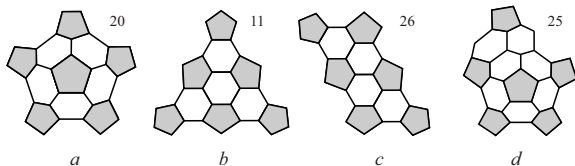
$$W(G_n) = \frac{1}{36} (n^3 + 15n^2 + 1068n - 22756).$$

Сложность Винера и диаметр G_n показаны в таблице.

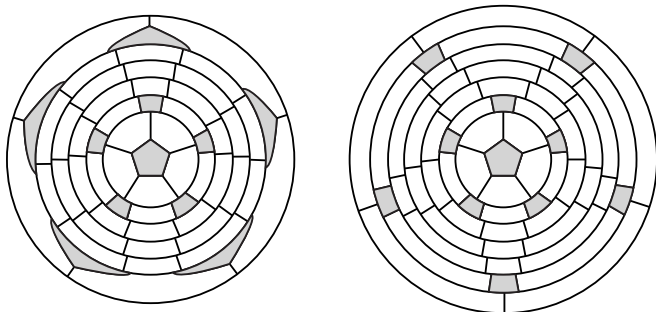
семейство T_{d1}			семейство T_{d2}		
n	C_W	D	n	C_W	D
$60k + 126$	$25k + 57$	$10k + 12$	$60k + 106$	$15k + 47$	$10k + 19$
$60k + 78$	$25k + 37$	$10k + 4$	$60k + 118$	$15k + 50$	$10k + 21$
$60k + 102$	$25k + 47$	$10k + 8$	$60k + 142$	$15k + 56$	$10k + 25$
$60k + 114$	$25k + 52$	$10k + 10$	$60k + 94$	$15k + 44$	$10k + 17$

Индекс Винера для IPR фуллеренов.

Пентагональные части крышек имеют следующую конфигурацию:



Крышки типа *a* определяют (5,5)-нанотрубчатые фуллерены, двух семейств T_{a1} и T_{a2} ($n \leq 270$). Приведены графы G_{110} и G_{120} .



Утверждение (Ghosh и др., 2018). а) Пусть G_n есть IPR фуллерен с крышками типа а из семейства T_{e1} и числом вершин $n = 10k$, $k \geq 11$, и k нечетно. Тогда $C_W(G_n) = (k + 1)/2 + 1$, $D(G_n) = k + 3$, и

$$W(G_n) = \frac{1}{60} (n^3 + 75n^2 + 1820n - 95400).$$

б) Пусть G_n есть IPR фуллерен с крышками типа а из семейства T_{e2} и числом вершин $n = 10k$, $k \geq 12$, и k четно. Тогда $C_W(G_n) = k/2 + 1$, $D(G_n) = k + 3$, и

$$W(G_n) = \frac{1}{60} (n^3 + 75n^2 + 1820n - 97200).$$

Распределение фуллеренов N по их сложности Винера C_W ($n = 196$).

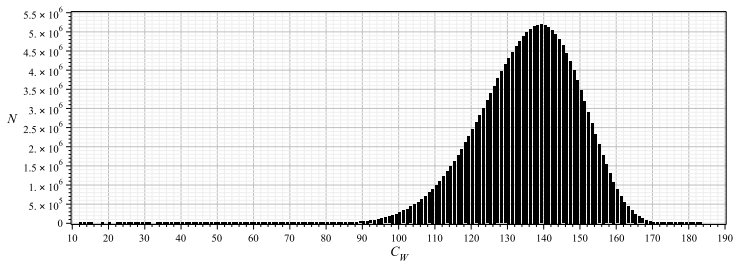
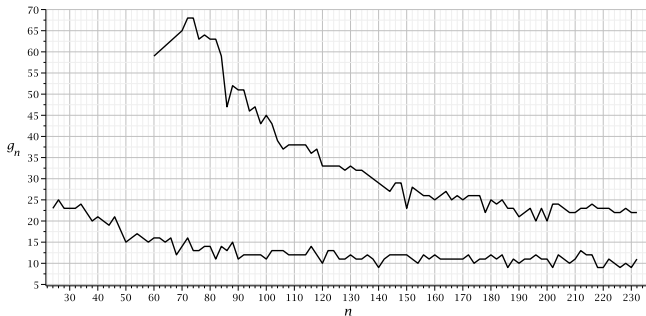


График $g_n = n - C_n$ для фуллеренов с числом вершин n (вверху — IPR фуллерены, внизу — все фуллерены).



Для инвариантов вершин, расширяющих интервал их возможных значений по сравнению с трансмиссией, существуют иррегулярные графы фуллеренов.

(r, s) -трансмиссией вершины $v \in V(G)$ называется величина

$$tr_{r,s}(v) = \sum_{u \in V(G)} \sum_{i=r}^s d(v, u)^i,$$

для целого $r \leq s$. Соответствующий аналог индекса Винера:

$$W_{r,s}(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} \sum_{i=r}^s d(u, v)^i = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} tr_{r,s}(v).$$

Связь с известными индексами:

$W_{1,1}$ — индекс Винера

$W_{k,k}$ — k -й дистанционный момент для целого k

$WW = \frac{1}{2} W_{1,2}$ — гипер-индекс Винера

$TSZ = \frac{1}{6}(2W_{1,2} + W_{2,3})$ — индекс Трача-Станкевича-Зефирова

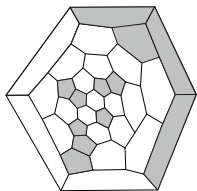
Таблица: Сложность C_n фуллеренов для индекса $W_{r,s}$ (N — число графов).

n	W		$W_{2,2}$		$W_{1,2}$		$W_{3,3}$		$W_{2,3}$		$W_{1,3}$	
	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N
50	35	1	42	2	42	2	42	4	42	2	42	4
52	36	1	46	2	46	1	47	1	46	2	47	1
54	37	1	50	2	48	2	51	1	51	1	51	1
56	40	1	52	1	51	2	52	3	52	3	52	3
58	43	2	57	1	55	1	57	1	56	2	57	1
60	44	3	58	1	57	2	58	3	58	2	58	3
62	46	3	60	2	59	4	62	1	62	1	62	1
64	49	5	64	1	63	1	64	2	64	2	64	2
66	50	2	65	5	65	1	66	2	66	2	66	2
68	56	1	67	5	66	7	68	1	68	1	68	1
70	56	1	69	7	69	1	70	9	70	9	70	9
72	56	6	72	2	71	4	72	18	72	16	72	18
74	61	1	74	4	73	3	74	24	74	19	74	26
76	63	1	76	2	76	1	76	53	76	50	76	55
78	64	2	78	14	78	1	78	86	78	72	78	92
80	66	2	80	14	80	2	80	169	80	140	80	174
82	71	1	82	22	82	3	82	286	82	251	82	299
84	70	2	84	52	84	11	84	483	84	416	84	505
86	73	3	86	69	86	14	86	818	86	672	86	856
88	73	7	88	132	88	16	88	1305	88	1058	88	1345
90	79	1	90	154	90	36	90	2024	90	1641	90	2104
92	80	1	92	247	92	38	92	3108	92	2472	92	3292
94	82	1	94	385	94	73	94	4836	94	3782	94	5052
96	84	2	96	511	96	86	96	6932	96	5396	96	7366
98	86	1	98	697	98	111	98	9800	98	7623	98	10493
100	89	1	100	923	100	147	100	13870	100	10627	100	14886

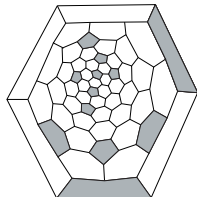
Таблица: Сложность C_n IPR фуллеренов для индекса $W_{r,s}$ (N — число графов).

n	W		$W_{2,2}$		$W_{1,2}$		$W_{3,3}$		$W_{2,3}$		$W_{1,3}$	
	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N	C_n	N
90	39	2	71	1	69	1	73	2	73	1	73	2
92	41	1	80	1	76	1	84	1	84	1	84	1
94	48	1	82	1	80	2	84	2	84	2	84	2
96	49	1	85	1	81	2	87	5	87	3	87	6
98	55	1	87	1	85	2	91	3	91	2	91	3
100	55	3	90	2	90	1	95	1	95	1	95	1
102	59	1	94	4	92	1	98	2	98	1	98	2
104	65	1	97	2	99	1	101	1	100	9	101	2
106	69	1	101	2	101	1	104	4	103	9	104	3
108	70	1	103	2	102	3	107	3	107	2	107	2
110	72	1	108	1	106	2	110	1	110	1	110	1
112	74	1	108	3	109	2	112	1	111	8	112	1
114	76	2	112	4	110	1	114	4	114	2	114	4
116	80	2	114	2	113	1	116	11	116	6	116	15
118	81	1	116	2	117	1	118	32	118	26	118	32
120	87	1	119	1	118	2	120	39	120	34	120	47
122	89	2	121	4	120	4	122	73	122	49	122	82
124	91	2	124	1	122	8	124	146	124	100	124	164
126	93	1	126	1	125	1	126	262	126	164	126	268
128	96	1	128	6	127	4	128	409	128	270	128	416
130	97	3	130	4	130	1	130	739	130	466	130	728
132	100	2	132	5	132	1	132	1246	132	749	132	1235
134	102	2	134	14	134	3	134	2000	134	1314	134	1929
136	105	1	136	18	136	1	136	3020	136	1831	136	2966

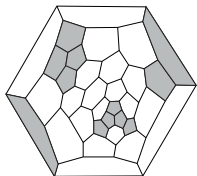
Минимальные (r, s) -трансмиссионно иррегулярные графы фуллеренов.



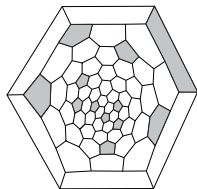
$n = 62$



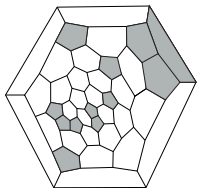
$n = 110$



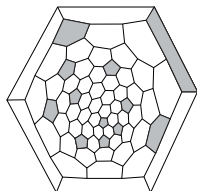
$n = 64$



$n = 124$



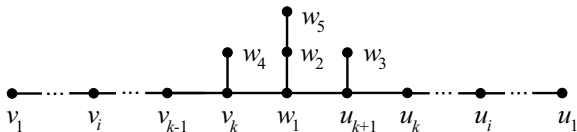
$n = 76$



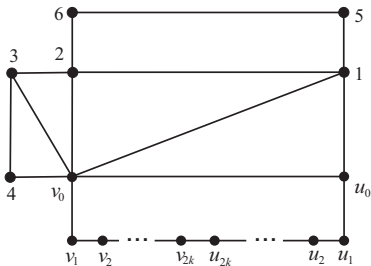
$n = 130$

Семейства транмиссионно иррегулярных графов

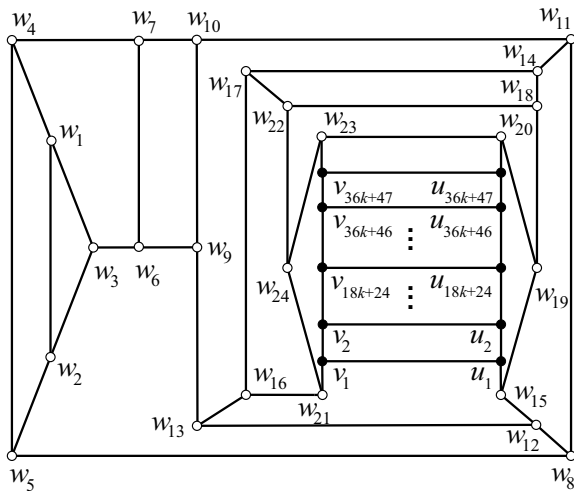
Транмиссионно иррегулярное дерево T_k , $k = m(m + 1)/2$, $m = 3$, $m \geq 8$.



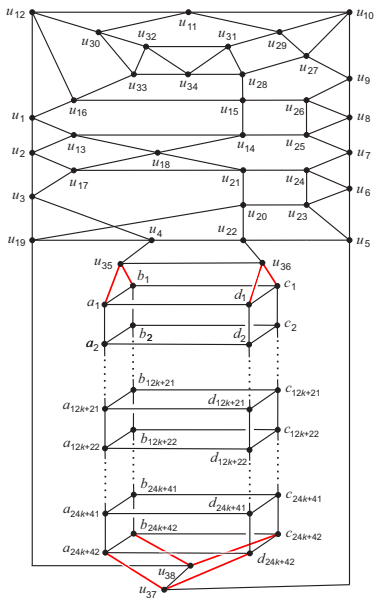
Двусвязный ТИ-граф G_k на $4k + 8$ вершинах, $k \geq 1$.



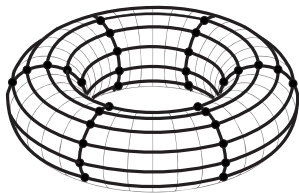
Кубический ТИ-граф G_k на $72k + 118$ вершинах, $k \geq 0$.



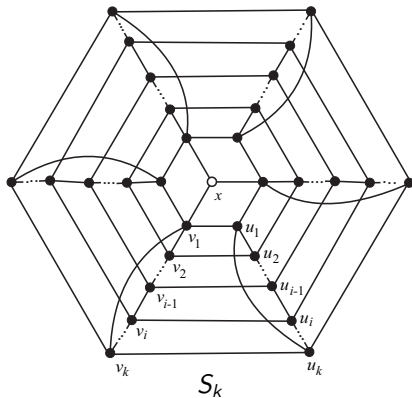
Регулярный ТИ граф степени 4 на $96k + 206$ вершинах, $k \geq 0$.



Граф называется **ступенчато трансмиссионно иррегулярным**, если $|tr(u) - tr(v)| = 1$ для каждого ребра (u, v) .

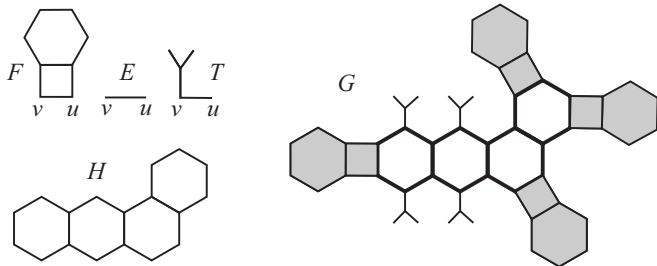


$C_6 \square C_k$



Граф $C_6 \square C_k$ и ступенчато ТИ граф $S_k, k \geq 2$.

Индекс Винера при присоединении графов к гексагональному графу.



Пусть графы F , E и T присоединяются к a , b и c ребрам графа H так, что эти ребра образуют совершенное паросочетание в H . Тогда

$$W(G) = \left(\frac{f+e}{2}\right)^2 W(H) + aW(F) + bW(E) + cW(T) + p_1 + p_2,$$

где p_1 зависит от дистанционных характеристик вершин v и u в графах F , E и T , а p_2 - полином от числа вершин графов.

Публикации

1. Dobrynin A.A. *Infinite family of 2-connected transmission irregular graphs*, Appl. Math. Comput., 2019, V. 340, No 1, P. 1-4.
2. Dobrynin A.A. *Infinite family of 3-connected cubic transmission irregular graphs*, Discrete Appl. Math., 2019, V. 257, P. 151-157.
3. Dobrynin A.A. *Infinite family of transmission irregular trees of even order*, Discrete Math., 2019, V. 342, No 1, P. 74-77.
4. Dobrynin A.A., Vesnin A.Yu. *On the Wiener complexity and the Wiener index of fullerene graphs*, Mathematics, 2019, V. 7, No 11, article 1071.
5. Dobrynin A.A., Sharafadini R. *Stepwise transmission irregular graphs*, Appl. Math. Comput., 2020, V. 371, article 124949.
6. Dobrynin A.A., Iranmanesh A. *Wiener index of edge thorny graphs of catacondensed benzenoids*, Mathematics, 2020, V. 8, No. 4, article 467.
7. Dobrynin A.A., Ori O., Vesnin A.Yu. *On the complexity based on some transmission-type invariants of fullerene graphs*, in preparation.
8. Bezhaev A.Yu., Dobrynin A.A. *On quartic transmission irregular graphs*, in preparation.

Спасибо за внимание.