

ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ МЕТОДОВ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ НАУКИ

УДК 519.713, 544.131

© Федченко Д. П., Бикмурзин Р. В., 2020

АВТОМАТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОЛЕКУЛ ТИПА ФУЛЛЕРЕНА

Федченко Д. П.^{a,1}, Бикмурзин Р. В.^{a,2}^a Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, 660041, Россия.

В статье дано описание геометрической структуры, 360 вершин которой кодируются игровыми конфигурациями 2×3-пазла. Предложенная структура, при определенных условиях, очень схожа с молекулой фуллерена C60.

Ключевые слова: фуллерен C60, луковичная наноструктура, теория автоматов, граф переходов.

AUTOMATON REPRESENTATION OF FULLERENE TYPE MOLECULES

Fedchenko D. P.^{a,1}, Bikmurzin R. V.^{a,2}^a Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041, Russia.

The article describes a geometric structure whose 360 vertices are encoded by the game configurations of the 2×3-puzzle. The proposed structure, under certain conditions, is very similar to the C60 fullerene.

Keywords: fullerene C60, nano-onions, the theory of finite state machine, transition graph.

DOI: 10.17238/issn2226-8812.2020.2.95-99

Введение

Автоматы занимают важное место в информатике (или, как сейчас принято говорить, Computer science). Многие, в том числе и весьма крупные, геометрико-алгебраические проблемы решаются или переписываются на языке теории автоматов. Наиболее полно алгебраический контекст автоматов отражен в обзоре Григорчука [1].

В данной работе мы рассматриваем конечный полуавтомат [2], который устроен невероятно просто. Речь идет о головоломке 2×3-пазл. Граф данного полуавтомата, построенный в программе Gerphi, имеет частичное сходство со структурой молекулы фуллерена C60.

1. Головоломка пазла 2×3

Рассмотрим 2×3-пазл, состоящий из пяти пронумерованных цифрами 1, 2, 3, 4, 5 фишек и пустой клетки. Как обычно, пустая клетка может перемещаться по игровому полю. Изъятия фишек запрещены. Данная головоломка моделируется конечным полуавтоматом $\mathcal{A} = \langle S, A, \delta \rangle$ с множеством состояний $S \subset S_6$, на вход которого подаются слова алфавита $A = \{1, 2, 3, 4, 5\}$, S_6 — симметрическая группа перестановок на множестве $\{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$, где символом «0» мы обозначили

¹E-mail: fdp@bk.ru²E-mail: bikmurzin.sfe@gmail.com

пустую клетку, а $\delta = S \times A \rightarrow S$ — функция перехода. Каждой конфигурации пазла ставится в соответствие перестановка, получаемая выписыванием, сначала, трех элементов первой строки слева направо, а затем трех элементов второй строки справа налево (рис. 1).



Рис. 1. Конфигурация пазла 2×3 .

Четность перестановок из S_5 , выписанных без учета «0», является инвариантом игры. Элемент σ_0 (где $\sigma_0 = (1, 2, 3, 4, 5, 0)$, $\sigma_0 \in S_6$) будем считать принадлежащим множеству S . Получаем соотношение $|S| = |S_6|/2$. Данная статья посвящена изучению алгебры и геометрии множества S , не являющегося, например, подгруппой S_6 . Более точно, мы хотим указать на некоторую связь между молекулой фуллерена C_{60} и графическим изображением множества S (рис. 2).

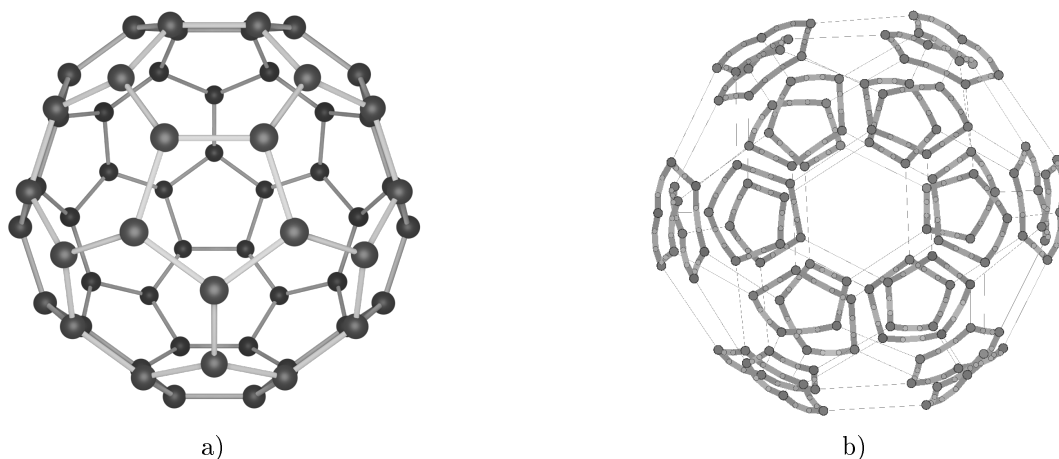


Рис. 2. а) фуллерен C_{60} ; б) граф пазла 2×3 .

Множество S обладает следующими очевидными свойствами:

- $|S| = 6!/2$;
- S распадается на 12 непересекающихся множеств по 30 элементов в каждом;
- каждое множество S^k , $k = I, II, \dots, XII$ задается замкнутой последовательностью из 30 шагов, получаемых движениями пустой клетки вдоль линии обхода игрового поля. Графы таких множеств можно представить в виде кольца с 30 вершинами (рис. 3), поэтому в дальнейшем будем называть их кольцами.

Количество колец S^k будет в действительности ровно 12. Перестановки в пределах одного кольца $\sigma^k \in S^k$ исчерпываются циклическими сдвигами σ^k и всевозможными размещениями нуля. Следовательно, $|S^k| = 5 \times 6 = 30$. Делим теперь $|S|/|S^k|$ и получаем, что количество различных колец равно 12.

2. Визуализация графа S

Если считать перестановки из S вершинами некоторого графа, то они распадутся на два вида: вершины степени 2 и степени 3.

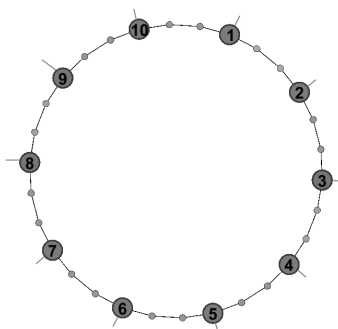


Рис. 3. Граф кольца S^I , где 10 вершин степени 3 выделены пурпурным цветом, а вершины степени 2 — зеленым.

Для визуализации структуры графа из 360 вершин множества S использовалось ПО Gephi (вер. 0.9.2), со встроенным алгоритмом ForceAtlas 2. Были получены следующие варианты изображения графа пазла 2×3 (рис. 4). На рис. 4.1 представлены все двенадцать взаимосвязанных колец в развернутом виде. Для большей наглядности изображения графа вес ребра между вершинами внутри колец был принят в 10 раз больше веса ребра соединяющего вершины смежных колец, а так же вершины степени 2 выделены зеленым цветом, а степени 3 пурпурным цветом и большего размера.

При изменении параметров алгоритма, можно получить два изображения графа S схожего со структурой молекулы фуллерена C_{60} и минимальным количеством самопересечений. На рис. 4.2 видно, что каждое кольцо принимает свернутую (двухслойную) форму и окружено пятью другими кольцами, все кольца трансформированы в двухслойные пятиугольники. Если пренебречь наличием вершин степени два, а слои двухслойных пятиугольников (колец) максимально прижать друг другу, то граф образует классическую форму фуллерена C_{60} (рис. 4.3).

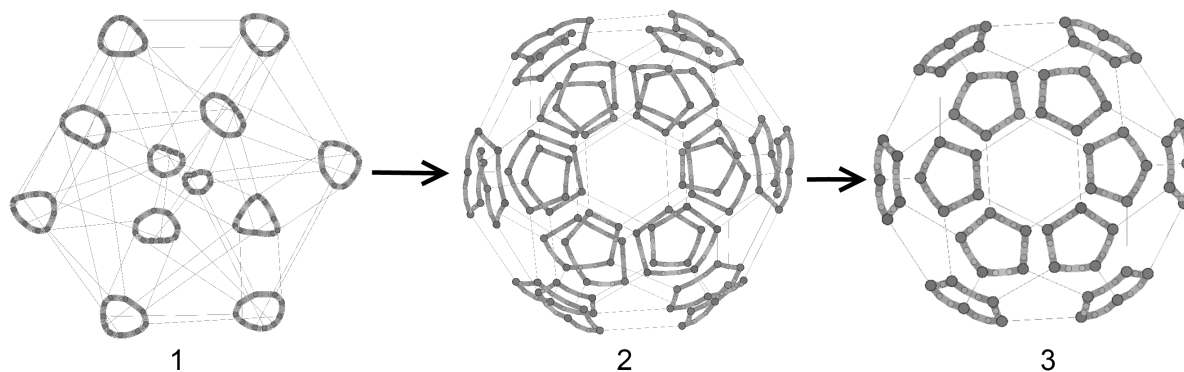
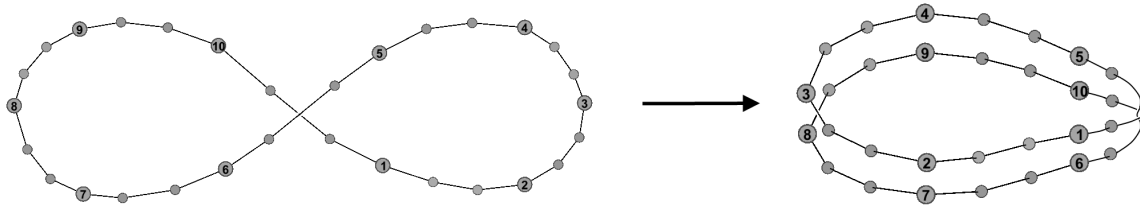


Рис. 4. Различные представления графа S .

Подобная организация графа, через двухслойную структуры колец, объясняется повторным чередованием смежных колец. В распечатке списка вершин кольца S^I (рис. 5) знаком «>>>» помечены десять вершин третьей степени, латинская цифра указывает на номер кольца, в которое можно перейти из данной вершины, а рисунки 3 и 6 показывают трансформацию кольца с 30 вершинами в свернутую, двухслойную структуру. Видно, что первые 5 вершин степени 3 верхнего слоя (рис. 5–6), соединяются с одинаковыми смежными кольцами в том же порядке, что и оставшиеся 5 вершин второго слоя, данная закономерность отслеживается во всех 12 кольцах.

	[0, 1, 2, 3, 4, 5]		[3, 4, 5, 0, 1, 2]
1:	[1, 0, 2, 3, 4, 5]>> II	6:	[3, 4, 5, 1, 0, 2]>> II
	[1, 2, 0, 3, 4, 5]		[3, 4, 5, 1, 2, 0]
	[1, 2, 3, 0, 4, 5]		[0, 4, 5, 1, 2, 3]
2:	[1, 2, 3, 4, 0, 5]>> III	7:	[4, 0, 5, 1, 2, 3]>> III
	[1, 2, 3, 4, 5, 0]		[4, 5, 0, 1, 2, 3]
	[0, 2, 3, 4, 5, 1]		[4, 5, 1, 0, 2, 3]
3:	[2, 0, 3, 4, 5, 1]>> IV	8:	[4, 5, 1, 2, 0, 3]>> IV
	[2, 3, 0, 4, 5, 1]		[4, 5, 1, 2, 3, 0]
	[2, 3, 4, 0, 5, 1]		[0, 5, 1, 2, 3, 4]
4:	[2, 3, 4, 5, 0, 1]>> V	9:	[5, 0, 1, 2, 3, 4]>> V
	[2, 3, 4, 5, 1, 0]		[5, 1, 0, 2, 3, 4]
	[0, 3, 4, 5, 1, 2]		[5, 1, 2, 0, 3, 4]
5:	[3, 0, 4, 5, 1, 2]>> VI	10:	[5, 1, 2, 3, 0, 4]>> VI
	[3, 4, 0, 5, 1, 2]		[5, 1, 2, 3, 4, 0]

Рис. 5. Пример списка вершин кольца S^I .Рис. 6. Преобразование кольца S^I .

Заключение

В результате нашего исследования пазла 2×3 с точки зрения теории автоматов был получен граф, который по своему строению оказался очень похож на структуру фуллерена C_{60} , только в данном случае вместо 60 элементов соединение состоит из 360 вершин, из которых 120 вершины третьей степени и 240 вершин второй степени. Следует отметить так же, что в природе структуры состоящие из вложенных друг в друга концентрических сфер, состоящие из атомов углерода, известны как углерод луковичные структуры или углеродные нанолуковицы. Возможно, из-за особенности строения в два слоя, с двумя видами входящих в ее структуру узлов из 360 элементов, есть вероятность получения нового вида материала.

Список литературы

1. Григорчук Р.И., Некрасевич В.В., Сушанский В.И. Автоматы, динамические системы и группы. *Труды Математического института имени В.А. Стеклова*. 2000. № 231. С. 134–214.
2. Ginzburg A. *Algebraic theory of automata*. Academic Press, 2014.

References

1. Grigorchuk R.I., Nekrashevych V.V., Sushchansky V.I. Automata, dynamical systems, and groups. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, 2000, no. 231, pp. 128–203.
2. Ginzburg A. *Algebraic theory of automata*. Academic Press, 2014.

Авторы

Федченко Дмитрий Петрович, к.ф.-м.н., Сибирский федеральный университет, пр. Свободный, д. 79, г. Красноярск, 660041, Россия.

E-mail: fdp@bk.ru

Бикмурзин Рустам Васильевич, Сибирский федеральный университет, пр. Свободный, д. 79, г. Красноярск, 660041, Россия.

E-mail: bikmurzin.sfe@gmail.com

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Федченко Д. П., Бикмурзин Р. В. Автоматное представление молекул типа фуллерена. *Пространство, время и фундаментальные взаимодействия*. 2020. № 2. С. 95–99.

Authors

Fedchenko Dmitriy Petrovich, Ph.D., Siberian Federal University, Svobodny pr., 79, Krasnoyarsk, 660041, Russia.

E-mail: fdp@bk.ru

Bikmurzin Rustam Vasilovich, Siberian Federal University, Svobodny pr., 79, Krasnoyarsk, 660041, Russia.

E-mail: bikmurzin.sfe@gmail.com

Please cite this article in English as:

Fedchenko D. P., Bikmurzin R. V. Automaton representation of fullerene type molecules. *Space, Time and Fundamental Interactions*, 2020, no. 2, pp. 95–99.