

# 低阶富勒烯图的匹配强迫谱和反强迫谱的连续性

韩 慧, 周玉玉, 王彦通\*

西北师范大学数学与统计学院, 甘肃 兰州

收稿日期: 2023年2月21日; 录用日期: 2023年3月16日; 发布日期: 2023年3月23日

## 摘 要

富勒烯图的凯库勒结构的内、外自由度, 对应于图的完美匹配的强迫数与反强迫数, 可用于衡量化学分子的稳定性。由于使用穷举法计算比较大的分子图给定完美匹配的反强迫数时过于耗时, 因此本文选用相对高效的整数线性规划法计算了  $C_{20}, C_{24}, C_{26}, \dots, C_{58}$  的所有3958个同分异构体的匹配强迫谱和反强迫谱, 据此给出了它们的连续性, 并将相应的结果汇总成了一系列表格和折线图。本文的工作将为富勒烯图的稳定性等研究提供一些理论参考。

## 关键词

富勒烯图, 强迫谱, 反强迫谱, 整数线性规划, 连续性

# Continuity of Matching Forcing Spectra and Anti-Forcing Spectra for Lower-Order Fullerenes

Hui Han, Yuyu Zhou, Yantong Wang\*

College of Mathematics and Statistics, Northwest Normal University, Lanzhou Gansu

Received: Feb. 21<sup>st</sup>, 2023; accepted: Mar. 16<sup>th</sup>, 2023; published: Mar. 23<sup>rd</sup>, 2023

## Abstract

The innate and external degrees of freedom of the Kekulé structure of fullerenes, corresponding to the forcing number and anti-forcing number of the perfect matching of graphs, can be used as a

\*通讯作者。

measure of molecular stability. The exhaustive method is too time-consuming to calculate the anti-forcing number of the perfect matching of large graphs. Therefore, this paper uses efficient integer linear programming to calculate the forcing spectrum and anti-forcing spectrum of all 3958 isomers of  $C_{20}, C_{24}, C_{26}, \dots, C_{58}$ , gives their continuity, and summarizes the results into a series of tables and line charts. The work presented in this paper will provide some theoretical references for studying the stability of fullerenes.

## Keywords

Fullerene, Forcing Spectrum, Anti-Forcing Spectrum, Integer Linear Programming, Continuity

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

近些年来, 图的匹配在有机化学领域的应用尤为突出。图的完美匹配的强迫数与反强迫数等价于多环共轭分子的凯库勒结构的内、外自由度。1985年 Randić 和 Klein [1]第一次提出强迫数的概念, Harary 等[2]在 1991 年研究六角系统的时候将其正式称为强迫数。2004 年, Adams 等[3]定义了图  $G$  的强迫谱  $Spec_f(G)$ , 即图  $G$  的所有完美匹配的强迫数构成的集合。2010 年, 张和平等[4]证明了任意富勒烯图的每个完美匹配的强迫数均不小于 3。

2007 年, Vukičević 和 Trinajstić [5]提出了反强迫数的概念。图  $G$  的反强迫谱区间  $Spec_{af}(G)$  的定义类似于强迫谱, 即图  $G$  的所有完美匹配的反强迫数构成的集合。如果  $Spec_{af}(G)$  是一个整数区间, 则称图  $G$  的反强迫谱区间是连续的; 类似地, 若  $Spec_f(G)$  是一个整数区间, 则称图  $G$  的强迫谱是连续的。2007 年, 邓汉元[6]得到了链状六角系统的反强迫数的算法和反强迫数的上下界。2015 年, 杨琴和张和平等[7]证明了富勒烯图的反强迫数至少为 4, 并且给出了构造所有反强迫数为 4 的富勒烯图的程序, 进而证明了 26 个顶点的所有富勒烯图的反强迫数都为 5。王杰彬、韩振云、姚海元等[8] [9] [10]得出了梯子图及几类变形梯子图的反强迫细谱和反强迫谱的连续性。刘雨童、韩慧、王杰彬等[11]研究了 Möbius 梯状图  $ML_n$  的反强迫谱。刘雨童、马聪聪、姚海元等[12] [13] [14]使用整数线性规划的方法计算了 60 阶等富勒烯图的强迫谱和反强迫数, 并讨论其连续性。在此基础上, 本文沿用他们的整数线性规划法, 计算出了阶数不超过 58 的所有富勒烯图的强迫谱和反强迫谱, 并得出了强迫谱和反强迫谱的连续性, 同时给出了阶数不超过 58 的富勒烯图的所有同分异构体所对应的强迫谱(反强迫谱)构成的表格。

## 2. 预备知识

有限的简单图  $G$  是指一个有序的二元组  $(V(G), E(G))$ , 其中  $V(G)$  表示图  $G$  的顶点集,  $E(G)$  表示图  $G$  的边集。图  $G$  的一个边子集  $M$  称为  $G$  的一个匹配, 如果  $M$  中任意两条边均不相邻, 则称  $M$  中边为  $G$  的匹配边。若存在  $M$  中的边与  $v$  相邻, 则称  $M$  饱和顶点  $v$ , 并且称  $v$  是  $M$  饱和的, 否则称  $v$  是  $M$  非饱和的。若  $G$  的每个顶点都是  $M$  饱和的, 则称  $M$  是  $G$  的完美匹配。即  $G$  的完美匹配是覆盖  $G$  的所有顶点的不相邻边的集合。

设  $M$  是图  $G$  的一个完美匹配, 称  $G$  的圈  $C$  是  $M$ -交错圈, 若圈  $C$  的边交替的出现在  $M$  和  $E(G) \setminus M$  中。若  $M$  的子集  $S$  不包含在  $G$  的其他完美匹配中, 则称  $S$  为  $M$  的强迫集。 $M$  的强迫数是指  $M$  的最小强

迫集的大小, 记作  $f(G, M)$ 。图  $G$  中所有完美匹配强迫数的最小值称为  $G$  的(最小)强迫数, 记作  $f(G)$ ; 而最大值称为  $G$  的最大强迫数, 记作  $F(G)$ 。

设  $S' \subseteq E(G) \setminus M$ , 若  $M$  是  $G - S'$  中唯一的完美匹配, 则称  $S'$  为  $M$  的反强迫集, 其中  $G - S'$  表示从图  $G$  中删除集合  $S'$  中的所有边后剩余的支撑子图。 $M$  的反强迫数是指  $M$  的最小反强迫集的大小, 记作  $af(G, M)$ 。类似地, 将图  $G$  中所有完美匹配反强迫数的最小值称为  $G$  的(最小)反强迫数, 记作  $af(G)$ ; 而最大值称为  $G$  的反最大强迫数, 记作  $Af(G)$ 。

关于图的完美匹配的强迫集和反强迫集有如下刻画。

引理 1 [3] [15] [16] 设  $M$  为图  $G$  的一个完美匹配, 则

- 1)  $S \subseteq M$  是  $M$  的强迫集当且仅当  $S$  包含  $G$  的每个  $M$ -交错圈的至少一条(匹配)边。
- 2)  $S' \subseteq E(G) \setminus M$  是  $M$  的反强迫集当且仅当  $S'$  包含图  $G$  的每个  $M$ -交错圈的至少一条(非匹配)边。

### 3. 整数线性规划法

由于本文需要通过整数线性规划法计算出富勒烯图的强迫谱和反强迫谱, 因此下面简单介绍整数线性规划法的原理。该方法由姚海元、马聪聪、刘雨童等[12] [13] [14]给出。

通过引理 1, 可将寻找最小强迫集  $S \subseteq M$  优化为问题:  $S$  是包含每个  $M$ -交错圈的至少一条(匹配)边的最小边子集。进而, 得到图  $G$  的一个完美匹配  $M$  的强迫数的方法如下:

首先, 给图  $G$  的顶点和边标号, 其次生成图  $G$  的所有完美匹配(本文所使用的完美匹配是利用 C 程序生成的, 此程序是在曾令辉的程序的基础上稍作修改得到的), 再将每个完美匹配依次与其他完美匹配作对称差, 得到该完美匹配的所有  $M$ -交错圈(即作对称差得到的连通分支)。若  $G$  有  $l$  个  $M$ -交错圈, 令  $N = (n_{ij})$  是一个  $l \times n$  矩阵, 它的每个行向量对应于一个  $M$ -交错圈的 0-1 关联向量, 其中交错圈上匹配边的位置为 1, 非匹配边的位置为 0。令  $b$  和  $c$  为全 1 列向量, 其中  $b$  的维数为  $l$ ,  $c$  的维数为  $n$ 。最后, 我们就有了下面的整数线性规划(ILP):

$$\begin{aligned} \text{(ILP): } & \min c^T x \\ & \text{s.t.} \\ & \begin{cases} Nx \geq b, \\ x \in \{0, 1\}^n. \end{cases} \end{aligned}$$

注释:  $M$  的强迫数就是上述(ILP)的最优值, 若想得到  $M$  的反强迫数, 只需在构造矩阵  $N = (n_{ij})$  时将交错圈上匹配边的位置改为 0, 非匹配边的位置改为 1 即可。

### 4. 低阶富勒烯图的强迫谱和反强迫谱及其连续性

本文对阶数不超过 58 的富勒烯图的所有 3958 个同分异构体进行了编号, 其中 48 阶及以内的富勒烯图的同分异构体的数目、编号和邻接关系是通过 Mathematica 软件的数据库直接得到的, 50 阶到 58 阶的富勒烯图的同分异构体的数目、编号和邻接关系是从一个关于富勒烯的网站 <https://hog.grinvin.org/Fullerenes> 上得到的(见图 1)。

**定理 1**  $C_{20}, C_{24}, \dots, C_{58}$  的所有 3958 个同分异构体的强迫谱都是连续的。

**定理 2** 在  $C_{20}, C_{24}, \dots, C_{58}$  的所有 3958 个同分异构体中有 3849 个同分异构体的反强迫谱是连续的。

**定理 3** 在  $C_{20}, C_{24}, \dots, C_{58}$  的所有 3958 个同分异构体中有 109 个的反强迫谱是不连续的。其中次小不连续的有 8 个, 次大不连续的有 101 个。

下面我们以  $C_{54}$  为例, 令  $C_{54}^i, i = 1, 2, \dots, 580$  为  $C_{54}$  的第  $i$  个同分异构体,  $[ ]$  表示连续的整数区间,  $\{ \} \cup [ ]$  表示次小整数不连续的整数区间,  $[ ] \cup \{ \}$  表示次大整数不连续的整数区间。

Vertices	Faces	Fullerenes	IPR Fullerenes	Pent. sep. $\geq 3$	Pent. sep. $\geq 4$	Pent. sep. $\geq 5$
20	12	1	0	0	0	0
22	13	0	0	0	0	0
24	14	1	0	0	0	0
26	15	1	0	0	0	0
28	16	2	0	0	0	0
30	17	3	0	0	0	0
32	18	6	0	0	0	0
34	19	6	0	0	0	0
36	20	15	0	0	0	0
38	21	17	0	0	0	0
40	22	40	0	0	0	0
42	23	45	0	0	0	0
44	24	89	0	0	0	0
46	25	116	0	0	0	0
48	26	199	0	0	0	0
50	27	271	0	0	0	0
52	28	437	0	0	0	0
54	29	580	0	0	0	0
56	30	824	0	0	0	0
58	31	1205	0	0	0	0
60	32	1812	1	0	0	0
62	33	2385	0	0	0	0
64	34	3465	0	0	0	0
66	35	4478	0	0	0	0
68	36	6332	0	0	0	0
70	37	8149	1	0	0	0
72	38	11190	1	0	0	0
71	39	14246	1	0	0	0

Figure 1. Low-order fullerenes

图 1. 低阶富勒烯图(数据来源: <https://hog.grinvin.org/Fullerenes>)

由整数线性规划法我们可以得到  $C_{54}$  所有同分异构体的强迫谱和反强迫谱。例如通过整数线性规划法我们可以计算出  $C_{54}^3$  的每一个完美匹配的强迫数和反强迫数, 并得出  $C_{54}^3$  的强迫谱为连续的整数区间[4, 7], 反强迫谱为次大反强迫数不连续的整数区间[6, 12]  $\cup$  {14}。类似的我们可以得到  $C_{54}$  的其他同分异构体的强迫谱和反强迫谱。

对  $C_{54}$  的同分异构体中强迫谱(反强迫谱)相同的同分异构体编号进行统计, 得到:

1. 具有相同强迫谱的  $C_{54}$  的同分异构体编号如下:

强迫谱为[3, 6]的有 9 个同分异构体, 编号为: 127, 129, 205, 304, 403, 460, 500, 505, 559。

强迫谱为[3, 7]的有 245 个同分异构体, 编号为: 2, 4, 9, 12, 14, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 36, 39, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 51, 58, 60, 62, 63, 64, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 78, 79, 80, 83, 84, 88, 89, 90, 92, 96, 98, 99, 100, 101, 104, 105, 106, 109, 113, 115, 118, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 128, 132, 134, 135, 136, 137, 139, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 155, 156, 158, 159, 160, 161, 162, 165, 167, 170, 173, 174, 183, 188, 190, 191, 192, 196, 199, 200, 201, 203, 204, 206, 207, 208, 209, 218, 219, 220, 222, 223, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 234, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 244, 245, 248, 249, 254, 256, 257, 258, 259, 261, 262, 263, 264, 267, 276, 277, 281, 283, 284, 285, 287, 288, 289, 290, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 301, 302, 305, 306, 308, 309, 312, 314, 316, 323, 324, 325, 327, 328, 335, 338, 340, 341, 346, 349, 350, 351, 356, 357, 358, 359, 361, 362, 363, 365, 367, 374, 375, 377, 379, 380, 382, 383, 387, 395, 397, 400, 401, 402, 404, 406, 407, 430, 431, 432, 433, 438, 440, 442, 455, 456, 457, 462, 464,

466, 471, 472, 476, 478, 481, 494, 495, 497, 498, 503, 512, 516, 517, 518, 519, 521, 523, 526, 531, 543, 546, 548, 554, 561。

强迫谱为[3, 8]的有 11 个同分异构体, 编号为: 7, 10, 11, 13, 27, 59, 61, 74, 91, 116, 119。

强迫谱为[4, 6]的有 12 个同分异构体, 编号为: 166, 268, 405, 411, 469, 506, 511, 524, 527, 529, 542, 544。

强迫谱为[4, 7]的有 284 个同分异构体, 编号为: 1, 3, 5, 6, 8, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 33, 35, 37, 38, 40, 41, 42, 49, 50, 52, 53, 54, 55, 57, 65, 73, 75, 76, 77, 81, 82, 85, 86, 87, 93, 94, 95, 97, 102, 103, 107, 108, 110, 112, 114, 117, 120, 130, 131, 133, 138, 140, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 157, 163, 164, 168, 169, 171, 172, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 184, 185, 186, 187, 189, 193, 194, 195, 197, 198, 202, 210, 211, 213, 214, 215, 216, 217, 233, 235, 236, 243, 246, 247, 250, 251, 252, 253, 255, 260, 265, 266, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 275, 278, 279, 280, 282, 291, 292, 303, 307, 310, 311, 313, 315, 317, 319, 320, 321, 322, 326, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 336, 337, 339, 342, 343, 344, 345, 347, 348, 352, 353, 354, 355, 360, 364, 366, 368, 369, 373, 376, 378, 381, 384, 385, 386, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 396, 399, 408, 409, 412, 413, 414, 415, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 434, 436, 437, 439, 441, 443, 444, 445, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 458, 459, 461, 463, 465, 467, 468, 470, 473, 474, 475, 477, 480, 482, 483, 484, 485, 486, 487, 488, 489, 490, 491, 492, 493, 496, 499, 501, 502, 504, 507, 508, 509, 510, 513, 514, 515, 520, 522, 525, 528, 530, 532, 533, 534, 535, 536, 537, 538, 539, 540, 541, 545, 547, 549, 550, 551, 552, 553, 555, 556, 557, 558, 560, 562, 563, 564, 565, 567, 568, 570, 571, 572, 573, 574, 575, 576, 577, 578。

强迫谱为[4, 8]的有 19 个同分异构体, 编号为: 56, 111, 212, 221, 318, 370, 371, 372, 394, 398, 410, 416, 417, 435, 479, 566, 569, 579, 580。

对上述编号进行统计, 得出  $C_{54}$  的所有 580 个同分异构体所对应的强迫谱区间构成的表格, 其中  $C_{54}$  的强迫谱上界分别为 6, 7, 8, 强迫谱下界分别为 3, 4, 它们构成了 6 个不同的连续强迫谱区间:

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	6	7	8	
3	9	245	11	265
4	12	284	19	315
合计	21	529	30	580

注: 表中数据表示的是每个强迫谱区间的同分异构体个数。

$C_{20}$ ,  $C_{24}$ ,  $C_{26}$  均只有 1 个同分异构体, 强迫谱分别为 {3}, [2, 3], {3},  $C_{30}$  的 3 个同分异构体的强迫谱均为 [3, 4],  $C_{32}$  的 6 个同分异构体的强迫谱均为 [3, 4], 由于它们都只有一个强迫谱区间, 故不做成表格。

由上述方法我们可以得到:

1) 构成 2 个不同的连续强迫谱区间的表格如下:

$C_{28}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	3	4	
3	1	1	2

$C_{34}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	4	5	
3	5	1	6

$C_{36}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	4	5	
3	2	13	15

$C_{38}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	4	5	
3	2	15	17

$C_{42}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	5	6	
3	31	14	45

2) 构成 3 个不同的连续强迫谱区间的表格如下:

$C_{40}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		
			合计
	5	6	
3	35	4	39
4	0	1	1
合计	35	5	40

3) 构成 4 个不同的连续强迫谱区间的表格如下:

$C_{44}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	5	6	7	
3	25	60	1	86
4	3	0	0	3
合计	28	60	1	89

 $C_{48}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		合计
	6	7	
3	148	23	171
4	22	6	28
合计	170	29	199

 $C_{50}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界		合计
	6	7	
3	140	72	212
4	41	18	59
合计	181	90	271

4) 构成 5 个不同的连续强迫谱区间的表格如下:

 $C_{46}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	5	6	7	
3	3	107	2	112
4	1	3	0	4
合计	4	110	2	116

 $C_{52}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	6	7	8	
3	74	212	0	286
4	43	106	2	151
合计	117	318	2	437

$C_{56}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	6	7	8	
3	0	232	48	280
4	2	502	140	644
合计	2	734	188	924

 $C_{58}$ :

强迫谱下界	强迫谱上界			合计
	7	8	9	
3	165	113	0	278
4	538	387	2	927
合计	703	500	2	1205

2. 具有相同反强迫谱的  $C_{54}$  的同分异构体编号如下:

反强迫谱为  $\{4\} \cup [6, 12]$  的有 1 个同分异构体, 编号为: 45。

反强迫谱为  $[5, 12]$  的有 9 个同分异构体, 编号为: 46, 70, 102, 107, 127, 231, 290, 301, 505。

反强迫谱为  $[5, 13]$  的有 25 个同分异构体, 编号为: 1, 7, 12, 13, 14, 25, 30, 43, 44, 47, 58, 68, 96, 99, 104, 106, 108, 230, 264, 267, 288, 289, 292, 299, 395。

反强迫谱为  $[5, 14]$  的有 7 个同分异构体, 编号为: 31, 77, 82, 87, 112, 145, 190。

反强迫谱为  $[6, 11]$  的有 2 个同分异构体, 编号为: 411, 469。

反强迫谱为  $[6, 12]$  的有 149 个同分异构体, 编号为: 18, 35, 39, 55, 100, 121, 122, 124, 128, 129, 132, 135, 136, 140, 141, 142, 149, 152, 153, 158, 166, 174, 191, 200, 204, 205, 208, 223, 224, 227, 229, 232, 235, 237, 239, 241, 248, 250, 255, 256, 257, 260, 268, 269, 271, 272, 282, 284, 295, 296, 300, 303, 304, 314, 321, 324, 331, 337, 341, 345, 351, 354, 356, 357, 359, 362, 364, 371, 373, 378, 379, 381, 392, 396, 402, 403, 404, 405, 406, 408, 419, 422, 431, 440, 441, 442, 443, 455, 459, 460, 463, 467, 470, 472, 475, 482, 484, 485, 488, 493, 498, 500, 501, 502, 508, 510, 511, 512, 513, 514, 516, 518, 519, 521, 523, 524, , 525, 526, 528, 530, 531, 534, 535, 538, 542, 544, 545, 546, 548, 550, 551, 553, 558, 559, 562, 563, 564, 566, 568, 569, 571, 573, 574, 575, 576, 577, 578, 579, 580。

反强迫谱为  $[6, 13]$  的有 295 个同分异构体, 编号为: 4, 5, 9, 15, 17, 19, 21, 22, 23, 24, 26, 32, 33, 34, 36, 37, 38, 40, 42, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 56, 57, 60, 63, 64, 65, 66, 67, 69, 71, 75, 78, 80, 81, 83, 84, 85, 90, 92, 93, 95, 98, 109, 110, 113, 114, 115, 116, 120, 123, 130, 131, 133, 134, 137, 138, 139, 143, 144, 146, 147, 148, 150, 151, 154, 155, 159, 160, 161, 162, 163, 165, 167, 168, 169, 170, 171, 173, 175, 176, 177, 178, 179, 182, 183, 184, 185, 186, 192, 193, 194, 195, 197, 198, 199, 201, 202, 203, 206, 207, 209, 210, 211, 213, 214, 216, 217, 218, 219, 220, 222, 225, 226, 228, 233, 234, 236, 238, 240, 242, 243, 244, 246, 251, 252, 253, 254, 258, 259, 261, 262, 263, 265, 266, 273, 274, 275, 276, 278,



279, 280, 283, 285, 286, 287, 291, 293, 294, 297, 298, 302, 305, 306, 307, 308, 312, 313, 315, 316, 317, 319, 322, 323, 325, 326, 328, 329, 330, 332, 333, 334, 336, 338, 339, 340, 342, 344, 346, 347, 348, 349, 350, 352, 353, 355, 358, 360, 363, 365, 367, 368, 369, 372, 374, 375, 376, 377, 382, 384, 385, 386, 387, 388, 391, 393, 397, 399, 400, 401, 407, 409, 413, 414, 418, 420, 421, 423, 424, 425, 427, 428, 430, 432, 433, 436, 437, 438, 439, 444, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 456, 457, 458, 464, 465, 466, 471, 473, 476, 477, 478, 481, 483, 486, 487, 489, 490, 491, 494, 495, 496, 497, 499, 503, 504, 506, 507, 509, 515, 517, 520, 522, 532, 533, 537, 539, 541, 543, 547, 549, 552, 554, 555, 556, 557, 560, 561, 565, 567, 570, 572。

反强迫谱为 $[6, 12] \cup \{14\}$ 的有 6 个同分异构体, 编号为: 3, 27, 41, 79, 101, 119。

反强迫谱为 $[6, 14]$ 的有 73 个同分异构体, 编号为: 2, 6, 8, 16, 20, 28, 29, 59, 62, 72, 73, 74, 76, 86, 88, 89, 94, 97, 103, 105, 111, 117, 118, 125, 126, 156, 157, 164, 172, 180, 181, 187, 188, 189, 196, 212, 215, 221, 245, 247, 249, 270, 277, 281, 309, 310, 311, 318, 320, 327, 335, 343, 361, 366, 370, 380, 383, 389, 390, 394, 398, 412, 415, 416, 426, 434, 435, 461, 462, 474, 479, 492, 536。

反强迫谱为 $[6, 13] \cup \{15\}$ 的有 5 个同分异构体, 编号为: 10, 11, 61, 91, 410。

反强迫谱为 $[7, 11]$ 的有 1 个同分异构体, 编号为: 527。

反强迫谱为 $[7, 12]$ 的有 4 个同分异构体, 编号为: 429, 445, 468, 529。

反强迫谱为 $[7, 13]$ 的有 2 个同分异构体, 编号为: 480, 540。

反强迫谱为 $[7, 14]$ 的有 1 个同分异构体, 编号为: 417。

对上述编号进行统计, 得出  $C_{54}$  的所有 580 个同分异构体所对应的反强迫谱区间构成的表格, 其中  $C_{54}$  的反强迫谱上界分别为 11, 12, 13, 14, 15, 反强迫谱下界分别为 4, 5, 6, 7, 它们构成了 13 个不同的反强迫谱区间:

反强迫谱下界	反强迫谱上界					合计
	11	12	13	14	15	
4	0	1/0/0*	0	0	0	1
5	0	9	25	7	0	41
6	2	149	295	0/73/6	0/0/5	530
7	1	4	2	1	0	8
合计	3	163	322	87	5	580

注: 表中表示的是每个反强迫谱区间的同分异构体个数; \*:  $x/y/z$  中的  $x, y, z$  分别表示次小反强迫数不连续的同分异构体个数, 反强迫谱连续的同分异构体个数以及次大反强迫数不连续的同分异构体个数。

$C_{20}, C_{24}, C_{26}$  均只有 1 个同分异构体, 它们的反强迫谱分别 $[4, 5], [4, 6], [5, 6]$ , 由于它们都只有一个反强迫谱区间, 故不做成表格。

由上述方法我们可以得到:

1) 构成 2 个不同的连续反强迫谱区间的表格如下:

$C_{28}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界		合计
	6	7	
4	0	1	1
5	1	0	1
合计	1	1	2

2) 构成 3 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{30}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界		合计
	6	7	
4	0	1	1
5	1	1	2
合计	1	2	3

$C_{32}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界		合计
	7	8	
4	1	0	1
5	3	0/1/1	5
合计	4	2	6

$C_{34}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界		合计
	7	8	
4	0	1	1
5	1	4	5
合计	1	5	6

$C_{36}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界		合计
	8	9	
4	0	2	2
5	9	4	13
合计	9	6	15

3) 构成 5 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{38}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界			合计
	8	9	10	
4	0	1	0	1
5	3	11	0/0/1	15
6	1	0	0	1
合计	4	12	1	17

4) 构成 6 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{40}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界				合计
	8	9	10	11	
3	0	0	2	0	2
4	0	19	12	0/0/1	32
5	2	4	0	0	6
合计	2	23	14	1	40

$C_{42}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界			合计
	9	10	11	
4	0	1	0	1
5	8	19	3	30
6	6	8	0	14
合计	14	28	3	45

5) 构成 8 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{46}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界				合计
	9	10	11	12	
4	0	0	1	0	1
5	0	8	21	0/8/1	38
6	1	26	43	0/6/1	77
合计	1	34	65	16	116

6) 构成 9 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{48}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界				合计
	10	11	12	13	
4	0	4	0	0	4
5	4	20	0/22/2	0/1/2	51
6	7	90	42	0/2/3	144
合计	11	114	66	8	199

7) 构成 10 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{44}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界				合计
	9	10	11	12	
4	0	1	1	0	2
5	3	27	16	0/1/1	48
6	3	25	0/9/1	0/0/1	39
合计	6	53	27	3	89

$C_{50}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界					合计
	10	11	12	13	14	
4	0	0	1	0	0	1
5	0	9	21	0/9/1	1	41
6	2	69	129	0/24/4	0/0/1	229
合计	2	78	151	38	2	271

8) 构成 11 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{52}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界				合计
	11	12	13	14	
4	0	1/0/0	1	0	2
5	3	32	0/17/1	0/4/2	59
6	23	206	0/121/3	0/12/10	375
7	1	0	0	0	1
合计	27	239	143	28	437

9) 构成 14 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{58}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界					合计
	12	13	14	15	16	
4	0	0	0	0	1/0/0	1
5	0	3/8/0	27	0/3/4	0	45
6	2	227	557	0/148/9	0/15/11	969
7	4	76	0/74/1	0/29/2	0/0/4	190
合计	6	314	659	195	31	1205

10) 构成 15 个不同的反强迫谱区间的表格如下:

$C_{56}$ :

反强迫谱下界	反强迫谱上界					合计
	12	13	14	15	16	
4	0	1/0/0	1	0	0	2
5	5	1/28/0	15	0/4/1	0	54
6	40	419	0/296/3	0/50/13	0/1/5	827
7	6	22	11	2	0	41
合计	51	471	326	70	6	924

由上述表格可分别得出  $C_{20}, C_{24}, C_{26}, \dots, C_{58}$  的最大强迫数、最小强迫数、最大反强迫数以及最小反强迫数, 并据此绘制出如下两个分别反映这些富勒烯图的强迫数和反强迫数变化规律的折线图(见图 2, 图 3)。由图可知, 它们的最大强迫数和最大反强迫数是一条向上增长的曲线, 而最小强迫数和最小反强迫数近似一条水平直线。

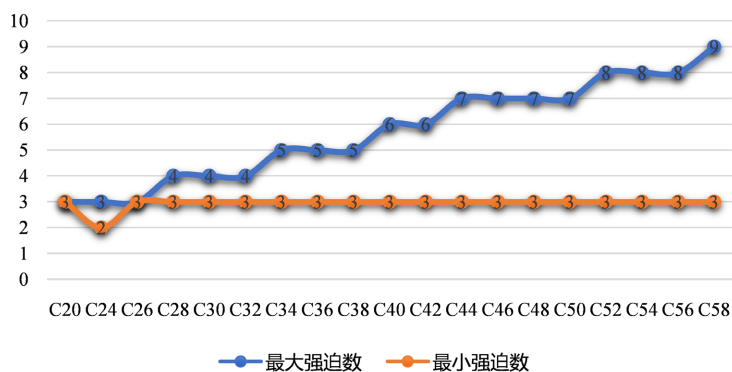
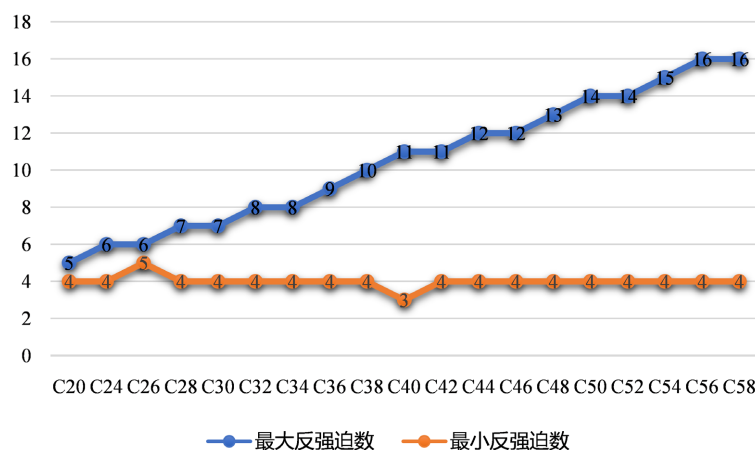


Figure 2. The trend of maximum and minimum forcing numbers in lower-order fullerenes

图 2. 低阶富勒烯图的最大和最小强迫数变化趋势



**Figure 3.** The trend of maximum and minimum anti-forcing numbers in lower-order fullerenes

**图 3.** 低阶富勒烯图的最大和最小反强迫数变化趋势

## 基金项目

国家自然科学基金资助项目(12161081)。

## 参考文献

- [1] Randić, M. and Klein, D.J. (1986) Kekulé Valence Structures Revisited. Innate Degrees of Freedom of  $\pi$ -Electron Couplings. In: Trinajstić, N., Ed., *Mathematics and Computational Concepts in Chemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 274-282.
- [2] Harary, F., Klein, D.J. and Živković, T.P. (1991) Graphical Properties of Polyhexes: Perfect Matching Vector and Forcing. *Journal of Mathematical Chemistry*, **6**, 295-306. <https://doi.org/10.1007/BF01192587>
- [3] 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>
- [4] Zhang, H., Ye, D. and Shiu, W.C. (2010) Forcing Matching Numbers of Fullerene Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **158**, 573-582. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2009.10.013>
- [5] Vukičević, D. and Trinajstić, N. (2007) On the Anti-forcing Number of Benzenoids. *Journal of Mathematical Chemistry*, **42**, 575-583. <https://doi.org/10.1007/s10910-006-9133-6>
- [6] Deng, H. (2007) The Anti-Forcing Number of Hexagonal Chains. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **58**, 675-682.
- [7] Yang, Q., Zhang, H. and Lin, Y. (2015) On the Anti-Forcing Number of Fullerene Graphs. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **74**, 673-692.
- [8] 韩振云, 姚海元. 删边梯子图和“L”型梯子图的反强迫数[J]. 应用数学进展, 2019, 8(8): 1352-1361.
- [9] 姚海元, 王杰彬, 王旭. 循环梯状图的完美匹配的反强迫谱与卢卡斯数列[J]. 西北师范大学学报(自然科学版), 2018, 54(2): 21-25.
- [10] 王杰彬. 几类特殊图的反强迫谱的研究[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 西北师范大学, 2018.
- [11] 刘雨童, 韩慧, 王杰彬. Möbius 梯状图的完美匹配的反强迫多项式和卢卡斯数[J]. 应用数学进展, 2021, 10(8): 2868-2874.
- [12] 马聪聪. 几类富勒烯图的反强迫多项式[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 西北师范大学, 2021.
- [13] 刘雨童. 60 阶富勒烯图的双强迫多项式[D]: [硕士学位论文]. 兰州: 西北师范大学, 2022.
- [14] Liu, Y., Ma, C., Yao, H. and Wang, X. (2002) Computing the Forcing and Anti-Forcing Numbers of Perfect Matchings for Graphs by Integer Linear Programmings. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, **87**, 561-575. <https://doi.org/10.46793/match.87-3.561L>
- [15] Riddle, M.E. (2002) The Minimum Forcing Number for the Torus and Hypercube. *Discrete Mathematics*, **245**,

---

283-292. [https://doi.org/10.1016/S0012-365X\(01\)00228-X](https://doi.org/10.1016/S0012-365X(01)00228-X)

- [16] Lei, H., Yeh, Y.-N. and Zhang, H. (2016) Anti-Forcing Numbers of Perfect Matchings of Graphs. *Discrete Applied Mathematics*, **202**, 95-105. <https://doi.org/10.1016/j.dam.2015.08.024>