Aufgabe 1: Ringbasen - Artischocken_FenderFroechtlingRahlf

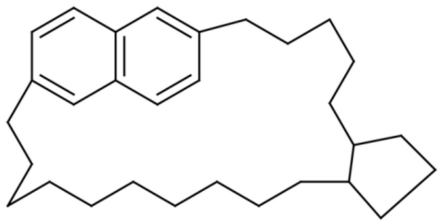

Abbildung 1: Ringbasen

1.) Geben Sie eine kurze Erklärung, inwiefern Vektor- und Ringbasen miteinander verwandt sind. Welchem Hauptkriterium müssen Vektoren genügen, um als Basis einen Vektorraum aufzuspannen?

<u>Vektorbasis:</u>

Eine **Vektorbasis** eines Vektorraumes V wird als Teilmenge der Vektoren v1 bis n in V, die **linear unabhängig** sind und **V aufspannen** definiert.[1]

Z.B.: mögliche Basis im Dreidimensionalen (Orthonormalbasis):

$$\vec{x} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} \; \vec{y} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \; \vec{z} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

Durch Kombination dieser und der Vielfachen dieser Vektoren kann **jeder Punkt** im 3-dimensionalen Raum dargestellt werden.[2]

Z.B.: $\underset{a}{\rightarrow} = \begin{pmatrix}2\\1\\6\end{pmatrix} = 2\vec{x} + 1\vec{y} + 6\vec{z}$

<u>Ringbasis:</u>

Die Menge C(G) aller Zyklen eines Graphen G wird Zyklenraum genannt. Eine Menge B von Zyklen wird **Zyklenbasis** genannt, wenn gilt[3]:

1) **Jeder Zyklus** in G lässt sich durch **Addition von Zyklen aus B** konstruieren (vollst. Überdeckung): $\forall c \in C(G): \exists B_c \subseteq B: \bigoplus_{b \in B_c} b = c$
2) Kein Zyklus aus B lässt sich durch die anderen Zyklen aus B konstruieren (**lineare Unabhängigkeit** der Zyklen in B): $\forall c \in B: \exists \neg B_c \subseteq B\{c\}: \bigoplus_{b \in B_c} b = c$

Die zyklomatische Zahl μ(G)=|E|+|V|+1 gibt die Anzahl der Zusammenhangskomponenten an und damit die Anzahl der Zyklen aus denen die Basis besteht. [3]

<u>Verwandtschaft von Vektor- und Ringbasen:</u>

Beide Basen sind Teil des Vektor-/Zyklenraums und die Vektoren oder Zyklen der Basis sind linear unabhängig. Analog zur Vektorbasis lassen sich mit der Zyklenbasis alle Zyklen des Zyklenraums konstruieren. Bei Zyklen passiert das durch Addition der Zyklen aus B, bei Vektoren werden dazu die Kombinationen der Basisvektoren und deren Vielfachen verwendet. Die Hauptkriterien der Basen entsprechen sich also. Der Zyklenraum der Zyklenbasis ist jedoch auf die Ringe eines bestimmten Moleküls beschränkt, wohingegen eine Vektorbasis eines n-dimensionalen Raums jeden Vektor des n-dimensionalen Raums darstellen kann.

---

1 https://mathworld.wolfram.com/VectorBasis.html, 27.05.2020

2 https://www.abiweb.de/mathematik-analytische-geometrie-lineare-algebra-agla/einleitung-und-grundlagen/vektorraum-basis-und-dimension.html , 27.05.2020

3 Matthias Rarey: Vorlesung CIW: Kap2_Cheminf2.pdf, Folie 33

2.) Bestimmen Sie für das Molekül aus Abb.1 eine minimale Ringbasis.
Definition minimale Zyklenbasis[4]:
Eine Zyklenbasis B eines Graphen G mit |B|=min{|B'| |B' ist eine Zyklenbasis von G} heißt minimale Zyklenbasis (in der Chemieinformatik gleichbedeutend mit SSSR). Die Länge für eine Menge B von Zyklen ist dabei definiert als $|B| = \sum_{c \in B} |c|$.
Eine minimale Zyklenbasis besteht immer aus elementaren Zyklen, ist aber nicht eindeutig.[5]
µ(G)=33-30+1=4
Die Anzahl der Zyklen aus denen die Zyklenbasis besteht ist demnach 4 (s.Abb. 2).

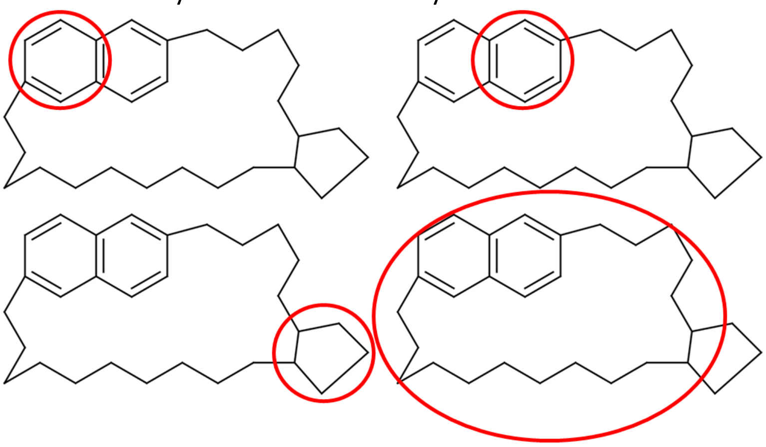

Abbildung 2: Zyklen der Zyklenbasis

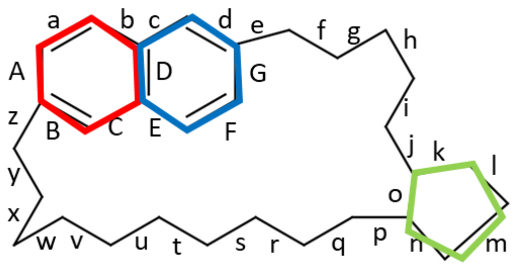

Abbildung 3: Molekül mit Kantenbeschriftungen und farbig markierten Zyklen in rot, blau, grün, schwarz; für den Ring in schwarz ergeben sich mehrere Möglichkeiten, er ist nicht eindeutig bestimmbar

Bei Addition der Knoten erhält man die Zahl |B|=6+6+5+23=40 als minimale Zyklenbasis (s. auch Aufgabe 3).

[4] Matthias Rarey: Vorlesung CIW: Kap2_Cheminf2.pdf, Folie 36
[5] Matthias Rarey: Vorlesung CIW: Kap2_Cheminf2.pdf, Folie 37

3.) Welcher Ring entsteht bei Addition aller Ringe der Basis? Geben Sie Ihren Rechenweg an.

Tabelle 1: Repräsentation der Zyklen durch Kantenvektoren nach Abb. 3

Kanten	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l	m	n	o	p	q	r	s	t	u	v	w	x	y	z	A	B	C	D	E	F	G
C_rot(r)	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0
C_blau(b)	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1
C_grün(g)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C_schwarz(s)	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	0	1	1	1
C_schwarz2(s2)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
C_rb	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1
C_rbg	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1
C_rbgs	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
C_rgbs2	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	0	1	1	1

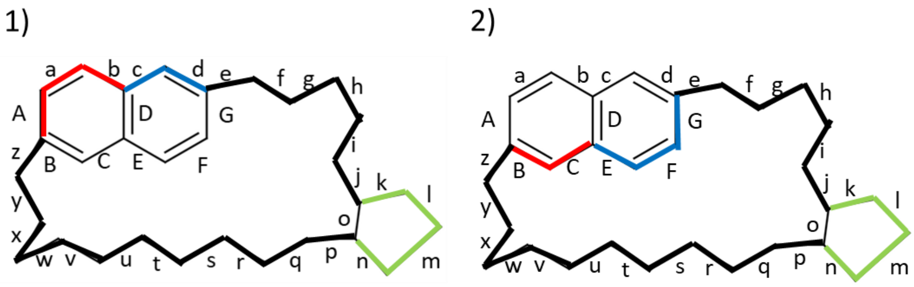

Abbildung 4: Ringe, die bei der Addition der aller Ringe der Basis entstehen können: 1) C_rgbs 2) C_rgbs2

In Abb.4 sieht man Ringe, die bei der Addition aller Ringe der Basis entstehen können. Die Berechnung dazu erfolgt in Tabelle 1 mittels logischem AND als Multiplikation. Abbildung 4 zeigt jedoch keine vollständige Abbildung aller Ringe, die bei der Addition aller Ringe der Basis entstehen können. Denkbar ist z.B. auch ein Ring wie in Abb. 4 2), wobei statt der Kanten E, F, G, die Kanten D, c und d ausgewählt wurden. Beide Ringbasen in Abb. 4 sind minimal, die minimale Ringbase ist jedoch nicht eindeutig bestimmbar.

4.) Bestimmen Sie alle relevanten Ringe des Moleküls aus Abb. 1. Teilen Sie die Zyklen auf in essentielle und nicht essentielle Zyklen. Geben Sie nur ein Atom und eine Bindung an, mit denen alle nicht-essentiellen Zyklen in eine RCF (relevant cycle family) fallen. Gibt es ein Paar (Atom, Bindung), bei denen die nicht-essentiellen Zyklen in mehrere RCFs zerfallen?

Definition relevante Zyklen (Plotkin):
„Ein Zyklus ist relevant, genau dann, wenn er zu mindestens einer minimalen Zyklenbasis gehört.“[6]
Satz nach Vismara:
„Ein Zyklus ist relevant, genau dann, wenn es keine Menge $C_1,\ldots,C_k$ elementarer Zyklen gibt mit $|C_i|<|Z|$ für alle $i=1,\ldots,k$ mit $Z=C_1 \oplus C_2 \oplus \ldots C_k$“[6]
Daraus folgt, dass alle Zyklen, die in Tabelle 1 genannt werden, zu den relevanten Zyklen nach Plotkin gehören, da sie zu mindestens einer Zyklenbasis gehören. Alle Kombinationen der

6 Matthias Rarey: Vorlesung CIW: Kap2_Cheminf2.pdf, Folie 47

Zyklenbasen enthalten mindestens eine Zyklenbasis und gehören daher nach Plotkin zu den relevanten Zyklen.

Definition essentielle Ringe:
„Ein Zyklus C ϵ C_R heißt essentiell, wenn er in allen minimalen Zyklenbasen enthalten ist. Essentielle Zyklen sind polynomiell und eindeutig, beschreiben aber nur einen Teil der Ringstruktur.“[7]
Der rote, blaue und grüne Ring sind die essentiellen Zyklen, da sie in allen minimalen Zyklenbasen enthalten sind. Für den großen schwarzen Ring ergeben sich mehrere Möglichkeiten, er ist kein essentieller Zyklus (s. Abb. 4).
Definition relevante Zyklenfamilien:
„Sei C ein relevanter Zyklus, die Familie F(C) ist definiert als:
$F(C) = \{C' \in C_R \,|\, |C| = |C'| \wedge r(C) = r(C') \wedge e(C) = e(C')\}$ „[6]
Das heißt, dass Zyklen einer relevanten Zyklenfamilie alle die gleiche Anzahl an Knoten beinhalten, sowie mit dem gleichen Knoten und der gleichen Kante starten.
Um alle nicht-essentiellen Ringe in eine RCF fallen zu lassen, könnte man z.B. den Knoten zwischen h und i und die Kante h auswählen, die alle nicht-essentiellen Zyklen beinhalten.
Bei Wählen des Knotens zwischen c und d oder Wählen des Knotens zwischen E und F und entsprechenden Startkanten (z.B. c und E) zerfallen die nicht-essentiellen Zyklen in mehrere RCFs.

[7] Matthias Rarey: Vorlesung CIW: Kap2_Cheminf2.pdf, Folie 53