متعـــــــددة حـــدود وينـــر لمركب البارافين المتعدد - الحلقات

أحمد محمد علي

كلية علوم الحاسبات والرياضيات

جامعة الموصل

تاريخ استلام البحث:٢٠٠٦/٩/٣ **تاريخ قبول البحث:٢٠٠٦/١٢/٢٤**

ABSTRACT

The distance between any two vertices u and v in a connected graph G is defined as the length of the shortest path between them, and it is denoted by d(u,v).The sum of distances for all unordered pairs of distinct vertices in G represents Wiener index.

The number of pairs of vertices G which are distance k apart is denoted by d(G,k), it is clear that the number of d(G,k) is graphical invariant, and the Wiener polynomial of graph G is a generating function of the sequence d(G,k).

In this paper, we find the Wiener polynomial of multi-circles of paraffin structural, and this formula which we obtained is better than the formula prove in [5] , because we are able to evaluate coefficients for any limited power of x without depending on the number of circles , and we find the Wiener index and average distance for this structural.

Lastly, we contracted a MATLAB program to evaluate the Wiener polynomial coefficient ,Wiener index and average distance.

الملخـــص

تعرف المسافة بين أي راسين u و v في بيان متصل G على أنها الطول لأقصر درب بين u و v في G، ويرمز لها بالرمز d(u,v)، إن مجموع المسافات لكل الأزواج غير المرتبة من الرؤوس المختلفة في G تمثل دليل وينر.

يرمز لعدد الأزواج من رؤوس G التـــي هـــي علـــى مـــسافة k مـــن بعـــضيهما بالرمز d(G,k)، معروف أن العدد d(G,k) هو لا متغير بياني، وأن متعددة حدود وينر للبيان G هي الدالة المولدة للمتتابعة d(G,k).

في هذا البحث وضعنا صيغة عامة لمتعددة حدود وينر لمركب البـــارافين المتعـــدد - الحلقات. (multi-circles of paraffin structural) وهذه الصيغة التي حصلنا عليهـــا هـــي

أفضل من الصيغة التي وجدت في [5]، وذلك للتمكن من إيجاد المعامل لأي قوى معينة لـــ x دون الاعتماد على عدد الحلقات، كما أوجدنا دليل وينر ومعدل المسافة لهذا المركب.

وأخيرا تم إنشاء برنامج بنظام MATLAB لاحتساب معاملات متعددة حـــدود وينـــر ودليل وينر ومعدل المسافة لهذا المركب.

المقدمة:

في الكثير من التراكيب الكيميائيـــة نلاحـــظ وجود بيانـــات من النظـــــام االـــسداسي (Hexagonal systems) الذي يتكون من حلقات سداسية متصلة مع بعضها البعض، وأن أيـــة حلقتين في هذا النظام إما أن تكون مشتركة بحافة أو غير مشتركة.

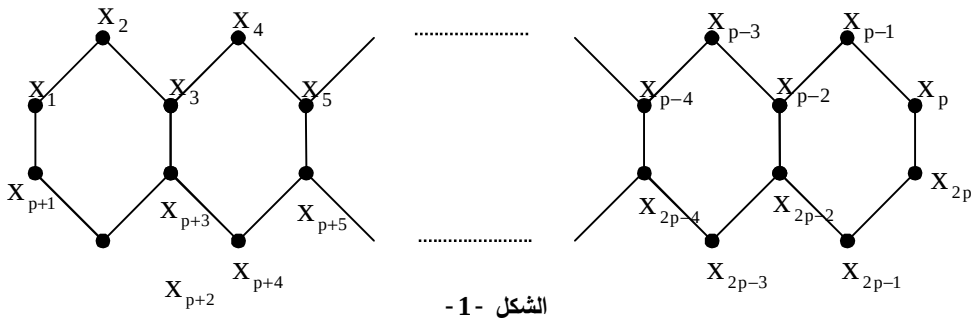
وبتطابق كل حلقة سداسية برأس، وإيصال أي رأسين من الرؤوس الناتجة بحافة عندما تكون الحلقتان مشتركتين بحافة، فأن البيان الناتج يسمى البيان المميز (Characteristic graph) للنظام السداسي.

ويقال للنظام السداسي بـــ (Catacondensed) إذا لم تكن هناك ثلاث حلقات سداسية تشترك برأس واحد.

إن أنواعا من الأنظمة (Catacondensed) السداسية غير المتفرعة تحتوي على بيانات بحيث أن كل بيان مميز يكافئ بيان درب ([2] ,[6]).

تعريف:

يقال لنظام الحلقة السداسية (Catacondensed) غير المتفرع : بأنه مركب البارافين المتعدد- الحلقات (multi-circles of paraffin structural) ، والذي يـــسمى أحيانـــا بـــــ (Hexagonal ring band graph) إذا كانت كل حافة مشتركة بين أية حلقتين تكون منـــاظرة لكل الحافات المشتركة بين أية حلقتين النظام نفسه، كما مبين في الشكل -1-.



الشكل -1-

مركب البارافين المتعدد-الحلقات

وسوف نرمز لهذا النوع من المركبات بـــ H_{2p}، حيـث أن 2p تمثـل عـدد ذرات الكاربون والتي تقابل رتبة البيان، وأن p دائما هو عدد فردي.

في البيان المتصل G ذي القطر δ، يرمز لعدد الأزواج من رؤوس G التي هي علـى بعد k من بعضيهما بالرمز d(G,k)، حيث أن $k=0,1,2,...,\delta$.

إذ تعرف متعددة حدود وينر[3](Wiener Polynomial) للبيان G على أنها:

$$W(G;x)=\sum_{k=0}^{d} d(G;k)x^k;$$

ويعرف دليل وينر(Wiener Index) للبيان G: بأنه مجموع المسافات بين كل أزواج الـرؤوس في G، أي أن

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

إذ أن المجموع يؤخذ على كل رأسين مختلفين u و v في G.

و يمكن التعبير عن دليل وينر بالاعتماد على متعددة حدود وينر بأنه مـشتقة متعـددة حدود وينر بالنسبة لـــ x، عندما x=1، أي أن

$$W(G)=W'(G;x)\big|_{x=1}=\sum_{k=1}^{d} kd(G;k)$$

حيث أن $W'(G;x)$ يمثل مشتقة متعددة حدود وينر.

وإذا كان عدد الرؤوس في البيان المتصل G هو p، فأن هنالك $\frac{1}{2}p(p-1)$ من الأزواج غير المرتبة للرؤوس المختلفة في البيان G. يمكننا الآن أن نعرف معدل المـسافة (average distance) [1] للبيان G على أنه ناتج قسمة دليل وينر للبيان G على $\frac{1}{2}p(p-1)$ ، وكمـــا يرمز لمعدل المسافة للبيان G بـــ $\overline{D}(G)$، أي أن

$$\overline{D}(G)=\frac{W(G)}{p(p-1)/2}$$

ولا بد لنا أن نذكر أن العالم H.Wiener [3] كان أول من درس المسافة الكليـة فـي البيانات التي لاحظها في تراكيب الجزئيات الكيميائية، إذ أن نتائجه ومساهماته كانت معروفـة تماما لعلماء الكيمياء المختصين ولكن معرفة علماء الرياضيات بها كانت محدودة. وأن الفائدة من متعددة حدود وينر هي للحصول على المسافة الكلية والتي تمثل دليل وينر (Wiener index)، والذي له استخدامات واسعة في الكيمياء [1].

المبرهنة:

إن متعددة حدود وينر لمركب البارافين المتعدد- الحلقات H_{2p} من الرتبة 2p هي

$$W(H_{2p};x)=\sum_{k=0}^{d} d(H_{2p},k)x^k;$$

حيث أن

$$d(H_{2p},0)=2p\ ;$$

$$d(H_{2p},1)=\frac{1}{2}(5p-3)\ ;$$

$$d(H_{2p},k)=4(p-k)+2+R\ ;\quad k=2,3,\dots,d \qquad \dots(1)$$

حيث أن

$$R=\begin{cases}(p-1)/2 & \text{when k=3}\\ 0 & \text{other wise}\end{cases}$$

وأن القطر هو p، أي أن $\delta = p$.

البرهان:

نفرض أن رؤوس البيان H_{2p} موسومة بالصيغة

$$V_1=\{x_1,x_2,\dots,x_p\}$$
$$V_2=\{x_{p+1},x_{p+2},\dots,x_{2p}\}$$

سوف نرمز للمسافة بين أي رأسين في V_i على بعد k من بعضيهما بـــ $d(H_{2p},k)_{V_i}$ ، حيث أن i=1,2، ونرمز للمسافة بين رأس من V_1 مع رأس من V_2 على بعد k من بعضيهما بـــ $d(H_{2p},k)_{V_1V_2}$.

نلاحظ أن

$$d(H_{2p},k)_{V_i}=d(P_p,k)=p-k\quad ;\quad i=1,2$$

لكل $k=0,1,2,\dots,p$.

حيث أن P_p هو درب برتبة p.

من الواضح أن $d(H_{2p},0)=d(H_{2p},0)_{V_1}+d(H_{2p},0)_{V_2}=p+p=2p$ وأن

$$d(H_{2p},1)=d(H_{2p},1)_{V_1}+d(H_{2p},1)_{V_2}+d(H_{2p},1)_{V_1V_2}$$
$$=(p-1)+(p-1)+\frac{1}{2}(p+1)=\frac{1}{2}(5p-3)$$

حيث أن $d(H_{2p},1)_{V_1V_2} = \sum_{i=1}^{(p+1)/2} d(x_{2i-1},H_{2p},1)_{V_2} = \sum_{i=1}^{(p+1)/2} 1 = \frac{1}{2}(p+1)$

الآن نتبع طريقة الاستقراء الرياضي لإثبات العلاقة (1).

عندما k=2، فأن

$$d(H_{2p},2) = d(H_{2p},2)_{V_1} + d(H_{2p},2)_{V_2} + d(H_{2p},2)_{V_1V_2}$$
$$= (p-2) + (p-2) + 2 + 2(p-2) = 4(p-2) + 2$$

حيث أن

$$d(H_{2p},2)_{V_1V_2} = \sum_{i=1}^{p} d(x_i,H_{2p},2)_{V_2} = 1 + \sum_{i=2}^{p-1} d(x_i,H_{2p},2)_{V_2} + 1$$
$$= 1 + \sum_{i=2}^{p-1} 2 + 1 = 2 + 2(p-2)$$

عندما3=k، فأن

$$d(H_{2p},3) = d(H_{2p},3)_{V_1} + d(H_{2p},3)_{V_2} + d(H_{2p},3)_{V_1V_2}$$
$$= (p-3) + (p-3) + 4 + 2(\frac{p-1}{2}) + 3(\frac{p-5}{2})$$
$$= 4(p-3) + 2 + (p-1)/2$$

حيث أن

$$d(H_{2p},3)_{V_1V_2} = \sum_{i=1}^{p} d(x_i,H_{2p},3)_{V_2} = 1 + 2 + \sum_{i=3}^{p-2} d(x_i,H_{2p},3)_{V_2} + 2 + 1$$
$$= 1 + 2 + \sum_{j=2}^{(p-1)/2} d(x_{2j-1},H_{2p},3)_{V_2} + \sum_{j=2}^{(p-3)/2} d(x_{2j},H_{2p},3)_{V_2} + 2 + 1$$
$$= 3 + \sum_{j=2}^{(p-1)/2} 2 + \sum_{j=2}^{(p-3)/2} 3 + 3 = 4 + 2(\frac{p-1}{2}) + 3(\frac{p-5}{2})$$

عندما k=4، فأن

$$d(H_{2p},4) = d(H_{2p},4)_{V_1} + d(H_{2p},4)_{V_2} + d(H_{2p},4)_{V_1V_2}$$
$$= (p-4) + (p-4) + 2 + 2(p-4) = 4(p-4) + 2$$

حيث أن

$$d(H_{2p},4)_{V_1V_2} = \sum_{i=1}^{3} d(x_i,H_{2p},4)_{V_2} + \sum_{i=4}^{p-3} d(x_i,H_{2p},3)_{V_2} + \sum_{i=p-2}^{p} d(x_i,H_{2p},3)_{V_2}$$
$$= \sum_{i=1}^{3} 1 + \sum_{i=4}^{p-3} 2 + \sum_{i=p-2}^{p} 1 = 3 + 2(p-6) + 3 = 2 + 2(p-4)$$

نفرض أن الصيغة (1) صحيحة عندما k=r، أي أن

$$d(H_{2p},r) = 4(p-r) + 2$$

ألان سوف نبرهن أن الصيغة (1) صحيحة عندما k=r+1 ،

$$\begin{aligned} d(H_{2p},r+1) &= d(H_{2p},r+1)_{V_1} + d(H_{2p},r+1)_{V_2} + d(H_{2p},r+1)_{V_1V_2} \\ &= (p-(r+1)) + (p-(r+1)) + 2 + 2(p-(r+1)) \\ &= 4(p-(r+1)) + 2 \end{aligned}$$

حيث أن

$$\begin{aligned} d(H_{2p},r+1)_{V_1V_2} &= \sum_{i=1}^{r} d(x_i,H_{2p},r+1)_{V_2} + \sum_{i=r+1}^{p-r} d(x_i,H_{2p},r+1)_{V_2} \\ &\quad + \sum_{i=p-r+1}^{p} d(x_i,H_{2p},r+1)_{V_2} \\ &= \sum_{i=1}^{r} 1 + \sum_{i=r+1}^{p-r} 2 + \sum_{i=p-r+1}^{p} 1 = r + 2(p-2r) + r \\ &= 2(p-(r+1)) + 2 \end{aligned}$$

النتيجة:

دليل وينر لمركب البارافين المتعدد- الحلقات H_{2p} من الرتبة 2p هي

$$W(H_{2p}) = \frac{1}{3}p(p+1)(2p+1) - 1.$$

وأن معدل المسافة لهذا المركب لا يزيد على $\frac{1}{3}(p+3)$.

البرهان:

$$\begin{aligned} W(H_{2p}) = W'(H_{2p},x)\big|_{x=1} &= \frac{1}{2}(5p-3) + 8(p-2) + 4 + 12(p-3) + 6 \\ &\quad + \frac{3}{2}(p-1) + \sum_{k=4}^{p} 4k(p-k) + 2k \end{aligned}$$

ويمكن كتابة الصيغة أعلاه بالشكل الاتي

$$\begin{aligned} W(H_{2p}) &= -1 + \sum_{k=1}^{p} 4k(p-k) + 2k \\ &= -1 + 2(2p+1)\sum_{k=1}^{p} k - 4\sum_{k=1}^{p} k^2 \\ &= -1 + 2(2p+1)\left(\frac{p(p+1)}{2}\right) - 4\left(\frac{p(p+1)(2p+1)}{6}\right) \\ &= -1 + \frac{1}{6}p(p+1)(2p+1)(6-4) = \frac{1}{3}p(p+1)(2p+1) - 1 \end{aligned}$$

وأن معدل المسافة

$$\overline{D}(H_{2p}) = \frac{W(H_{2p})}{2p(2p-1)/2}$$

$$= \frac{p(p+1)(2p+1)-3}{3p(2p-1)}$$

وبعد تبسيط المقدار نحصل على

$$\overline{D}(H_{2p}) = \frac{1}{3}(p+2) + \frac{(p-1)}{p(2p-1)}$$

نلاحظ أن المقدار $\frac{(p-1)}{p(2p-1)}$ لا يزيد عن $\frac{1}{3}$ مهما كانت قيمة p .(حيـــث أن p تكـــون دائما أكبر أو يساوي 3 في هذه المركبات).

إذا $\overline{D}(H_{2p}) < \frac{1}{3}(p+2) + \frac{1}{3} = \frac{1}{3}(p+3)$

حيث أن المقدار $\frac{1}{3}(p+3)$ يمثل القيد الأعلى لمعدل المسافة لـــ H_{2p} ولا يمثل القيـــد الحدي الأعلى.

فإذا أخذنا قيمة p مثلا هي 7 فأن

$$W(H_{14};x) = 14+16x+22x^2+21x^3+14x^4+10x^5+6x^6+2x^7$$
$$W(H_{14}) = 279$$
$$\overline{D}(H_{2p}) = 279/91 \cong 3.0659 < 3.3333$$

وأخيرا صممنا برنامج بلغة MATLAB لاحتساب المعاملات لمتعددة حـــدود وينـــر كمتتالية من الأعداد مبتدأ بالمعامل لقوى صفر ومنتهية بالمعامل للقوى p، وكذلك يعطي دليـــل وينر ومعدل المسافة بمجرد إدخال قيمة p.

وللتأكد من دقة البرنامج أدخلنا p=7 فكانت النتائج مطابقة، ابتداء من المعاملات لمتعددة حدود وينر، دليل وينر ومعدل المسافة.

الخوارزمية:

1. أبدأ.
2. أدخل قيمة p (التي تمثل عدد ذرات الكاربون).
3. إنشاء مصفوفة التجاورA (عن طريق تجزئة المصفوفة A إلى أربـــع مـــصفوفات جزئيـــة وتعريف هذه المصفوفات ثم إجراء بعض العمليات عليها)، ومـــن المعلـــوم أن المـــصفوفة A مصفوفة متناظرة.
4. تعريف مصفوفة ابتدائية صفرية B ومصفوفة ابتدائية صفرية s.

5. ضع k=1.
6. ضع s(k)=0.
7. احتساب المصفوفة C، C=A^k.
8. ضع i=1.
9. ضعj=i+1.
10. إذا كان $A(i,j) \neq 0$ و $B(i,j) = 0$ ، فأن

$$s(k) = s(k) + 1 \qquad B(i,j) = k$$

11. ضع j=j+1.
12. إذا كان j<=2*p أذهب إلى الخطوة 10 و إلا اجعل i=i+1.
13. إذا كان i<=2*p-1 أذهب إلى الخطوة ٩ و إلا اجعل k=k+1.
14. إذا كان k<=p أذهب إلى الخطوة 6.
15. نطبع معاملات متعددة حدود وينر [2*p s(1) s(2) s(3) … s(p)] .
(ابتداء من المعامل للقوى صفر إلى المعامل للقوى p).
16. نطبع دليل وينر $index = \sum_{k=1}^{p} k\, s(k)$.
17. نطبع معدل المسافة average = index / p(2*p-1).
18. النهاية.

البرنامج

```
% Program to evaluate Coefficients of Wiener Polynomial, Wiener index and
Average distance for multi-circles of paraffin structural G of order 2*p.(p is
positive odd integer number).
p=input(' input p =  ');
a=ones(1,p-1);
b=diag(a,1)+diag(a,-1);
c=eye(p,p);
for i=2:2:p-1
   c(:,i)=0;
end
% A is adjacency matrix of the graph.
A=[b c;c b];
B=zeros(2*p,2*p);
s=zeros(1,p);
for k=1:p
   s(k)=0;
```

```
   C=A^k;
     for i=1:2*p-1
       for j=i+1:2*p
          if (C(i,j)~=0)&(B(i,j)==0)
          B(i,j)=k;
          s(k)=s(k)+1;
          end
       end
     end
end
% coefficient stands for the Wiener polynomial coefficients.
coefficients=[2*p,s]
% [2*p,s]is given matrix with size (1,p+1) such that the first element is
% 2*p, and other elements are matrix elements s.
% Wiener index of G is given by index.
index=sum(polyder(fliplr(coefficients)))
% average distance of G is given by average.
average=index/(p*(2*p-1))

RUN
input p =  7
coefficients =
   14    16    22    21    14    10     6     2
index =
  279
average =
   3.0659
```

المصادر

[1] J.I. Doyle and J.E. Graver (1977) "Mean distance in a graph", **Discrete Math**., **Vol. 17**, PP.147-154.

[2] A.A. Dobrynin (1993) "On decomposition of the Wiener index for Graphs of Catacondensed Hexagonal Systems", **Graph Theory Notes of New York**; XXV. PP.19-21**.**

[3] I. Gutman (1993) "Some properties of the Wiener polynomial", **Graph Theory Notes of New York**; **XXV**. PP.13-18.

[4] H. Hosoya (1988) "On some counting polynomials in chemistry", **Discrete Applied Math**. **19**,PP.239-257.

[5] Walid A.M. Saeed (1999) **Wiener Polynomials of Graphs**, Ph.D. Thesis , Mousl University.

[6] H. Wiener (1947) "Structural determination of paraffin boiling points", **J. Amer. Chem. Soc., 69** , PP.17-20.