یافتن عدد وینر برای گراف پلی تیوفتن و ارائه یک چند جمله ای درجه سه با استفاده از عدد $\mathrm{PT_n}$

ابوالفضل عقدائی [۱]، دکتر غلامحسین فتح تبار [۲]

[۱] دانشجوی کارشناسی دانشکده علوم ریاضی، آمار و علوم کامپیوتر دانشگاه کاشان، کاشان، ایران
aghdaee80@std.kashanu.ac.ir

[۲] دانشیار دانشکده علوم ریاضی، آمار و علوم کامپیوتر دانشگاه کاشان، کاشان، ایران
fathtabar@kashanu.ac.ir

چکیده. فرض کنید $\mathrm{G = (V, E)}$ گراف مربوط به مولکول پلی تیوفن باشد،به طوری که مجمو رئوس با V و مجموعه یال ها با E نشان داده می شوند. مجموعه تمام فاصله های بین هر دو راس از گراف G را پایای وینر گویند و با $\mathrm{W(G)}$ نشان می دهند. دراین مقاله روشی برای بدست آوردن پایای گراف وینر و همچنین چند جمله ای درجه سه برای گراف پلی تیوفن با استفاده از مقدار $\mathrm{PT_n}$ که نمایانگر تعداد پنج ضلعی های موجود درگراف مورد نظر است ارائه شده است.
واژه‌های کلیدی: پلی تیوفن، پایای وینر، گراف .

---

۱. مقدمه

زوج $\mathrm{G = (V, E)}$ را که در آن V یک مجموعه ناتهی و E زیر مجموعه ای از تمام زیرمجموعه های دو عضوی V است. که در این مقاله منظور از E اتم های موجود در مولکول پلی تیوفن و V پیوندهای مولکولی بین اتم ها می باشد.
پایای یک گراف عددی است که به گراف نسبت داده می شود طوری که نسبت به یکریختی گراف تغییر نمی کند. برای مثال تعداد یال های یک گراف پایای گراف است.
تعداد یال های کوتاه ترین مسیر بین دو راس u و v ازگراف G فاصله بین این دو راس گراف نامیده می شود و با $\mathrm{d_G = (u, v)}$ نشان داده می شود. پایای وینرگراف G

$$\mathcal{W}(G) = \sum_{\{u,v\}\subseteq V(G)} \mathrm{d_G(u, v)} \qquad (۱)$$

پایای وینر معرفی شده بانمادها و نام های متفاوت در علومی مانند علوم کامپیوتر، مکانیک، مواد، شیمی داروسازی و ریاضی مورد استفاده قرارگرفته است.
آنچه مسلم است هارولد وینر اولین شیمی دانی است که مجموع فاصله های هر دو زوج رأس گراف را در درخت ها، برای تخمین نقطه ذوب آلکان ها درسال ۱۹۴۷، مورد توجه قرار داده است. وینر خودش از نام عدد مسیری برای این پایای گراف استفاده کرد و آن را با W نمایش داد. البته تعریف وینر اولین بار توسط شیمیدان ژاپنی به نام هارو هوسیا ارائه شد. به نظر می رسد در نوشته های ریاضی مقدار وینر اولین بار درسال ۱۹۷۶ مطالعه شده است. آن طورکه شواهد نشان می دهد ریاضی دانان برای یک مدت زمان طولانی کاری که از هارولد وینر در شیمی با استفاده از مجموع فواصل بین رئوس انجام داد، بی اطلاع بودند. [۱]

۰.۲ پایای وینر

در این بخش، به معرفی و بررسی پایای وینر می پردازیم، فرض کنید G یک گراف باشد. پایای گراف G به صورت زیر تعریف می شود

$$\mathcal{W}(G) = \frac{1}{2} \sum_{u \in V(G)} \sum_{v \in V(G)} \mathrm{d_G(u,v)} \qquad (۲)$$

که درآن $\mathrm{d_G(u,v)}$ فاصله بین رأس u و v است. اگر فاصله v از G به صورت

$$d(v,G) = \sum_{u \in V(G)} \mathrm{d(u,v)} \qquad (۳)$$

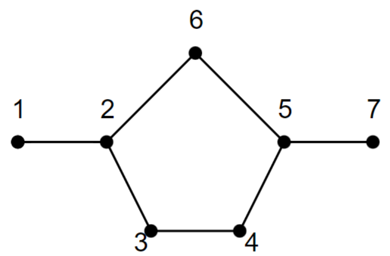
تعریف شود، آنگاه فرمول مربوط به پایای وینر را می توان بدین صورت بازنویسی کرد:

$$\mathcal{W}(G) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} \mathrm{d(v,G)} \qquad (۴)$$

۰.۳ پایای وینر برای گراف پلی تیوفن

فرض کنید $\mathrm{G = PT_n}$ که به جای n هر مقداری می تواند قرار گیرد که نشان دهنده تعداد پنج ضلعی های موجود در گراف پلی تیوفن می باشد.

مثال ۰.۱.۳ برای مثال $\mathrm{PT_1}$ برابر شکل زیر خواهد بود.



شکل ۰.۱ $\mathrm{PT_1}$

حال هدف ما این هست که عددپایای وینر را برای گراف بالا بدست بیاوریم. ابتدا ماتریسی مربعی که تعداد سطر و ستون آن برابر ۷ می باشد را ایجاد کرده و در هر درایه فاصله دو نقطه ،متناظر را نوشته حال نتیجه ماتریس به صورت زیر خواهد بود

$$\begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{array} \\
\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{array} &
\begin{bmatrix}
0 & 1 & 2 & 3 & 3 & 2 & 4 \\
1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 1 & 3 \\
2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 3 \\
3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\
3 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 \\
2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 0 & 2 \\
4 & 3 & 3 & 2 & 1 & 2 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}$$

فرض کنید درایه های ماتریس فوق را با a_{ij} نشان دهیم پایای وینر برای PT_1 برابر فرمول زیر خواهد شد.

$$\mathcal{W}(PT_1) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{j=7}\sum_{i=1}^{i=7} a_{ij} \tag{۵}$$

حال می خواهیم روشی مشترک برای بدست آوردن PT_2 و بزرگ تر از آن ارائه دهیم.

تعریف ۲.۳. ماتریس زیر را ماتریس مکمل می نامیم که در پنج سطر و ستون پایانی هر ماتریس نظیر جایگذاری می شود و درایه های آن ثابت است.

$$\begin{bmatrix} ۰ & ۱ & ۲ & ۲ & ۳ \\ ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ \\ ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۱ \\ ۲ & ۲ & ۱ & ۰ & ۲ \\ ۳ & ۲ & ۱ & ۲ & ۰ \end{bmatrix}$$

برای بدست آوردن ماتریس متناظر PT_2 کافی ست مراحل زیر را طی کنیم .

مرحله ۱: سطر و ستون ماتریس متناظر گراف PT_1 را به تعداد نقاط گراف PT_2 گسترش می دهیم.

تعداد نقاط از طریق فرمول بدست می آید.

$$PT_n \times 5 + 2 \tag{۶}$$

مرحله۲: به درایه های ستون آخر ماتریس PT_1 به ترتیب مقادیر یک، دو، دو، یک و سه را اضافه کرده و در ستون های باقی مانده جایگذاری می کنیم.

مرحله۳: به درایه های سطر آخر ماتریس PT_1 به ترتیب مقادیر یک، دو، دو، یک و سه را اضافه کرده و در سطرهای باقی مانده جایگذاری می کنیم.

مرحله۴: حال ماتریس تشکیل شده شامل ۱۲ سطر و ستون است که سطر و ستون های ۸ تا ۱۲ آن خالی هستند، برای اینکه ماتریس مورد نظر ما کامل شود نیاز است که ماتریس مکمل را جایگذاری کنیم، با جایگذاری ماتریس مکمل ماتریس زیر به وجود می‌آید.

$$PT_2 = \begin{bmatrix} ۰ & ۱ & ۲ & ۳ & ۳ & ۲ & ۴ & ۵ & ۶ & ۶ & ۵ & ۷ \\ ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ & ۱ & ۳ & ۴ & ۵ & ۵ & ۴ & ۶ \\ ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ & ۳ & ۴ & ۵ & ۵ & ۴ & ۶ \\ ۳ & ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ & ۳ & ۴ & ۴ & ۳ & ۵ \\ ۳ & ۲ & ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۱ & ۲ & ۳ & ۳ & ۲ & ۴ \\ ۲ & ۱ & ۲ & ۲ & ۱ & ۰ & ۲ & ۳ & ۴ & ۴ & ۳ & ۵ \\ ۴ & ۳ & ۳ & ۲ & ۱ & ۲ & ۰ & ۱ & ۱ & ۲ & ۱ & ۳ \\ ۵ & ۴ & ۴ & ۳ & ۲ & ۳ & ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ & ۳ \\ ۶ & ۵ & ۵ & ۴ & ۳ & ۴ & ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۲ & ۲ \\ ۶ & ۵ & ۵ & ۴ & ۳ & ۴ & ۲ & ۲ & ۱ & ۰ & ۱ & ۱ \\ ۵ & ۴ & ۴ & ۳ & ۲ & ۳ & ۱ & ۲ & ۲ & ۱ & ۰ & ۲ \\ ۷ & ۶ & ۶ & ۵ & ۴ & ۵ & ۳ & ۳ & ۲ & ۱ & ۲ & ۰ \end{bmatrix}$$

برای بدست آوردن ماتریس نظیر PT_n ما نیاز به ماتریس‌های نظیر PT_{n-1}،PT_{n-2}...PT_2 خواهیم داشت، که می‌توان با تکرار مراحل بالا به تعداد n-1 بار به ماتریس نظیر PT_n رسید. همچنین می‌توان از این برنامه برای محاسبه ماتریس نظیر و پایای وینر استفاده کرد.

۴. نتیجه‌گیری

برای دست‌یابی به عدد پایای وینر گراف پلی تیوفن با $\mathrm{PT_n}$های مختلف که تعداد پنج ضلعی‌های موجود در گراف را مشخص می‌کند می‌توان از مراحلی که در بخش ۳ بیان شد استفاده کرد و یا اینکه با جایگذاری درفرمول زیر به آن رسید.

$$\mathcal{W}(X) = ۱۲/۵X^{۳} + ۱۰X^{۲} + ۷/۵X + ۱ \tag{۷}$$

تشکر و قدردانی

مراتب سپاس‌گزاری خود را از کمیته علمی برگزار کننده کنفرانس و همچنین جناب دکتر فتح تبار را اعلام می‌دارم. روح پروفسور علی‌رضا اشرفی شاد و یادش گرامی باد.

مراجع

۱. غ. فتح تبار، ا. محفوظ، مجموع فاصله‌های بین رئوس یک گراف، نشریه علمی ترویجی محاسبات نرم ۵ (۱۳۹۵)، شماره دوم، ۳۳-۲۸