Wiener Polynomials for Multi-Rings Paraffin Structures

Ahmed M. Ali

ahmedgraph@uomosul.edu.iq

College of Computer Sciences and Mathematics

University of Mosul, Iraq

Received on: 03/09/2006

Accepted on: 24/12/2006

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.

Keywords: Wiener Polynomials, Paraffin Structures.

متعددة حدود وينر لمركب البارافين المتعدد-الحلقات

أحمد محمد علي

كلية علوم الحاسبات والرياضيات، جامعة الموصل

تاريخ قبول البحث: 2006/12/24

تاريخ استلام البحث: 2006/09/03

المخلص

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 التي هي على مسافة k من بعضيهما 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 البارافين المتعدد-الحلقات. (multi-circles of paraffin structural) وهذه الصيغة التي حصلنا عليها هي أفضل من الصيغة التي وجدت في [5]، وذلك للتمكن من إيجاد المعامل لأي قوى معينة لـ x دون الاعتماد على عدد الحلقات، كما أوجدنا دليل وينر ومعدل المسافة لهذا المركب. وأخيرا تم إنشاء برنامج بنظام MATLAB لاحتساب معاملات متعددة حدود وينر ودليل وينر ومعدل المسافة لهذا المركب.

الكلمات المفتاحية: متعددة حدود وينر ، مركب البارافين.

المقدمة:

في الكثير من التراكيب الكيميائية نلاحظ وجود بيانات من النظام السداسي (Hexagonal systems) الذي يتكون من حلقات سداسية متصلة مع بعضها البعض، وأن أية 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، فإن البيان الناتج يسمى البيان المميز (Characteristic graph) للنظام السداسي.

ويقال للنظام السداسي بـ (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 درج (2), [6].

تعريف:

يقال لنظام الحلقة السداسية (Catacondensed) غير المتفرع : بأنه مركب البارافين المتعدد-الحلقات (multi-circles of paraffin structural) ، والذي يسمى أحيانا بـ

(Hexagonal ring band graph) إذا كانت كل حافة مشتركة بين أية حلقتين تكون مناظرة لكل الحافات المشتركة بين أية حلقتين النظام نفسه، كما مبين في الشكل 1-.

$$X_{p+2}$$

الشكل -1-

مركب البارافين المتعدد-الحلقات

وسوف نرمز لهذا النوع من المركبات بـ H_{2p} ، حيث أن $2p$ تمثل عدد ذرات الكربون 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 على بعد k من بعضيهما بالرمز $d(G,k)$ ، حيث أن $k=0,1,2,\dots,\delta$.

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

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

ويعرف دليل وينر (Wiener Index) للبيان G : بأنه مجموع المسافات بين كل أزواج الرؤوس 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 مشتقة متعددة حدود وينر بالنسبة لـ x ، عندما $x=1$ ، أي أن

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

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

وإذا كان عدد الرؤوس في البيان المتصل G هو p ، فإن هنالك $\frac{1}{2}p(p-1)$ من الأزواج

غير المرتبة للرؤوس المختلفة في البيان G . يمكننا الآن أن نعرف معدل المسافة (average distance) [1] للبيان G على أنه ناتج قسمة دليل وينر للبيان G على $\frac{1}{2}p(p-1)$ ، وكما

يرمز لمعدل المسافة للبيان G بـ $\bar{D}(G)$ ، أي أن

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

ولا بد لنا أن نذكر أن العالم [3] H.Wiener كان أول من درس المسافة الكلية في البيانات التي لاحظها في تراكيب الجزئيات الكيميائية، إذ أن نتائجه ومساهماته كانت معروفة 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

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

حيث أن

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

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

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

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 بـ $d(H_{2p}, k)_{V_i}$ ، حيث

أن $i=1, 2$ ، ونرمز للمسافة بين رأس من V_1 مع رأس من V_2 على بعد k من بعضيهما بـ

$$d(H_{2p}, k)_{V_1 V_2}$$

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 درج 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

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

$$d(H_{2p}, 1)_{V_1 V_2} = \sum_{i=1}^{(p+1)/2} d(x_{2i-1}, H_{2p}, 1)_{V_2} = \sum_{i=1}^{(p+1)/2} 1 = \frac{1}{2}(p+1) \quad \text{حيث أن}$$

الآن نتبع طريقة الاستقراء الرياضي لإثبات العلاقة (1).

عندما $k=2$ ، فأن

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

حيث أن

$$\begin{aligned} d(H_{2p}, 2)_{V_1 V_2} &= \sum_{i=1}^p d(x_i, H_{2p}, 2)_{V_2} = 1 + \sum_{i=2}^{p-1} d(x_i, H_{2p}, 2)_{V_2} + 1 \\ &= 1 + \sum_{i=2}^{p-1} 2 + 1 = 2 + 2(p-2) \end{aligned}$$

عندما $k=3$ ، فأن

$$\begin{aligned} d(H_{2p}, 3) &= d(H_{2p}, 3)_{V_1} + d(H_{2p}, 3)_{V_2} + d(H_{2p}, 3)_{V_1 V_2} \\ &= (p-3) + (p-3) + 4 + 2\left(\frac{p-1}{2}\right) + 3\left(\frac{p-5}{2}\right) \\ &= 4(p-3) + 2 + (p-1)/2 \end{aligned}$$

حيث أن

$$\begin{aligned} d(H_{2p}, 3)_{V_1 V_2} &= \sum_{i=1}^p d(x_i, H_{2p}, 3)_{V_2} = 1 + 2 + \sum_{i=3}^{p-2} d(x_i, H_{2p}, 3)_{V_2} + 2 + 1 \\ &= 1 + 2 + \sum_{j=2}^{(p-1)/2} d(x_{2j-1}, H_{2p}, 3)_{V_2} + \sum_{j=2}^{(p-3)/2} d(x_{2j}, H_{2p}, 3)_{V_2} + 2 + 1 \\ &= 3 + \sum_{j=2}^{(p-1)/2} 2 + \sum_{j=2}^{(p-3)/2} 3 + 3 = 4 + 2\left(\frac{p-1}{2}\right) + 3\left(\frac{p-5}{2}\right) \end{aligned}$$

عندما $k=4$ ، فأن

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

حيث أن

$$\begin{aligned} d(H_{2p,4})_{V_1 V_2} &= \sum_{i=1}^3 d(x_i, H_{2p,4})_{V_2} + \sum_{i=4}^{p-3} d(x_i, H_{2p,3})_{V_2} + \sum_{i=p-2}^p d(x_i, H_{2p,3})_{V_2} \\ &= \sum_{i=1}^3 1 + \sum_{i=4}^{p-3} 2 + \sum_{i=p-2}^p 1 = 3 + 2(p-6) + 3 = 2 + 2(p-4) \end{aligned}$$

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

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

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

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

حيث أن

$$\begin{aligned} d(H_{2p,r+1})_{V_1 V_2} &= \sum_{i=1}^r d(x_i, H_{2p,r+1})_{V_2} + \sum_{i=r+1}^{p-r} d(x_i, H_{2p,r+1})_{V_2} \\ &\quad + \sum_{i=p-r+1}^p d(x_i, H_{2p,r+1})_{V_2} \\ &= \sum_{i=1}^r 1 + \sum_{i=r+1}^{p-r} 2 + \sum_{i=p-r+1}^p 1 = r + 2(p-2r) + r \\ &= 2(p-(r+1)) + 2 \end{aligned}$$

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:

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

ويمكن كتابة الصيغة أعلاه بالشكل الآتي

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

وأن معدل المسافة

$$\begin{aligned}
\bar{D}(H_{2p}) &= \frac{W(H_{2p})}{2p(2p-1)/2} \\
&= \frac{p(p+1)(2p+1) - 3}{3p(2p-1)}
\end{aligned}$$

وبعد تبسيط المقدار نحصل على

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

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

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

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

الحدي الأعلى.

فإذا أخذنا قيمة p مثلا هي 7 فإن

$$W(H_{14}; x) = 14 + 16x + 22x^2 + 21x^3 + 14x^4 + 10x^5 + 6x^6 + 2x^7$$

$$W(H_{14}) = 279$$

$$\bar{D}(H_{2p}) = 279/91 \cong 3.0659 < 3.3333$$

وأخيرا صممنا برنامج بلغة MATLAB لاحتساب المعاملات لمتعددة حدود وينر

كمتتالية من الأعداد مبتدأ بالمعامل لقوى صفر ومنتھية بالمعامل للقوى p ، وكذلك يعطي دليل 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 الكربون).
3. إنشاء مصفوفة التجاور A (عن طريق تجزئة المصفوفة A إلى أربع مصفوفات جزئية وتعريف هذه المصفوفات ثم إجراء بعض العمليات عليها)، ومن المعلوم أن المصفوفة 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. ضع $j=i+1$.
10. إذا كان $A(i, j) \neq 0$ و $B(i, j) = 0$ ، فأن

$$B(i, j) = k \quad s(k) = s(k) + 1$$
11. ضع $j=j+1$.
12. إذا كان $j \leq 2*p$ أذهب إلى الخطوة 10 وإلا اجعل $i=i+1$.
13. إذا كان $i \leq 2*p-1$ أذهب إلى الخطوة 9 وإلا اجعل $k=k+1$.
14. إذا كان $k \leq p$ أذهب إلى الخطوة 6.
15. نطبع معاملات متعددة حدود وينر $[s(1) s(2) s(3) \dots s(p)]$.
- (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
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.