



دانشکده علوم ریاضی
گروه ریاضی کاربردی

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته
ریاضی کاربردی، گرایش گراف و ترکیبیات

عنوان

گراف مولکولی فازی

استاد راهنما

دکتر صادق رحیمی شعرباف

استاد مشاور

دکتر حسین نیکوفرد

دانشجو

زهرا آشوری

بهمن ۹۲

به امید درک رازهای پنهانی قصیده‌ی آسمانی عشق
این پایان نامه را که ذره‌ای از تلاش آدمی
برای ورود به گوشه‌ای از منظومه‌ی پررنگ و راز، هستی است را
به پیشگاه پاک اسطوره‌های صبر و وفاداری
که در عرصه‌ی زندگی ناملایمات، تلخی‌ها و سختی‌ها را بارها و بارها،
برای پیشرفت‌های بیشتر این حقیر،
به جان خریدند،

پدر و مادر مهربانم

تقدیم می‌کنم.

سپاس مخصوص خداوندی است که بر من مقدر کرد آن چه را که شاید برای دیگری مقدر نکرده، مرا انتخاب کرد تا در این جایگاه، افتخار علم اندوزی داشته باشم که آن خود سعادت می‌خواهد. بارالها، خاشعانه بردگانه گریه کنش می‌کنم که بر من رقم زدی آن میزان توانایی را تا بتوانم دریای بیکران معرفت غور کنم. باشد که به تو نزدیک تر شوم. تکریم و تعزز فراوان محضر استاد برجندم جناب آقای دکتر صادق رحیمی شهرباف، سپاس اندیشه‌ی تابناکتان که مراسم کردید در شناخت آن چه خود از نشانه‌های الوهیت و عظمت خداوند مهربان درک کرده‌اید و این مباحثی است که نصیب هر کس نمی‌شود. پدران قدم برداشتن در دنیای ریاضیات را بر من آموختید. زبانم قاصر است و کلامم الکن تا پاسی در خور تقدیرتان دارم. خدارا برایتان آرزو دارم.

در پایان، بوسه می‌زنم بر دستان خداوندگاران مهربانی، پدر و مادر عزیزم و بعد از خدا، ستایش می‌کنم وجود مقدس شان را که مشوقم بودند از کودکی تا بیا بهم تقرب به خداوند را با علم آموزی. امیدوارم با تقریر این مکتوب موجبات خوشنودی شان را مهیا کرده باشم. خاک پای تمامی کسانی که در این موفقیت همراه و یاری گرم بوده اند را طوطیای چشمانم می‌کنم. باشد که موبهستان را بیچ‌گاه از یاد نبرم.

زهرآشوری
بهمن ۹۲

تعمدنامه

اینجانب زهرا آشوری دانشجوی کارشناسی ارشد رشته ریاضی کاربردی دانشکده علوم ریاضی دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان‌نامه با عنوان گراف مولکولی فازی، تحت راهنمایی دکتر صادق رحیمی شعرباف متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های دیگر پژوهش‌گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان‌نامه، تاکنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ‌جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه شاهرود متعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “ دانشگاه شاهرود “ یا “ Shahrood University “ به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به‌دست آوردن نتایج اصلی پایان‌نامه تاثیرگذار بوده‌اند، در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده) شده است، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

زهرا آشوری
بهمن ۹۲

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان‌نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

در این پایان‌نامه موضوع گراف مولکولی فازی مورد تحقیق قرار گرفته است. در فصل اول گراف مولکولی و برخی از تعاریف فازی آورده شده است. فصل دوم اختصاص به معرفی برخی از اندیس‌های توپولوژیکی مرتبط با گراف مولکولی یافته است. در فصل سوم گراف مولکولی فازی با استفاده از مفهوم اعداد فازی تعریف شده است. فصل چهارم مربوط به محاسبه برخی از اندیس‌های توپولوژیکی فازی مبتنی به گراف مولکولی فازی می‌باشد.

کلمات کلیدی: گراف مولکولی، اعداد فازی، اندیس‌های توپولوژیکی

فهرست مطالب

خ	لیست تصاویر
۲	۱ گراف مولکولی
۲	۱.۱ تاریخچه
۳	۲.۱ تعاریف اولیه
۶	۳.۱ گراف مولکولی
۹	۴.۱ ماتریس‌های گراف
۹	۱.۴.۱ ماتریس مجاورت
۱۰	۲.۴.۱ ماتریس فاصله
۱۱	۳.۴.۱ ماتریس معکوس
۱۱	۴.۴.۱ ماتریس لاپلاسیان
۱۲	۵.۴.۱ ماتریس انحراف
۱۲	۵.۱ مجموعه فازی
۱۵	۱.۵.۱ برخی عملگرها روی اعداد فازی
۱۶	۲.۵.۱ عملگرهای بازه‌ای
۱۷	۳.۵.۱ عملگر روی عدد فازی مثلی به وسیله α -برش
۱۹	۲ اندیس‌های توپولوژیکی
۱۹	۱.۲ اندیس‌های توپولوژیکی
۲۰	۱.۱.۲ اندیس‌های مبتنی بر روابط رئوس
۲۱	۲.۱.۲ اندیس‌های مبتنی بر فواصل توپولوژیک
۲۱	۲.۲ اندیس وینر
۲۵	۱.۲.۲ کاربردهایی از اندیس وینر
۲۶	۳.۲ اندیس PI
۲۷	۱.۳.۲ اندیس PI در درخت‌ها و گراف‌های بدون دور

۲۸	گراف زنجیری	۲.۳.۲
۲۸	زنجیر خطی بنزنی	۳.۳.۲
۲۹	اندیس گاتمن	۴.۲
۲۹	کران‌هایی برای اندیس گاتمن	۱.۴.۲
۳۱	اندیس Sz	۵.۲
۳۳	زنجیر خطی بنزنی	۱.۵.۲
۳۵	اندیس راندیک	۶.۲
۳۹		گراف مولکولی فازی	۳
۴۰	تعاریف و اصطلاحات شیمی	۱.۳
۴۰	الکترون‌گاتیوی	۱.۱.۳
۴۱	شعاع اتمی	۲.۱.۳
۴۲	طول پیوند	۳.۱.۳
۴۳	انرژی پیوند	۴.۱.۳
۴۴	گراف مولکولی فازی	۲.۳
۴۴	گراف مولکولی فازی بر حسب طول پیوند فازی	۱.۲.۳
۴۶	گراف مولکولی فازی بر حسب انرژی پیوند	۲.۲.۳
۴۷	گراف مولکولی فازی بر حسب متوسط طول پیوند	۳.۲.۳
۴۸	گراف مولکولی فازی بر حسب متوسط انرژی پیوند	۴.۲.۳
۴۹	گراف مولکولی فازی بر حسب الکترون‌گاتیوی	۵.۲.۳
۵۰	گراف مولکولی فازی بر حسب قطبیت پیوند	۶.۲.۳
۵۱		اندیس‌های توپولوژیکی فازی	۴
۵۱	اندیس وینر فازی	۱.۴
۵۹	اندیس وینر فازی با استفاده از اعداد مثلثی	۱.۱.۴
۶۴	اندیس گاتمن فازی	۲.۴
۶۵	اندیس Sz فازی	۳.۴
۶۶	نتیجه‌گیری و چشم‌انداز	۴.۴
۶۷		مراجع	
۷۰		واژه‌نامه فارسی به انگلیسی	
۷۳		واژه‌نامه انگلیسی به فارسی	

لیست تصاویر

۵	گراف ۲-منتظم	۱.۱
۸	گراف G_1 ، ساختار فرمولی تترامتیل هپتان	۲.۱
۸	گراف G_2 ، ساختار فرمولی بی فنیلین	۳.۱
۱۰	ساختار گراف تخلیه هیدروژن از متیل-سیکلوپروپان	۴.۱
۱۱	گراف تخلیه هیدروژن از سیکلوپروپیل پروپان	۵.۱
۲۴	گراف دوری با طول زوج	۱.۲
۲۸	نمایش یک گراف زنجیری	۲.۲
۲۸	نمایش زنجیر مولکول بنزن خطی	۳.۲
۴۵	گراف مولکولی ترکیب $COCl_2$	۱.۳
۴۶	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب طول پیوند	۲.۳
۴۷	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب انرژی پیوند	۳.۳
۴۸	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب متوسط طول پیوند	۴.۳
۴۸	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب متوسط انرژی پیوند	۵.۳
۴۹	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب الکترونگاتیوی	۶.۳
۵۰	گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب قطبیت پیوند	۷.۳
۵۳	گراف مولکولی ترکیب CO_2	۱.۴
۵۳	گراف مولکولی فازی CO_2	۲.۴
۵۴	گراف مولکولی فازی CO_2	۳.۴
۵۴	گراف مولکولی فازی CO_2	۴.۴
۵۵	گراف مولکولی فازی CO_2	۵.۴
۵۵	گراف مولکولی فازی CO_2	۶.۴
۵۶	گراف مولکولی C_2H_4	۷.۴
۵۶	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۸.۴

۵۷	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۹.۴
۵۸	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۱۰.۴
۵۸	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۱۱.۴
۵۹	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۱۲.۴
۶۲	گراف مولکولی فازی ترکیب $CHCl_3$	۱۳.۴
۶۲	گراف مولکولی فازی ترکیب H_2O_2	۱۴.۴
۶۳	گراف مولکولی فازی ترکیب NH_3	۱۵.۴
۶۴	گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4	۱۶.۴
۶۵	گراف مولکولی فازی ترکیب H_2O_2	۱۷.۴

فصل ۱

گراف مولکولی

۱.۱ تاریخچه

آرتور کیلی^۱ یک ریاضیدان انگلیسی (۱۸۲۱-۱۸۹۵) بود که علاقمند به شمارش ساختارهای شیمیایی، از جمله آلکان‌ها بود. او اولین کسی بود که نتایجی را در بررسی گراف مولکولی در سال ۱۸۷۴ منتشر کرد، تا جایی که این نتایج قبل از معرفی علم گراف بود. او برای شمارش ایزومرها، نموداری از نقطه‌های برجسب‌گذاری شده به نمایندگی از اتم‌ها و رابطه بین آن‌ها (پیوند) در یک مجموعه ترسیم کرد. سپس پلرگرام^۲ و کنوگرام^۳ را که گراف مولکولی و گراف مولکولی هیدروژن تهی شده می‌باشد، معرفی کرد [۱۱].

کوپ^۴ ویژگی‌های افزایشی مولکول‌ها را مطالعه کرد و برون^۵ یک شکل هندسی برای ترسیم ترکیبات شیمیایی به وجود آورد. هم‌چنین ادعا کرد بین ساختمان شیمیایی اتم و فعالیت‌های فیزیولوژیکی آن، وابستگی وجود دارد. فلاویتزکی^۶ به شمارش تعداد ایزومرها در ساختارهای الکلی پرداخت. در سال ۱۸۷۸، سیلوستر^۷ یک مقایسه بین تابع ثابت، کواریانس جبری و توپولوژی مولکولی انجام داد. نتایج کار او بسیار مهم بود، زیرا نتیجه تحقیقات وی، وجود پایه مشترک بین متغیرهای ریاضی و نظریه‌های شیمیایی را اثبات کرد. این مقایسه منشا پیشرفت‌های بسیاری در زمینه ریاضی و شیمی شد [۲۸].

سپس دانیل بونچر^۸ در تئوری گراف شیمی، منشا انرژی شیمیایی را با روابط هندسی بررسی کرد.

^۱ Arthur Cayley

^۲ plerogram

^۳ kenogram

^۴ Koop

^۵ Crum Brown

^۶ Flavitzky

^۷ Sylvester

^۸ Danil Boncher

میشرا^۹ و همکارانش، از پارامترهای تئوری گراف برای ارتباط ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی آلکان‌ها، اترها و برخی حلال‌های دیگر استفاده کردند و نیز غلظت ترکیبات یونی و برخی فعالیت‌های آمینواسیدها را محاسبه کردند [۲۳].

امروزه تئوری گراف، روشی استاندارد برای نظریه‌ها و الگوریتم‌های شیمی می‌باشد و مراجع بسیاری در مورد کاربردهای آن در دسترس است. دیولرس^{۱۰}، هال^{۱۱}، کینگ^{۱۲}، روواری^{۱۳}، دیودا^{۱۴}، ایوان‌کیوک^{۱۵} مقالاتی را در این زمینه منتشر کردند [۱۵].

از دیگر پیشگامان این علم می‌توان هارولد وینر^{۱۶}، الکساندر بالابان^{۱۷}، هاروو هوسویا^{۱۸} و میلان راندیک^{۱۹} نام برد. در سال ۱۹۴۷ برای اولین بار وینر، اندیس توپولوژیکی را تعریف کرد. او اندیس توپولوژیکی خود را که با نام وینر شناخته شد برای مطالعه‌ی رابطه بین ساختار مولکولی و ویژگی‌های فیزیکی شیمیایی از برخی هیدروکربن‌های مشخص استفاده کرد. پس از وینر اندیس‌های توپولوژیکی بسیاری تعریف شد که از آن‌ها برای پیش‌بینی ویژگی‌های ترکیبات شیمیایی استفاده می‌شود [۱۰]. استرادا^{۲۰} و همکارانش در زمینه استفاده از اندیس‌های توپولوژیکی در طراحی و کشف داروها تحقیق کردند [۲۳].

از سرشناس‌ترین دانشمندانی که امروزه در این زمینه تحقیق می‌کنند، می‌توان به ایوان گاتمن^{۲۱} اشاره کرد. وی برای محاسبه انرژی گراف روش مقادیر ویژه را به جای روش انتگرال کواسون پیشنهاد کرد. هم‌چنین چند اندیس توپولوژیکی جدید تعریف کرد که کاربرد بسیاری در مطالعات QSAR^{۲۲} دارد [۱۳].

۲.۱ تعاریف اولیه

می‌توان تمام مسائل جهان حقیقی را به صورت ریاضی تعریف کرد. برای این کار ابتدا باید مسأله را به صورت یک مدل ریاضی بیان نمود. گراف‌ها، ابزار مفیدی برای مدلسازی ریاضی می‌باشند. شاخه‌ای از ریاضیات که گراف‌ها را معرفی می‌کند، تئوری گراف نامیده می‌شود [۲۳].

^۹Mishra

^{۱۰}Devillers

^{۱۱}Hall

^{۱۲}King

^{۱۳}Rouvary

^{۱۴}Diudea

^{۱۵}Ivanciuc

^{۱۶}Harold Wiener

^{۱۷}Alexandru Balaban

^{۱۸}Haruo Hosoya

^{۱۹}Milan Randic

^{۲۰}Estrada

^{۲۱}Ivan Gutman

^{۲۲}quantitative structure-activity relationships

تعاریف زیر از مرجع [۹] استخراج شد.

تعریف ۱.۲.۱. یک گراف^{۲۳} سه‌تایی مرتب (V_G, E_G, ψ_G) است که در آن V_G مجموعه‌ای ناتهی از عناصر به نام رئوس و E_G مجموعه‌ای از یال‌ها و ψ_G تابع وقوع است که به هر یال G یک جفت نامرتب و نه لزوماً متمایز از V_G را متناظر می‌کند. از این پس گراف را به صورت $G = (V, E)$ نشان می‌دهیم. هرگاه گراف G دارای n رأس و m یال باشد، آن را (n, m) -گراف می‌نامیم و آن را به صورت $G = (n, m)$ نشان می‌دهیم. تعداد رئوس گراف G را مرتبه گراف می‌نامند و آن را با $|V|$ یا n نشان می‌دهند.

تعریف ۲.۲.۱. هر یال دو رأس را به هم وصل می‌کند که این دو رأس، مجاور^{۲۴} نامیده می‌شوند.

تعریف ۳.۲.۱. راسی از G که رأس انتهایی از هیچ یالی نباشد، رأس^{۲۵} تنها می‌نامند.

تعریف ۴.۲.۱. درجه^{۲۶} یک رأس از گراف، تعداد یال‌هایی است که با آن رأس برخورد می‌کنند. هر طوقه دوبار حساب می‌شود. درجه رأس v با $deg(v)$ نشان داده می‌شود.

ماکزیم درجه از گراف G ، با $\Delta(G)$ و مینیمم درجه آن با $\delta(G)$ ، نشان داده می‌شود. مجموع درجات گراف از رابطه $\sum_{v \in V} deg(v) = 2 |m|$ بدست می‌آید.

تعریف ۵.۲.۱. گراف G و گراف H **یکریخت**^{۲۷} است اگر نگاشت‌های دوسویی $\theta : V(G) \rightarrow V(H)$ و $\phi : E(G) \rightarrow E(H)$ وجود داشته باشند به طوری که داشته باشیم: $\psi_G(e) = uv$ اگر و تنها اگر $\psi_H(\phi(e)) = \theta(u)\theta(v)$.

تعریف ۶.۲.۱. مجموعه رئوس مجاور از یک رأس ثابت v از یک گراف، مجموعه همسایگی^{۲۸} رأس v نامیده می‌شود و با $N(v)$ نشان داده می‌شود.

$$N(v) = \{u \in G \mid uv \in E(G)\}$$

به عبارت دیگر:

اگر G دارای رئوس v_1, v_2, \dots, v_n باشد، دنباله آن یک دنباله درجه از G است. یک دنباله (d_1, d_2, \dots, d_n) ، از اعداد صحیح نامنفی یک دنباله از گراف است اگر و تنها اگر، $\sum_{i=1}^n d_i$ زوج باشد [۸].

در هر گراف G ، تعداد رئوس از درجه فرد، زوج است. دنباله درجه یا یک گراف ثابت است و یا گراف‌های یکریخت دارای دنباله درجه یکسان هستند. در هر حال دنباله درجه یک گراف، به خودی خود یکتا نیست [۸].

^{۲۳}graph

^{۲۴}incident edge

^{۲۵}isolated vertex

^{۲۶}vertex degree

^{۲۷}isomorphic graph

^{۲۸}neighbour

تعریف ۷.۲.۱. گرافی که فاقد طوقه و یال‌های موازی باشد، گراف ساده نامیده می‌شود.

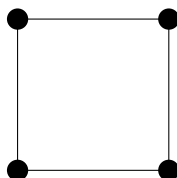
تعریف ۸.۲.۱. یک گراف ساده که هر جفت رئوس متمایز از آن توسط یک یال با یکدیگر متصل هستند، گراف کامل نامیده می‌شود.

اگر گراف کامل شامل رئوس v_1, \dots, v_n باشد، آن‌گاه مجموعه یال‌ها به صورت:

$$E = \{(v_i, v_j) : v_i \neq v_j; i, j = 1, \dots, n.\}$$

می‌باشد. در نتیجه تعداد یال‌های گراف کامل $\frac{1}{2}n(n-1)$ می‌باشد.

تعریف ۹.۲.۱. گراف G را k -منتظم^{۲۹} گوئیم، هرگاه برای عدد صحیح مثبت k ، درجه هر رأس k باشد.



شکل ۱.۱: گراف ۲-منتظم

گراف کامل K_n ، $(n-1)$ -منتظم می‌باشد.

تعریف ۱۰.۲.۱. در گراف G ، یک دنباله متناهی

$$W = v_0 e_1 v_1 e_2 v_2 \dots v_{k-1} e_k v_k$$

که دنباله‌ای از رئوس و یال‌ها به صورت متناوب می‌باشد به طوری که، به ازای $1 \leq i \leq k$ ، یال e_i دارای رئوس انتهایی v_{i-1} و v_i می‌باشد، را گشت^{۳۰} گوئیم.

به رئوس v_1, \dots, v_{k-1} در گشت بالا، رئوس داخلی و به تعداد یال‌های موجود در گشت، طول گشت گوئیم.

تعریف ۱۱.۲.۱. گشتی که شامل رئوس متمایز باشد را مسیر^{۳۱} گوئیم.

تعریف ۱۲.۲.۱. طول کوتاهترین مسیر که رئوس x و y را به هم وصل می‌کند، فاصله رئوس^{۳۲} نامیده می‌شود و با $d(x, y)$ نشان داده می‌شود.

^{۲۹}regular graph

^{۳۰}walk

^{۳۱}path

^{۳۲}distance vertices

در G ، فاصله یک متریک است [۱۰].
زیرا روابط زیر برقرار هستند:

$$d(x, y) = 0 \iff x = y$$

$$d(x, y) = d(y, x)$$

$$d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$$

تعریف ۱۳.۲.۱. اگر هر دو رأس از یک گراف، به یکدیگر متصل باشند، آنگاه گراف را ^{۳۳} همبند گوئیم. گرافی را که همبند نباشد، ناهمبند گوئیم.

تعریف ۱۴.۲.۱. حاصل ضرب دکارتی گراف‌های $G_1 \times G_2$ گرافی با مجموعه رئوس $V(G_1) \times V(G_2)$ است و دو رأس (u_1, u_2) و (v_1, v_2) مجاورند، هرگاه:
 $u_1 v_1 \in E_1, u_2 = v_2$ یا $u_1 = v_1, u_2 v_2 \in E_2$.

تعریف ۱۵.۲.۱. گراف n رأسی که فقط یک رأس از درجه $n - 1$ داشته و بقیه رأس‌های آن از درجه یک باشد را گراف ستاره ^{۳۴} از مرتبه n گویند و با S_n نشان می‌دهند.

تعریف ۱۶.۲.۱. k -مکعب‌ها گراف‌هایی هستند که رأس‌هایشان k تایی مرتبی از صفر و یک هاست و دو رأس مجاورند اگر فقط در یک مولفه متفاوت باشند.

تعریف ۱۷.۲.۱. گراف خطی ^{۳۵} $L(G)$ از گراف G یک گراف است بطوریکه، رئوس $L(G)$ یال‌هایی از G هستند و دو رأس از $L(G)$ مجاورند اگر و تنها اگر یال‌های متناظر آن در G با یک رأس مشترک باشند [۲۵].

۳.۱ گراف مولکولی

امروزه تئوری گراف دارای کاربردهای بسیاری در علوم مختلف مانند برق، انسان‌شناسی، جغرافیا، فیزیک هسته‌ای، علوم کامپیوتر، جامعه‌شناسی، مهندسی صنایع، زبان‌شناسی، زیست‌شناسی، ترابری و به ویژه در شیمی است. از تئوری گراف برای مدلسازی ریاضی مولکول‌ها استفاده می‌شود و در واقع به ویژگی‌های فیزیکی این ترکیبات شیمیایی می‌پردازد.

نظریه گراف شیمی ^{۳۶} با دیگر شاخه‌های شیمی معادل نیست ولی این علم برای فهم بهتر طبیعت ساختارهای شیمی لازم است.

^{۳۳}connected graph

^{۳۴}star graph

^{۳۵}line graph

^{۳۶}chemical graph

تعریف ۱.۳.۱. تئوری گراف شیمی یک شاخه از ریاضیات است که علم گراف و شیمی را باهم ترکیب می‌کند [۱۰].

تعریف ۲.۳.۱. در تئوری گراف شیمی، یک گراف مولکولی^{۳۷} نمایش فرمول ساختاری یک ترکیب شیمیایی به صورت گراف است. گراف مولکولی یک گراف برچسب گذاری شده است که در آن، رئوس نماینده اتم‌های یک ترکیب و یال‌ها نماینده پیوند شیمیایی است [۸]. بنابراین گراف مولکولی به صورت $G = (V, E)$ قابل نمایش است که در آن مجموعه V نشان‌دهنده مجموعه اتم‌ها و مجموعه E نشان‌دهنده پیوند بین اتم‌هاست.

تعریف ۳.۳.۱. نمایش گراف مولکولی به صورت دوبعدی، گراف ساختاری^{۳۸} نامیده می‌شود [۲۳].

تعریف ۴.۳.۱. گراف مولکولی هیدروژن-تهی، یک گراف مولکولی است که رئوس نماینده اتم‌های هیدروژن در آن حذف شده‌اند.

رابطه بین اصطلاحات نظریه گراف و اصطلاحات شیمی در جدول ۱ ارائه شده است [۲۳].

جدول ۱-۱: رابطه بین اصطلاحات گراف و اصطلاحات شیمی

در گراف	در شیمی
گراف شیمی	ساختار فرمولی
رأس	اتم
یال	پیوند شیمیایی
درجه رأس	ظرفیت شیمیایی اتم
درخت گراف	ساختار مارپیچی
زنجیر	آلکان خطی
دور	سیکلوئید
گراف دوبخشی	ساختار شیمی متناوب
گراف ۱-منتظم	ساختار منتظم
مقدار ویژه A	مقدار ویژه ماتریس هاکل
تابع مشخصه A	اوربیتال مولکولی هاکل
مقدار ویژه مثبت	مرتبه انرژی پیوندی
مقدار ویژه صفر	مرتبه انرژی غیرپیوندی
مقدار ویژه منفی	مرتبه انرژی ضدپیوندی
ماتریس مجاورت	ماتریس مکان‌یابی

شبهت بسیاری بین ساختار فرمولی و گراف وجود دارد. در شکل (۲.۱) و (۳.۱) فرمول ساختاری از ۲/۲/۴/۶-تترامتیل‌هپتان^{۳۹} و بی‌فنیلین^{۴۰} نمایش داده شده است. این فرمول‌ها با گراف‌های G_1 و

^{۳۷}molecular graph

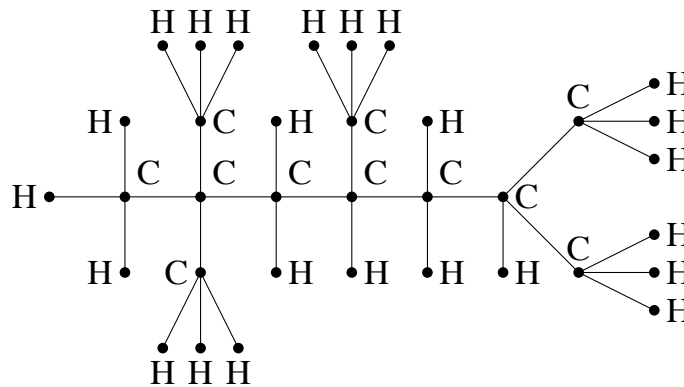
^{۳۸}structural graph

^{۳۹}2,2,4,6-tetramethylheptane

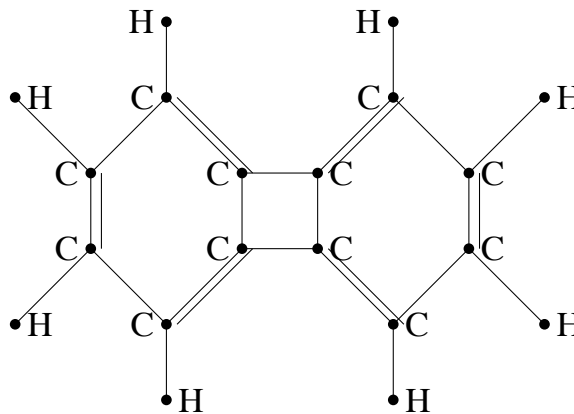
^{۴۰}biphenylene

G_2 مقایسه می‌شوند.

بدیهی است که گراف‌های G_1 و G_2 می‌توانند به نمایندگی از ساختمان اتم کربن، به ترتیب از ۲/۲/۴/۶-تترامتیل‌هپتان و بی‌فنیلین ساخته شوند. در این رابطه می‌گوییم که G_1 ، گراف مولکولی ۲/۲/۴/۶-تترامتیل‌هپتان و G_2 ، گراف مولکولی بی‌فنیلین است (اتم‌های هیدروژن و پیوندهای دوگانه در G_1 و G_2 نادیده گرفته می‌شوند) [۱۰].



شکل ۲.۱: گراف G_1 ، ساختار فرمولی تترامتیل‌هپتان



شکل ۳.۱: گراف G_2 ، ساختار فرمولی بی‌فنیلین

توجه به نکات زیر ضروری است:

(۱) گراف مولکولی یک گراف همبند است [۲۳].

(۲) گراف‌های مولکولی شامل اطلاعات درباره آرایش سه بعدی پیوندها نمی‌باشد. بنابراین نمی‌تواند

بین ترکیبات ایزومری^{۴۱} تفاوت قائل شود [۱۰].

^{۴۱} Isomer

- (۳) گراف‌هایی وجود دارند که گراف مولکولی نیستند [۲۳].
 (۴) درجه تمام رئوس در گراف مولکولی کمتر از ۴ است.

۴.۱ ماتریس‌های گراف

روش کدگذاری ساختارهای شیمیایی از گراف مولکولی، به سه شکل بزرگ طبقه بندی می‌شوند که شامل شکل ماتریس، اندیس توپولوژیکی و خواص اتمی از ساختار هندسی مولکول است [۱۵]. اولین نمایش گراف مولکولی، از ماتریس‌ها استفاده می‌کند. این نمایش با توجه به قضیه هاکل^{۴۲} است و از بیان مشتق ریاضی در ساختمان مولکولی استفاده می‌کند [۲۳].

بر مبنای شکل ماتریس از گراف مولکولی، می‌توان چندجمله‌ای ماتریس، دترمینان، مسیر، گشت و مسافت محاسبه کرد. لذا ماتریس، مبنای محاسبه پارامترهای دیگر است. پس از به دست آوردن ماتریس گراف مولکولی، می‌توان به تعیین ویژگی‌ها و طیف، که کاربرد زیادی در تئوری اوربیتال مولکولی دارد و نیز منبع مهمی از توصیف‌گرهای مولکولی است، پرداخت [۱۰]. برخی از ماتریس‌ها تنها برای بیان گراف مولکولی استفاده می‌شود. حال بعضی از ماتریس‌ها که به صورت وسیع مورد استفاده قرار می‌گیرد، معرفی و مورد بحث قرار می‌دهیم.

۱.۴.۱ ماتریس مجاورت

تعریف ۱.۴.۱. ماتریس مجاورت^{۴۳} رئوس $A(G)$ از یک گراف همبند و برچسب‌گذاری شده G با n رأس، یک ماتریس مربعی متقارن است که شامل اطلاعات درباره اتصال رئوس در G است که به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۳]:

$$(A)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{اگر } v_i \text{ و } v_j \text{ مجاور باشند} \\ 0, & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

بدیهی است که اگر گراف، ساده باشد آن‌گاه

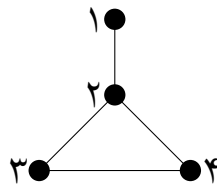
$$(A)_{ii} = 0$$

مثال ۲.۴.۱. ماتریس مجاورت رئوس G از گراف شکل (۴.۱) به صورت زیر است:

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

^{۴۲}Huckel matrix

^{۴۳}adjacency matrix



شکل ۴.۱: ساختار گراف تخلیه هیدروژن از متیل-سیکلوپروپان

ماتریس مجاورت نسبت به قطر اصلی متقارن است. بنابراین ترانهاده ماتریس مجاورت A ، با خود ماتریس برابر است. به عبارت دیگر:

$$A^t(G) = A(G).$$

ماتریس مجاورت یالی^{۴۴} $(E_{A(G)})$ از گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۳]:

$$(E_A)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{اگر یال } e_i \text{ و } e_j \text{ مجاور باشند} \\ 0, & \text{در غیر این صورت:} \end{cases}$$

$$(E_A)_{ii} = 0$$

مثال ۳.۴.۱. برای گراف G در مثال قبل، ماتریس مجاورت یالی به صورت زیر است:

$$E_{A(G)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

تعریف ۴.۴.۱. گرافی که هر یال آن دارای یک جهت است، گراف جهت‌دار^{۴۵} نامیده می‌شود.

ماتریس مجاورت از یک گراف جهت‌دار $A_D(G)$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$A_D(G) = \begin{cases} \text{تعداد کمان‌ها از } v_i \text{ به } v_j, & \text{اگر } v_i \neq v_j \\ \text{تعداد حلقه‌ها در } v_i, & \text{اگر } v_i = v_j \end{cases}$$

۲.۴.۱ ماتریس فاصله

تعریف ۵.۴.۱. ماتریس فاصله^{۴۶} D از گراف همبند و برچسب‌گذاری شده G ، یک ماتریس $n \times n$

حقیقی و متقارن است که اعضای d_{ij} به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$d_{ij} = \begin{cases} l_{ij}, & \text{اگر } i \neq j \\ 0, & \text{اگر } i = j \end{cases}$$

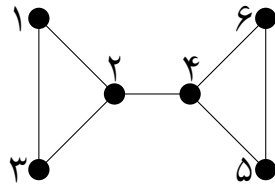
^{۴۴}edge-adjacency matrix

^{۴۵}digraph

^{۴۶}distance matrix

به طوری که l_{ij} طول کوتاهترین مسیر بین رأس i و j است یا به عبارت دیگر مینیمم تعداد یال بین رأس i و j است [۲۳].

مثال ۶.۴.۱. ماتریس فاصله $D(G)$ از گراف شکل (۵.۱) به صورت زیر است:



شکل ۵.۱: گراف تخلیه هیدروژن از سیکلوپروپیل پروپان

$$D(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 3 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 3 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 3 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

۳.۴.۱ ماتریس معکوس

تعریف ۷.۴.۱. درایه‌های یک ماتریس معکوس^{۴۷} از رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$(RD)_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{d_{ij}}, & \text{اگر } i \neq j \\ 0, & \text{اگر } i = j \end{cases}$$

اعضای RD ، معکوس اعضای ماتریس D هستند [۱۵].

۴.۴.۱ ماتریس لاپلاسیان

تعریف ۸.۴.۱. اگر G یک گراف ساده باشد، ماتریس لاپلاسیان^{۴۸} آن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L_{ij} = \begin{cases} deg(v_i), & \text{اگر } i = j \\ -1, & \text{اگر } e_{ij} \in E(G) \\ 0, & \text{اگر } e_{ij} \notin E(G) \end{cases}$$

که در آن $deg(v_i)$ درجه i امین رأس گراف می‌باشد [۱۵].

^{۴۷}reciprocal matrix

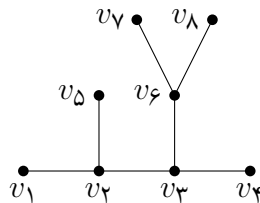
^{۴۸}Laplacian matrix

تعریف بالا معادل عبارت زیر است:

$$L(G) = D(G) - A(G)$$

که در آن $D(G)$ ماتریس قطری از درجه رئوس است و $A(G)$ ماتریس مجاورت گراف است [۲۷].

مثال ۹.۴.۱. ماتریس لاپلاس گراف زیر به صورت زیر است:



$$L(T) = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 3 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

۵.۴.۱ ماتریس انحراف

تعریف ۱۰.۴.۱. ماتریس انحراف^{۴۹} از گراف G ماتریس متقارن است که درایه‌های آن از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$[\Delta]_{ij} = \begin{cases} \max(L(p_{ij})) & \text{اگر } i \neq j \\ 0 & \text{اگر } i = j \end{cases}$$

به طوری که $\max(L(p_{ij}))$ طولانی‌ترین مسیر بین اتم i و j است [۱۵].

۵.۱ مجموعه فازی

نظریه مجموعه‌های فازی در سال ۱۹۶۵ توسط پروفیسور لطفی عسگرزاده دانشمند ایرانی تبار و استاد دانشگاه برکلی آمریکا، عرضه شد. نظریه مجموعه‌های فازی یک قالب جدید ریاضی برای صورت‌بندی و تجزیه و تحلیل مفاهیم و ویژگی‌هاست. این نظریه، یک تعمیم و گسترش طبیعی نظریه مجموعه‌های معمولی است، که موافق با زبان و فهم طبیعی انسان‌ها می‌باشد [۲۲].

^{۴۹}Detour matrix

مطالب این بخش از مرجع [۱۹] در نظر گرفته شده است.

تعریف ۱.۵.۱. مجموعه فازی^{۵۰} به مجموعه‌ای گفته می‌شود که به هر عضو آن مجموعه، درجه عضویت نسبت داده شود. به عبارت دیگر برای مجموعه فازی A ، تابع μ_A نگاشت عناصر از مجموعه مرجع X به مجموعه $[0, 1]$ است.

$$\mu_A : X \rightarrow [0, 1].$$

به‌طور متداول مجموعه فازی A را با \tilde{A} نمایش می‌دهند.

تعریف ۲.۵.۱. فرض کنید A و B دو مجموعه باشند. رابطه‌ی فازی^{۵۱} R ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu_R : A \times B \rightarrow [0, 1],$$

$$R = \{((x, y), \mu_R(x, y)) \mid \mu_R(x, y) \geq 0, x \in A, y \in B\}.$$

که در آن $\mu_R(x, y)$ شدت رابطه بین x و y را نمایش می‌دهد. هرگاه $\mu_R(x, y) \geq \mu_R(x', y')$ باشد، گوییم (x, y) رابطه‌ی قوی‌تری نسبت به (x', y') دارد.

تعریف ۳.۵.۱. گراف فازی^{۵۲} با مجموعه رئوس V یک جفت (σ, μ) می‌باشد که

$$\sigma : V \rightarrow [0, 1]$$

$$\mu : V \times V \rightarrow [0, 1]$$

σ یک زیرمجموعه فازی و μ یک رابطه فازی روی زیرمجموعه σ می‌باشد به‌طوری‌که:

$$\forall x, y \in V, \mu(x, y) \leq \sigma(x) \wedge \sigma(y)$$

عملگر \wedge نشان‌دهنده مینیمم مقدار بین زیرمجموعه $\sigma(x)$ و $\sigma(y)$ است.

تعریف ۴.۵.۱. فرض کنید (σ, μ) یک گراف فازی باشد. درجه رأس u در G به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$d_G(u) = \sum_{u \neq v, v \in V} \mu(u, v).$$

تعریف ۵.۵.۱. مسیر P ، در یک گراف فازی $G = (\sigma, \mu)$ یک دنباله از رئوس مجزای v_0, v_1, \dots, v_n است به‌طوری‌که: $\mu(v_{i-1}, v_i) > 0$ ، $1 \leq i \leq n$.

طول مسیر P در گراف فازی \tilde{G} از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$L_{\tilde{G}}(P) = \sum_{v_i \in P} \mu(v_i).$$

^{۵۰} fuzzy set

^{۵۱} fuzzy relation

^{۵۲} fuzzy graph

تعریف ۶.۵.۱. یک مسیر P یک دور نامیده می‌شود، اگر $v_0 = v_n$ و $n \geq 3$.

تعریف ۷.۵.۱. همسایگی رأس x به صورت مجموعه $N(x) = \{y \in V | \mu(x, y) = \delta(x) \wedge \delta(y)\}$ تعریف می‌شود.

تعریف ۸.۵.۱. اگر u و v دو رأس در گراف باشند که به هم متصل‌اند، شدت مسیر^{۵۳} بین دو رأس به صورت $\bigwedge_{i=1}^n \mu(u_{i-1}, u_i)$ تعریف می‌شود. به عبارت دیگر شدت ضعیف‌ترین یال در مسیر برابر شدت آن مسیر در نظر گرفته می‌شود [۲۲].

تعریف ۹.۵.۱. α -برش^{۵۴} مجموعه فازی \tilde{A} از عضوهای ساخته شده است، که عضویت آن‌ها کمتر از α نباشد. به عبارت دیگر α -برش مجموعه فازی \tilde{A} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{A}_\alpha = \{x \in X : \mu_{\tilde{A}}(x) \geq \alpha\}.$$

توجه کنید که α عددی دلخواه در بازه $(0, 1)$ است و این مجموعه، مجموعه‌ای قطعی^{۵۵} است و در حالتی که $\alpha = 1$ باشد، α -برش از \tilde{A} را هسته^{۵۶} می‌نامند.

تعریف ۱۰.۵.۱. فرض کنید X مجموعه مرجع در \mathbb{R}^n و A یک مجموعه فازی باشد. هرگاه همه‌ی α -برش‌ها محدب باشند، مجموعه فازی را محدب^{۵۷}، در غیر این صورت آن را نامحدب^{۵۸} گویند. به عبارت دیگر داریم:

$$\mu_A(t) \geq \text{Min}[\mu_A(r), \mu_A(s)],$$

$$t = (\lambda)r + (1 - \lambda)s, \quad r, s \in \mathbb{R}^n, \lambda \in [0, 1].$$

تعریف ۱۱.۵.۱. هرگاه مجموعه فازی محدب، نرمال شده (یعنی حداقل در یک نقطه مقدار تابع عضویت برابر ۱ شود)، تابع عضویت روی \mathbb{R} تعریف شده و به‌طور قطعه‌ای پیوسته باشد آن را عدد فازی^{۵۹} می‌نامند.

عدد فازی u در حالت پارامتری به صورت دوتایی $(\underline{u}(r), \bar{u}(r))$ از توابع $\underline{u}(r)$ و $\bar{u}(r)$ تعریف می‌شود که $0 \leq r \leq 1$ است و در رابطه‌های زیر صدق می‌کند:

• $\underline{u}(r)$ تابعی کران‌دار نائزولی و از چپ پیوسته در $[0, 1)$ و در 0 از راست پیوسته است.

• $\bar{u}(r)$ تابعی کران‌دار ناصعودی و از چپ پیوسته در $[0, 1)$ و در 0 از راست پیوسته است.

^{۵۳}strongest path

^{۵۴} α -cut

^{۵۵}crisp

^{۵۶}kernel

^{۵۷}convex

^{۵۸}non-convex

^{۵۹}fuzzy number

• همواره $\underline{u}(r) \leq \bar{u}(r)$ که $0 \leq r \leq 1$ است.

تعریف ۱.۲.۵.۱. از اعداد فازی متداول می‌توان به عدد فازی مثلثی^{۶۰} اشاره کرد. عدد فازی مثلثی به صورت سه‌تایی مرتب $\tilde{A} = (a_1, a_2, a_3)$ تعریف می‌شود که در آن $i = 1, 2, 3$ همگی اعداد حقیقی هستند. از طرفی تابع عضویت آن به صورت زیر است:

$$\mu_{\tilde{A}}(x) = \begin{cases} 0, & x < a_1, \\ \frac{x-a_1}{a_2-a_1}, & a_1 \leq x \leq a_2, \\ \frac{a_3-x}{a_3-a_2}, & a_2 \leq x \leq a_3, \\ 0, & x > a_3. \end{cases}$$

۱.۵.۱ برخی عملگرها روی اعداد فازی

تعریف ۱.۳.۵.۱. برای $\tilde{u} = (\underline{u}(r), \bar{u}(r))$ و $\tilde{v} = (\underline{v}(r), \bar{v}(r))$ دلخواه که $0 \leq r \leq 1$ است و اسکالر $k \in \mathbb{R}$ ، جمع، تفاضل، ضرب اسکالر با k و ضرب را تعریف می‌کنیم که به ترتیب به صورت زیر است:

۱. جمع

$$\underline{u} + \underline{v}(r) = \underline{u}(r) + \underline{v}(r), \quad \overline{u + v}(r) = \bar{u}(r) + \bar{v}(r).$$

۲. تفاضل

$$\underline{u} - \underline{v}(r) = \underline{u}(r) - \bar{v}(r), \quad \overline{u - v}(r) = \bar{u}(r) - \underline{v}(r).$$

۳. ضرب اسکالر

$$k\tilde{u} = \begin{cases} (k\underline{u}(r), k\bar{u}(r)) & , k \geq 0, \\ (k\bar{u}(r), k\underline{u}(r)) & , k < 0. \end{cases}$$

۴. ضرب

$$\underline{uv}(r) = \min \{ \underline{u}(r)\underline{v}(r), \underline{u}(r)\bar{v}(r), \bar{u}(r)\underline{v}(r), \bar{u}(r)\bar{v}(r) \},$$

$$\overline{uv}(r) = \max \{ \underline{u}(r)\underline{v}(r), \underline{u}(r)\bar{v}(r), \bar{u}(r)\underline{v}(r), \bar{u}(r)\bar{v}(r) \}.$$

برای ضرب دو عدد فازی، حالت‌های زیر در نظر گرفته می‌شود:

• هرگاه $\tilde{u} \geq 0$ و $\tilde{v} \geq 0$ باشد، بنابراین داریم:

$$\underline{uv}(r) = \underline{u}(r)\underline{v}(r),$$

$$\overline{uv}(r) = \bar{u}(r)\bar{v}(r).$$

^{۶۰} triangular fuzzy number

• هرگاه $\tilde{u} \leq \circ$ و $\tilde{v} \leq \circ$ باشد، بنابراین داریم:

$$\underline{uv}(r) = \bar{u}(r)\bar{v}(r),$$

$$\overline{uv}(r) = \underline{u}(r)\underline{v}(r).$$

• هرگاه $\tilde{u} \geq \circ$ و $\tilde{v} \leq \circ$ باشد، بنابراین داریم:

$$\underline{uv}(r) = \bar{u}(r)\underline{v}(r),$$

$$\overline{uv}(r) = \underline{u}(r)\bar{v}(r).$$

• هرگاه $\tilde{u} \leq \circ$ و $\tilde{v} \geq \circ$ باشد، بنابراین داریم:

$$\underline{uv}(r) = \underline{u}(r)\bar{v}(r),$$

$$\overline{uv}(r) = \bar{u}(r)\underline{v}(r).$$

۲.۵.۱ عملگرهای بازه‌ای

فرض کنید $A = [a_1, a_3]$ و $B = [b_1, b_3]$ بازه‌های روی \mathbb{R} باشند. عملگرهای بازه‌ای به صورت زیر تعریف می‌شوند:

۱. جمع

$$[a_1, a_3](+)[b_1, b_3] = [a_1 + b_1, a_3 + b_3].$$

۲. تفاضل

$$[a_1, a_3](-)[b_1, b_3] = [a_1 - b_3, a_3 - b_1].$$

۳. ضرب

$$[a_1, a_3](\bullet)[b_1, b_3] = [a_1 \bullet b_1 \wedge a_1 \bullet b_3 \wedge a_3 \bullet b_1 \wedge a_3 \bullet b_3, a_1 \bullet b_1 \vee a_1 \bullet b_3 \vee a_3 \bullet b_1 \vee a_3 \bullet b_3].$$

که در آن \wedge و \vee به ترتیب مینیمم و ماکسیمم هستند.

۴. تقسیم

$$[a_1, a_3](/)[b_1, b_3] = [a_1/b_1 \wedge a_1/b_3 \wedge a_3/b_1 \wedge a_3/b_3, a_1/b_1 \vee a_1/b_3 \vee a_3/b_1 \vee a_3/b_3].$$

به‌جز حالاتی که در آن $b_1 = \circ$ یا $b_3 = \circ$ باشند.

۵. بازه معکوس

$$[a_1, a_3]^{-1} = \left[\frac{1}{a_1} \wedge \frac{1}{a_3}, \frac{1}{a_1} \vee \frac{1}{a_3} \right].$$

به‌جز حالاتی که در آن $a_1 = \circ$ یا $a_3 = \circ$ باشند.

۳.۵.۱ عملگر روی عدد فازی مثلثی به وسیله α -برش

فرض کنید $\tilde{A} = (a_1, a_2, a_3)$ و $\tilde{B} = (b_1, b_2, b_3)$ دو عدد فازی مثلثی باشند. α -برش آن‌ها به ترتیب به صورت زیر است:

$$\tilde{A}_\alpha = [a_1^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)}], \forall \alpha \in [0, 1], a_1, a_3, a_1^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)} \in \mathbb{R},$$

$$\tilde{B}_\alpha = [b_1^{(\alpha)}, b_3^{(\alpha)}], \forall \alpha \in [0, 1], b_1, b_3, b_1^{(\alpha)}, b_3^{(\alpha)} \in \mathbb{R}.$$

که در آن $b_1^{(\alpha)} = (b_2 - b_1)\alpha + b_1$, $a_3^{(\alpha)} = -(a_3 - a_2)\alpha + a_3$, $a_1^{(\alpha)} = (a_2 - a_1)\alpha + a_1$ و $b_3^{(\alpha)} = -(b_3 - b_2)\alpha + b_3$ است.

چون α -برش اعداد فازی، مجموعه‌ای قطعی است، بنابراین می‌توان عملگرهای بازه‌ای را برای آن‌ها به کار برد.

• جمع

$$[a_1^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)}](+)[b_1^{(\alpha)}, b_3^{(\alpha)}] = [a_1^{(\alpha)} + b_1^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)} + b_3^{(\alpha)}].$$

• تفاضل

$$[a_1^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)}](-)[b_1^{(\alpha)}, b_3^{(\alpha)}] = [a_1^{(\alpha)} - b_3^{(\alpha)}, a_3^{(\alpha)} - b_1^{(\alpha)}].$$

جمع و تفاضل اعداد فازی مثلثی، عدد فازی مثلثی است ولی ضرب و تقسیم آن‌ها فازی مثلثی نیست.

فصل ۲

اندیس‌های توپولوژیکی

۱.۲ اندیس‌های توپولوژیکی

برای تعیین تشابه یا تفاوت ساختاری مولکول‌ها نیاز به به‌دست آوردن توصیف‌گرهای مولکولی عددی مناسب است. توصیف‌گرهای مولکولی زیادی در شیمی وجود دارد که شامل پارامترهای شیمی-فیزیکی، اندیس توپولوژیکی، توصیف‌گرهای سه بعدی و اندیس‌های شیمی کوانتومی هستند.

تعریف ۱.۱.۲. عددی که یک گراف مولکولی را توصیف می‌کند و ارتباط بین خواص مولکول و ساختار ظاهری آن را نشان می‌دهد، اندیس توپولوژیکی^۱ نامیده می‌شود [۲۸].

در هر حال شیمی‌دان‌ها ترجیح می‌دهند که از اندیس‌های توپولوژیکی، که مانند توصیف‌گرهای مولکولی ارزیابی می‌شوند و فعالیت‌های زیستی را پیشگویی می‌کنند، استفاده کنند زیرا اندیس‌های توپولوژیکی اغلب یک راه ساده برای اندازه‌گیری انشعاب‌های مولکولی، شکل، اندازه، حلقوی بودن، تقارنی بودن، مرکزی بودن و پیچیدگی‌های مولکول است [۱۵].

مطالعات گسترده در روابط کمی ساختار با ویژگی مولکولی (*QSPR*) و روابط کمی ساختار با فعالیت مولکولی^۲ (*QSAR*) نشان‌دهنده توجه ارتباط فعالیت‌ها یا ویژگی‌ها، با توصیف‌گرهای ساختاری ترکیبات است. ارتباط و پیشگویی‌های فیزیکی، شیمیایی، زیستی و ویژگی-فعالیتی از ساختار مولکولی بسیار مهم است و یک مسأله غیرقابل حل در نظریه‌ها، شیمی محاسباتی، شیمی محیطی، شیمی بهداشتی و علوم زندگی است. در واقع مقالات بسیاری در *QSAR* و *QSPR* بررسی و در زمینه‌های مختلف منتشر شده است.

اولین مرحله که مهم‌ترین قدم در این مطالعات است، کدگذاری عددی ساختار شیمیایی از مولکول‌های مختلف است که یک رابطه بین مدل و ساختار شیمیایی و در واقع یک تناظر شیمیایی زیستی با ویژگی/فعالیتی است.

^۱topological indices

^۲quantitative structure-property relationships

باساک^۲ و همکارانش در سال ۱۹۹۹ نتیجه گرفتند که اندیس توپولوژیکی، اولین روش قابل اجرا در تحقیقات QSAR است. اخیراً مقالات زیادی بررسی شده و مطالعات وسیعی در این زمینه انجام گرفته است.

در ساختمان مولکول، فعالیت‌ها و ویژگی‌های بسیاری، وابسته به حضور اتم‌های خاص و یا گروه تابعی در ساختار آنهاست. یک هدف مهم در QSAR یا QSPR ارتباط ساختار مولکولی با ویژگی-فعالیتی زیستی مولکول است که با تعریف ابزارهای آماری، می‌تواند به صورت ریاضی زیر بیان شود:

$$A \setminus P = f(\text{توصیف‌گر مولکولی}) = f(\text{ساختار مولکولی})$$

به طوری که $A \setminus P$ نشان‌دهنده یک فعالیت یا ویژگی مهم در شیمی و یا یک اندازه مقداری زیستی است. ویژگی یا فعالیت یک مولکول معمولاً می‌تواند برای نقطه جوش معمولی، گرمای تشکیل، دمای بحرانی، غلظت، نقطه اشتعال، ضریب شکست و زمان بازداری رنگ‌نگاری استفاده شود. در اینجا $f(\cdot)$ نشان‌دهنده یک تابع است که وابسته به ساختار مولکولی و یا توصیف‌گر مولکولی است. در حالت کلی، مدل تابع $f(\cdot)$ می‌تواند خطی یا غیرخطی باشد که وابسته به پیچیدگی اطلاعات، مختلف است [۱۵].

تاکنون بیش از چهارصد نوع اندیس توپولوژیکی تعریف شده است. بسیاری از اندیس‌های توپولوژیکی معرفی شده، مبتنی بر روابط میان رئوس و یا فاصله توپولوژیکی گراف است. بنابراین اندیس‌های توپولوژیکی می‌توانند ماتریس مجاورت و یا ماتریس مسافت گراف را ترسیم کنند. بر همین اساس، اندیس‌ها را به دو دسته تقسیم کرده و به معرفی آن‌ها می‌پردازیم:

۱.۱.۲ اندیس‌های مبتنی بر روابط رئوس

اندیس‌های توپولوژیکی مرتبط با روابط <اتم-اتم> در گراف، مبتنی بر مجموع درجات تمام رئوس مجاور و یا طیف گراف است.

جدول ۱-۲: اندیس‌های مبتنی بر روابط اتم-اتم [۱۵]

تعریف	نام اندیس
$M_1(G) = \sum_{j=1}^n d(v_j)^2$	اندیس گروه زاگرب
$M_2(G) = \sum_{i,j} d(v_i)d(v_j)$	
$\chi_R(G) = \sum_{i,j} (d(v_i)d(v_j))^{-1/2}$	اندیس راندیک
$2N = \sum_{i,j} (d(v_i) + d(v_j)) - 2$	اندیس GSI
$m_{et}(G) = \sum_n \prod_i [\delta(e_i)]^{-1/2}$	اندیس تبدیل ECI
$\delta(e_i)$ درجه یال e_i است.	
$F(G) = \sum_i \delta(e_i)$	عدد Platt

^۲Basak

۲.۱.۲ اندیس‌های مبتنی بر فواصل توپولوژیک

اندیس‌های توپولوژیکی زیر مبتنی بر فواصل توپولوژیک بین اتم‌ها می‌باشد که شامل کوتاهترین مسیر و طولانی‌ترین مسیر بین رئوس است.

جدول ۲-۲: اندیس‌های مبتنی بر فواصل توپولوژیک [۱۵]

نام اندیس	تعریف
اندیس وینر	$W(G) = \sum_{i,j} d(v_i, v_j)$
اندیس بالابان	$j = \sum (S_i S_j)^{-1/2}$ S_i و S_j مجموع مسافت رئوس v_i و v_j هستند
اندیس $G - S$	$S(G) = \sum_i (L_3)_i$ L_3 تمام گشت‌ها به طول ۳ می‌باشد.
اندیس انحراف	$w = \frac{1}{4} \sum_i \sum_j (\Delta)_{ij}$ $(\Delta)_{ij}$ طولانی‌ترین مسیر بین رأس i و j است.

۲.۲ اندیس وینر

نیم قرن پیش در سال ۱۹۴۷، هارولد وینر^۴ مقاله‌ای با نام "تعیین ساختار نقطه جوش پارافین" منتشر کرد. برای اولین بار در این کار، مقدار W_e ، اندیس وینر^۵ یا عدد وینر نامیده شد. این اصطلاح زبانی، چندین دهه بعد از وینر پدیدار شد. W_e مجموع مسافت بین تمام جفت رئوس در یک گراف مولکولی از یک آلکان است که هدف آن، ارائه یک غلظت مولکولی از هیدروکربن موردنظر است [۱۰].

در سال‌های و وینر مقالاتی منتشر کرد که در آن نشان داد ارتباطی قوی بین W_e و ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی مختلف ترکیبات آلی وجود دارد. با این حال سرعت پیشرفت در این میدان از تحقیقات به سرعت نبود. پس از سال، توداس^۶ و استیل^۷ اولین دانشمندانی بودند که صرف‌نظر از وینر، از W_e استفاده کردند. تنها در سال ۱۹۷۱، هوسویا^۸ یک تعریف درست و کامل از وینر ارائه داد. در سال ۱۹۷۵ و ۱۹۷۶ کافورد^۹ و رواری^{۱۰} دوباره W_e را اختراع کردند و این نشان داد در این زمان، مفهوم عدد وینر در میان علوم نظری و ریاضی-شیمی کاملاً ناشناخته بود.

سرانجام در سال ۱۹۸۰ در برخی از مکان‌ها، نتایج حاصل از آزمون اندیس وینر در مقالات منتشر

شد.

^۴Harold Wiener

^۵wiener index

^۶Todas

^۷Still

^۸Hosoya

^۹Cafford

^{۱۰}Rouvary

یک امتیاز اندیس وینر، کدگذاری تمام جفت اتم‌ها در یک مولکول است که شامل طول کوتاهترین پیوند با مسیر پیوند است و از الگوریتم کوتاهترین مسیر استفاده می‌کند. این روش سریع‌ترین غربالگری مولکولهاست که، ساختار مولکولی را به صورت مستقیم محاسبه می‌کند. همچنین این اندیس در مدل QSAR، استفاده می‌شود که در مقایسه با روش‌های تجربی، بسیار بهتر پارامترهای شیمی فیزیک را تعیین می‌کند [۱۰].

تعریف ۱.۲.۲. فرض کنید G یک گراف همبند ساده با مجموعه رئوس $V(G)$ و مجموعه یال‌های $E(G)$ باشد. اندیس وینر از گراف G به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۷]:

$$W(G) = \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v).$$

مسافت میانگین $\mu(G)$ بین تمام رئوس از G برابر است با [۲۷]:

$$\mu(G) = \frac{W(G)}{\binom{|V(G)|}{2}}.$$

قضیه ۲.۲.۲. [۲۷] فرض کنید G یک گراف با n رأس و m یال باشد به طوری که طول هر مسیر کمتر از ۳ باشد. آنگاه:

$$W(G) = n(n-1) - m.$$

برهان. چون G شامل m یال است، لذا m جفت رأس وجود دارند که به فاصله یک هستند. طبق فرض چون طول هر مسیر کمتر از ۳ است بنابراین $m - \binom{n}{2}$ جفت رأس باقی می‌ماند که به فاصله ۲ هستند. لذا داریم:

$$W(G) = (1 \times m) + 2 \left[\binom{n}{2} - m \right] = n(n-1) - m.$$

□

نتیجه ۳.۲.۲. [۸] اگر $G(n, m)$ ، یک گراف با $\Delta(G) = n-1$ باشد، آنگاه $W(G) = n^2 - n - m$.

تعریف ۴.۲.۲. گراف $G+x$ ، گرافی است که با وصل کردن n یال جدید، از تمام رئوس G به رأس x تشکیل می‌شود [۸].

نتیجه ۵.۲.۲. [۸] اگر $G(n, m)$ ، یک گراف همبند باشد، اندیس وینر $G+x$ ، برابر $n^2 - m$ است.

تعریف ۶.۲.۲. گراف $G_1 + G_2$ ، از وصل کردن هر رأس از G_1 ، به تمام رئوس G_2 تشکیل می‌شود [۸].

نتیجه ۷.۲.۲. [۸] اگر $G_1(n_1, m_1)$ و $G_2(n_2, m_2)$ دو گراف همبند باشند، آنگاه:

$$W(G_1 + G_2) = n_1(n_1 - 1) + n_2(n_2 - 1) + n_1 n_2 - m_1 - m_2.$$

قضیه ۸.۲.۲. فرض کنید G گراف همبند دوبخشی با $a + b$ راس باشد. آنگاه:

$$W(G) \geq (a + b)(a + b - 1) - ab$$

برهان. گراف دوبخشی G ، گرافی است که برخی از یال‌های گراف $K_{a,b}$ حذف شده است. بنابراین:

$$\begin{aligned} W(G) &\geq W(K_{a,b}) = ab + 2 \sum_{i=1}^{a-1} i + 2 \sum_{i=1}^{b-1} i \\ &= ab + a(a-1) + b(b-1) \\ &= (a+b)(a+b-1) - ab \end{aligned}$$

□

قضیه ۹.۲.۲. [۲۵] فرض کنید G یک گراف همبند با مجموعه رئوس $V(G) = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ و

مجموعه یال $E(G) = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ باشد. فرض کنید $d_i = \deg(v_i)$ آنگاه:

$$W(L(G)) \geq \sum_{i=1}^n \frac{d_i(d_i-1)}{2} + m(m-1) - \sum_{i=1}^m \deg(e_i).$$

برهان. اگر $d_i = \deg(v_i)$ آنگاه برای هر رأس v_i ، d_i یال وجود دارد که با v_i برخورد می‌کند. این d_i یال از گراف مکمل، روی d_i رأس در $L(G)$ هستند به طوری که: $\frac{d_i(d_i-1)}{2}$ در $W(L(G))$ شرکت دارند. یک یال $e = (u, v)$ با $\deg(u) + \deg(v) - 2 = \deg(e)$ یال که u و v در کنار هم قرار می‌گیرند، مجاور است. در اینجا یال e با بقیه $m-1 - \deg(e)$ یال در G مجاور نیست. در $L(G)$ ، فاصله e و بقیه $m-1 - \deg(e)$ رأس، بیشتر از ۱ است. در اینجا هر یال $e = (u, v)$ در $L(G)$ در مسافت حداقل $2(m-1 - \deg(e))$ مشارکت دارد. بنابراین:

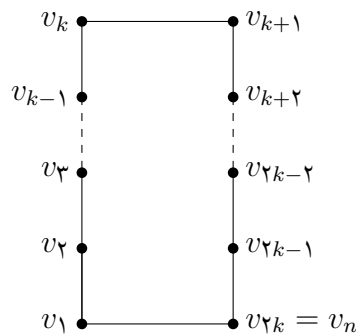
$$\begin{aligned} W(L(G)) &\geq \sum_{i=1}^n \frac{d_i(d_i-1)}{2} + \frac{1}{2} \sum_{e \in E(G)} 2(m-1 - \deg(e)) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{d_i(d_i-1)}{2} + \sum_{i=1}^m (m-1 - \deg(e_i)) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{d_i(d_i-1)}{2} + m(m-1) - \sum_{i=1}^m \deg(e_i) \end{aligned}$$

□

قضیه ۱۰.۲.۲. [۲۷] اندیس وینر از گراف دوری از مرتبه n ، C_n به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$W(C_n) = \begin{cases} \frac{n^3}{8}, & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \\ \frac{n^3 - n}{8}, & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \end{cases}$$

برهان. ابتدا مجموع فاصله رئوس را از یک رأس ثابت مانند v_1 محاسبه می‌کنیم.



شکل ۱.۲: گراف دوری با طول زوج

- فاصله راس v_1 از رئوس v_2 تا v_k به ترتیب برابر ۱ تا $k - 1$ می‌باشد.
- فاصله راس v_1 از رئوس v_{k+1} تا v_{2k} به ترتیب برابر $k - 1$ تا 1 می‌باشد.
- فاصله راس v_1 تا راس v_{k+1} برابر k است.

لذا داریم:

$$\sum_{i=1}^n = 0 + 1 + \dots + (k - 1) + k + (k - 1) + \dots + 1 = k^2$$

حال برای محاسبه اندیس وینر داریم:

$$\begin{aligned} W(G) &= \frac{1}{2} \sum_j \sum_i d(v_1, v_n) \\ &= \frac{1}{2} 2k \cdot k^2 \\ &= k^3 \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^3 \\ &= \frac{n^3}{8} \end{aligned}$$

به همین ترتیب برای دور فرد داریم:

$$\sum_{i=1}^n d(v_1, v_i) = 0 + 1 + \dots + (k - 1) + k + k + (k - 1) + \dots + 1 = k^2 + k$$

$$\begin{aligned}
 W(G) &= \frac{1}{2} \sum_j \sum_i d(v_j, v_i) \\
 &= \frac{1}{2} n(k^2 + k) \\
 &= \frac{1}{2} n \left\{ \left(\frac{n-1}{2} \right)^2 + \frac{n-1}{2} \right\} \\
 &= \frac{n^3 - n}{8}
 \end{aligned}$$

□

قضیه ۱۱.۲.۲. اندیس وینر از هر آلکان از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$W(G) = \frac{1}{6}(n^3 - n)$$

برهان. برای یک n -آلکان ماتریس مسافت در حالت کلی به صورت زیر است:

$$D = \begin{bmatrix}
 0 & 1 & 2 & \dots & n-1 \\
 1 & 0 & 1 & \dots & n-2 \\
 2 & 1 & 0 & \dots & n-3 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 n-1 & n-2 & n-3 & \dots & 0
 \end{bmatrix}$$

اندیس وینر مجموع اعضای قطر بالا مثلثی از ماتریس مسافت است. بنابراین:

$$\begin{aligned}
 W(G) &= \sum_{k=1}^{n-1} k + \sum_{k=1}^{n-2} k + \dots + 1 + 0 \\
 &= \sum_{k=1}^{n-1} k(n-k) \\
 &= n \sum_{k=1}^{n-1} k - \sum_{k=1}^{n-1} k^2 \\
 &= \frac{n(n-1)n}{2} - \frac{(n-1)n[2(n-1)+1]}{6} \\
 &= \frac{n^3 - n}{6}
 \end{aligned}$$

□

۱.۲.۲ کاربردهایی از اندیس وینر

وینر، اندیس خود W_e را برای محاسبه نقطه جوش آلکان‌ها، استفاده کرد. فرمول وینر برای نقطه جوش به صورت زیر است:

$$bp = \alpha W_e + \beta P + \gamma$$

که α, β, γ ثابت‌های تجربی هستند و P عدد قطبی، تعداد جفت رئوسی است که فاصله آنها برابر ۳ است. در سری بعدی مقالات، تحقیقات بر روی نقطه جوش و مطابقت آن با اندیس وینر W_e در ویژگی ساختاری، خارج شد. او W_e را برای پیش‌بینی نقطه جوش، مقدار مولار، اندیس انکساری، گرمای ایزومر و دمای تبخیر آلکان‌ها استفاده کرد. بعدها نشان داده شد که اندیس وینر، اندازه‌ای از مساحت سطح مولکول موردنظر و بنابراین بازتاب غلظت آن است. مشابه همین نتیجه، W_e با نیروی بین مولکولی به ویژه در مورد هیدروکربن‌هایی که گروه قطبی ندارند، رابطه دارد. ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی از ساختار ساده که به مساحت سطح مولکول یا روی پیوند ساختار مولکولی اتم کربن وابسته است به خوبی با W_e ارتباط دارد. در میان اینها، دمای تشکیل، تبخیر، تجزیه، چگالی، نقطه جوش، فشار بحرانی، ضریب شکست نور، کشش سطحی، گرانیوی، دوری و غیردوری بودن، اشباع شدن و غیراشباع شدن در انواع هیدروکربن‌های آروماتیک، سرعت مافوق صدا در آلکان‌ها و الکل‌ها، سرعت جریان برق از کلروبنزن‌ها و غیره نیز وجود دارد. همین‌طور ارتباط بین W_e و نقطه ذوب گزارش شده بود که نتایج مطلوب و مناسب نبود.

به ویژه در کاربردهای عملی، پیش‌بینی حرکت مواد بنیادی در رنگ‌نگاری گازها، مهم است. برای حفظ زمان‌های رنگ‌نگاری (CRT) از مونوالکیل‌ها و الکیل‌بنزن-D می‌توانند با W_e محاسبه شوند:

$$CRT = \alpha W_e^\beta + \gamma$$

بطوریکه α, β, γ پارامترهایی هستند که به صورت تجربی به دست می‌آیند [۱۰].
مثال‌های دیگری نیز می‌تواند آورده شود:

چون خواص دارویی ماده با برخی از ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی آن ارتباط دارد، جای تعجب نیست که از W_e برای طراحی داروهای جدید استفاده کنیم. لوکویتس^{۱۱} رابطه‌ای بین W_e و فعالیت آنتی‌هیستامین از ترکیبات جالب دارویی کشف کرد. اخیراً او در مطالعات خود، W_e را برای ضریب تفکیک آب n -اوکتان (شاخص انتقال ویژگی‌ها و برهم‌کنش‌ها بین گیرنده و مولکول فعالیتی) که یک پارامتر فیزیو-شیمی برای فعالیت دارویی ترکیبات مهم بود، بکار برد [۲۳].

۳.۲ اندیس PI

پادماکار ایوان^{۱۲}، برای اولین بار اندیس یالی PI را معرفی کرد که بر اساس فاصله بین یال‌ها تعریف می‌شود.

تعریف ۱.۳.۲. فرض کنید G یک گراف همبند باشد. در این صورت:

$$PI(G) = \sum_{uv=e \in E(G)} (n_{eu}(e | G) + n_{ev}(e | G))$$

^{۱۱}Lukovits

^{۱۲}Padmakar Ivan

که در آن $n_{eu}(e | G)$ تعداد یال‌هایی است که به u نزدیکتر از v است و $n_{ev}(e | G)$ تعداد یال‌هایی است که به v نزدیکتر از u است [۱۷].

در گراف‌های مولکولی بزرگ، به‌دست آوردن n_{eu} و n_{ev} کار مشکلی است. به همین دلیل، از فرمول زیر برای محاسبه PI استفاده می‌کنیم.

ملاحظه ۲.۳.۲. فرض کنید G یک گراف همبند باشد. در این صورت:

$$\begin{aligned} PI(G) &= \sum_{uv=e \in E(G)} (n_{eu}(e | G) + n_{ev}(e | G)) \\ &= \sum_{uv=e \in E(G)} (E | G | - N(e)) \\ &= |E(G)|^2 - \sum_{uv=e \in E(G)} N(e) \end{aligned}$$

که در آن $N(e)$ تعداد یال‌هایی است که فاصله‌شان از دوسر یال $e = uv$ به یک اندازه است [۲].

۱.۳.۲ اندیس PI در درخت‌ها و گراف‌های بدون دور

در هر درخت، یال‌های هم‌فاصله با یک یال دلخواه برابر یک است. پس برای هر یال دلخواه $1 = N(e)$ است. در این صورت، اندیس PI هر درخت با n راس برابر است با [۲]:

$$\begin{aligned} PI(T) &= |E(T)|^2 - \sum_{e \in E(T)} N(e) \\ &= (n-1)^2 - \sum_{e \in E(T)} 1 \\ &= (n-1)^2 - (n-1) \\ &= (n-1)(n-2). \end{aligned}$$

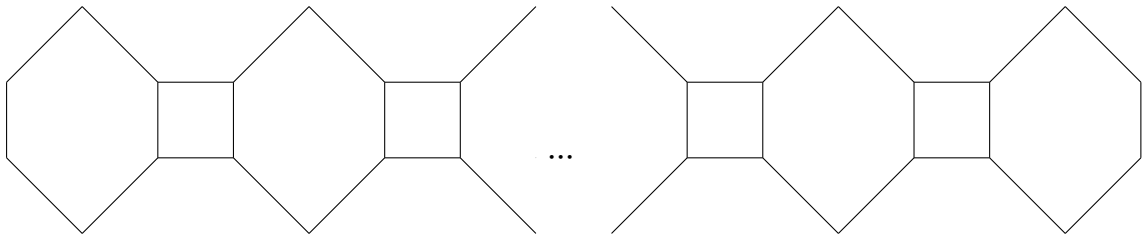
اندیس PI برای هر دور به طول k ، بسته به زوج یا فرد بودن از روابط زیر به‌دست می‌آید:
اگر k زوج باشد، اندیس PI آن برابر است با:

$$\begin{aligned} PI(C_k) &= |E(C_k)|^2 - \sum_{e \in E(C_k)} N(e) \\ &= k^2 - 2k \\ &= k(k-2) \end{aligned}$$

و اگر k فرد باشد:

$$\begin{aligned} PI(C_k) &= |E(C_k)|^2 - \sum_{e \in E(C_k)} N(e) \\ &= k^2 - k \\ &= k(k-1). \end{aligned}$$

۲.۳.۲ گراف زنجیری



شکل ۲.۲: نمایش یک گراف زنجیری

شکل (۲.۲) نمایش یک گراف زنجیری است که شامل h دور به طول ۶ و $h - 1$ دور به طول ۴ است که آن را با PH_h نشان می‌دهیم. این گراف شامل $8h - 2$ یال است. مجموع تعداد یال‌های افقی و مایل برابر $6h - 2$ است. $N(e)$ برای یال‌های افقی و مایل برابر ۲ و برای یال‌های عمودی برابر $2h$ است. در هر مرحله ۲ یال افقی و مایل وجود دارد که فاصله آن از دو سر یال uv به یک میزان است. نتیجه داریم:

$$\begin{aligned} PI(PH_h) &= |E(PH_h)|^2 - \sum_{e \in E(PH_h)} N(e) \\ &= (8h - 2)^2 - 2(6h - 2) \\ &= 60h^2 - 44h + 8. \end{aligned}$$

۳.۳.۲ زنجیر خطی بنزنی

زنجیر خطی بنزنی L_h را در نظر می‌گیریم. h تعداد شش‌ضلعی‌ها در زنجیر خطی است. یال‌ها را به دو قسمت مایل و عمودی تقسیم می‌کنیم.



شکل ۳.۲: نمایش زنجیر مولکول بنزن خطی

تعداد کل یال‌ها در زنجیر خطی بنزنی برابر $5h + 1$ است. تعداد یال‌های عمودی برابر $h + 1$ است.

تعداد یال‌های مایل برابر $4h$ است.
 برای $N(e)$ یال‌های مایل برابر ۲ و برای یال‌های عمودی برابر $h + 1$ است.
 بنابراین:

$$\begin{aligned} PI(L_h) &= |E(L_h)|^2 - \sum_{e \in E(L_h)} N(e) \\ &= (5h + 1)^2 - (h + 1)^2 - 2(4h) \\ &= 24h^2. \end{aligned}$$

۴.۲ اندیس گاتمن

اندیس گاتمن^{۱۳} یک اندیس توپولوژیکی مولکولی است که به اندیس شولتز^{۱۴} نیز معروف است، در سال ۱۹۹۴ توسط گاتمن^{۱۵} معرفی شد و به صورت مجموع وزن رئوس در کوتاهترین فاصله، بین تمام جفت رئوس در یک گراف است. گاتمن در مورد ساختارهای مارپیچی کشف کرد که این اندیس، رابطه نزدیکی با اندیس وینر دارد.

در تحقیقات تئوری بر روی این اندیس، سوالاتی در مورد مولکول‌های چند حلقه‌ای مطرح می‌شود. دانشمندان بسیاری این اندیس را مورد مطالعه قرار داده و روابط آن را با دیگر ویژگی‌های گراف بررسی می‌کنند. دانکلن^{۱۶} یک کران بالا برای اندیس گاتمن ارائه داد و نیز رابطه‌ای بین اندیس وینر یالی و اندیس گاتمن از گراف‌ها به وجود آورد. دگاتمن^{۱۷} و موکومبی^{۱۸} نیز کران‌هایی برای این اندیس ارائه دادند [۲۴].

تعریف ۱.۴.۲. فرض کنید $G = (V, E)$ گراف همبند، ساده و متناهی باشد. اندیس گاتمن از G به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Gut(G) = \sum_{u, v \subseteq V} deg_G(u).deg_G(v).d_G(u, v)$$

به طوری که $deg_G(u)$ و $deg_G(v)$ به ترتیب درجه رأس u و v و $d_G(u, v)$ کوتاهترین مسیر بین رأس u و v است [۲۴].

۱.۴.۲ کران‌هایی برای اندیس گاتمن

حال یک کران پایین کلی برای این اندیس ارائه می‌دهیم:

^{۱۳}gutman index

^{۱۴}schultz

^{۱۵}Gutman

^{۱۶}Dankelman

^{۱۷}Gutman

^{۱۸}Mukwembi

قضیه ۲.۴.۲. [۶] برای هر گراف همبند G با n رأس داریم:

$$(2n - 3)(n - 1) = Gut(S_n) \leq Gut(G).$$

به طوری که S_n گراف ستاره با n رأس می‌باشد.

برهان. ابتدا حالتی را در نظر می‌گیریم که گراف G دارای برگ نیست. به عبارت دیگر $\delta(G) \geq 2$ بنا بر این:

$$\begin{aligned} Gut(G) &= \sum_{u,v \in V} deg(u).deg(v).d(u,v) \\ &\geq 4 \sum d(u,v) \\ &\geq 4 \binom{n}{2} = 2n(n-1) \\ &\geq (2n-3)(n-1) = Gut(S_n) \end{aligned}$$

اگر $\delta(G) = 1$ ، با استقرا روی تعداد رئوس قضیه را ثابت می‌کنیم. فرض کنیم برای $n = 1$ گزاره درست است.

فرض می‌کنیم که گزاره برای یک گراف با n رأس برقرار است.

گراف G' را با $n + 1$ رأس از G و با اضافه کردن یک برگ x که در $a \in V(G)$ واقع می‌شود، تولید می‌کنیم. نشان می‌دهیم که با اضافه کردن رأس x ، اندیس گاتمن حداقل به اندازه

$$4n - 3 = Gut(S_{n+1}) - Gut(S_n)$$

افزایش می‌یابد.

برای سادگی برهان فرض می‌کنیم:

$$D_G(u, v) = deg_G(u).deg_G(v).d_G(u, v)$$

$$D_{G'}(u, v) = deg_{G'}(u).deg_{G'}(v).d_{G'}(u, v)$$

حال داریم:

$$\begin{aligned} Gut(G') - Gut(G) &= \sum_{v \in V(G) \setminus \{a\}} [D_{G'}(a, v) - D_G(a, v)] \\ &+ \sum_{v \in V(G)} D_{G'}(x, v) + \sum_{u, v \in V(G) \setminus \{a\}} [D_{G'}(u, v) - D_G(u, v)]. \end{aligned}$$

از ساختمان گراف G' می‌بینیم که برای هر $u, v \in V(G)$

$$d_{G'}(u, v) = d_G(u, v)$$

$$d_{G'}(x, v) = 1 + d_G(a, v)$$

بنابراین، این نکته وجود دارد که درجه رأس a ، یک واحد بیشتر شده و درجه رئوس دیگر تغییر نمی‌کند. واضح است که مشارکت رئوس $u, v \in V(G) \setminus \{a\}$ در $Gut(G)$ و $Gut(G')$ یکسان است. در اینجا:

$$\begin{aligned} Gut(G') - Gut(G) &= \sum_{v \in V(G) \setminus \{a\}} deg_G(v) \cdot d_G(a, v) + \sum_{v \in V(G)} deg_{G'}(v)(d_G(a, v) + 1) \\ &= 2 \sum_{v \in V(G) \setminus \{a\}} deg_G(v) d_G(a, v) + \sum_{v \in V(G)} deg_G(v) + 1 \\ &\quad \text{چون } 1 \leq d_G(a, v) \text{ و } 1 \leq deg_G(v) \text{ برای هر } v \in V(G) \setminus \{a\} \\ &\quad \sum_{v \in V(G)} deg_G(v) = 2 |E(G)| \geq 2(n-1) \end{aligned}$$

لذا داریم:

$$Gut(G') - Gut(G) \geq 4n - 3.$$

بنابراین معادله برای هر $v \in V(G) \setminus \{a\}$ برقرار است اگر و تنها اگر $deg_G(v) = 1$. به طوری که فقط برای گراف S_n صدق می‌کند.

□

۵.۲ اندیس Sz

نزدیکترین اندیس به اندیس گاتمن، اندیس Sz نام دارد که در سال ۱۹۹۵ توسط خادیکار^{۱۹} و همکارانش معرفی شد. این اندیس کاربرد بسیاری در طراحی داروها دارد.

تعریف ۱.۵.۲. برای هر گراف G با حداقل دو رأس اندیس Sz به صورت:

$$Sz(G) = \sum_{e \in E} n_u(e) n_v(e)$$

تعریف می‌شود به طوری که [۱۶]:

$$n_u(e) = |N_u(e)| \quad n_v(e) = |N_v(e)|$$

$$N_u(e) = \{x \in V : d(u, x) \leq d(v, x)\}$$

$$N_v(e) = \{x \in V : d(v, x) \leq d(u, x)\}$$

حال این تعریف را به صورت دیگری بیان می‌کنیم. قرار می‌دهیم:

$$Sz(G) = \sum_{e \in E} \pi(e), \quad e = \{u, v\}$$

$$\pi(e) = n_u(e) \cdot n_v(e)$$

برای سادگی هم‌چنین تعریف می‌کنیم:

$$\pi(e) = \sum_{\{x, y\} \subseteq V} \mu_{x, y}(e)$$

^{۱۹}Khadikar

به طوری که $\mu_{x,y}(e)$ ، اشتراک جفت رئوس x و y در ضرب بالاست که به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۲]:

$$\mu_{x,y}(e) = \begin{cases} 1 & \text{اگر } \begin{cases} d(x,u) \leq d(x,v) \text{ و } d(y,v) \leq d(y,u) \\ \text{یا} \\ d(x,v) \leq d(x,u) \text{ و } d(y,u) \leq d(y,v) \end{cases} \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases}$$

در گراف‌های غیردوری و درخت‌ها، اندیس وینر و اندیس Sz باهم معادلند [۱۶].

قضیه ۲.۵.۲. [۱۲] برای هر گراف همبند G داریم:

$$Sz(G) \geq W(G).$$

حالت تساوی تنها زمانی برقرار است که هر بخش G یک گراف کامل باشد.

برهان. فرض کنید $G = (V, E)$. آنگاه داریم:

$$\sum_{e \in E} \mu_{x,y}(e) \geq d(x, y; G) \quad (۱.۲)$$

که برای هر $x, y \in E$ می‌بینیم کوتاهترین مسیر بین x و y را می‌دهد. بنابراین زمانی که e متعلق به این مسیر باشد $\mu_{x,y}(e) = 1$. حال با جمع روی تمام زیرمجموعه‌های دو رأسی $\{x, y\}$ قضیه اثبات می‌شود.

واضح است که حالت تساوی در قضیه تنها زمانی اتفاق می‌افتد که معادله (۱.۲) برای تمام زیرمجموعه $\{x, y\}$ به صورت مساوی باشد. برای تکمیل برهان فرض می‌کنیم برخی از بخش‌ها در G (مانند B) گراف کامل نباشد.

در حالت کلی هر دو رأس متعلق به یک بخش در یک دور قرار دارد. حال کوتاهترین دور را که شامل دو رأس غیرمجاور (x, y) است، در نظر می‌گیریم. رئوس این دور یک زیرگراف شامل B است که با یک دور C_n و $n \geq 4$ یا با گراف $C_4 + c$ که c یک وتر است، یکرخت می‌باشد. با فرض $\mu_{x,y}(e) = 1$ برای هر یال e متعلق به گراف موردنظر است.

در نتیجه برای این حالت خاص، تساوی برقرار نیست. به عبارت دیگر اگر تمام بخش‌های G گراف کامل باشند، آنگاه معادله همیشه رابطه تساوی دارد.

□

ملاحظه ۳.۵.۲. [۱۲] برای هر درخت G با n رأس داریم:

$$Sz(k_{1,n-1}) \leq Sz(G) \leq Sz(P_n).$$

ملاحظه ۴.۵.۲. [۱۲] برای هر گراف همبند و غیردوری G با n رأس داریم:

$$Sz(K_{1,n-1} + e) \leq Sz(G) \leq Sz(U_n).$$

به طوری که:

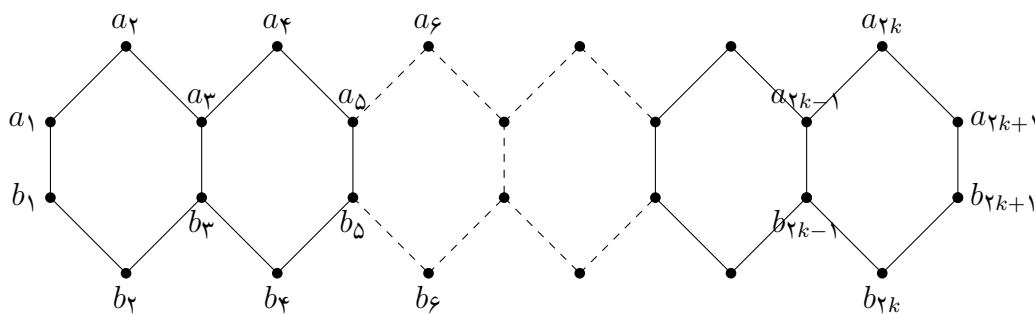
$$U_n = \begin{cases} C_n, & n \text{ زوج باشد} \\ C_{n-1}.K_2, & n \text{ فرد باشد} \end{cases}$$

۱.۵.۲ زنجیر خطی بنزنی

اندیس Sz در زنجیر خطی بنزنی به صورت زیر است [۱۸]:

$$Sz(G_k) = \frac{4}{3}k^3 - 4k^2 - \frac{22}{3}k + 1$$

برهان:



فرض می‌کنیم:

$$n_u(e) = |N_u(e | G)|, \quad n_v(e) = |N_v(e | G)|$$

مشاهده می‌کنیم برای هر یال عمودی $e = (a_{2s+1}, b_{2s+1})$ و $s = 0, k$ داریم:

$$N_{a_{2s+1}}(e | G_k) = \{a_1, a_2, \dots, a_{2k+1}\}$$

$$N_{b_{2s+1}}(e | G_k) = \{b_1, b_2, \dots, b_{2k+1}\}$$

لذا:

$$|N_{a_{2s+1}}(e | G_k)| = 2k + 1$$

$$|N_{b_{2s+1}}(e | G_k)| = 2k + 1$$

مشارکت یال $e = (a_{2s+1}, b_{2s+1})$ در فرمول Sz برابر است با:

$$(2k + 1)^2$$

حال فرض کنیم s یک عدد فرد باشد که $s \in \{1, 2, \dots, 2k + 1\}$ و $e = (a_s, a_{s+1})$ یک یال مایل است. می‌بینیم که روابط زیر برقرارند:

$$N_{a_{s+1}}(e | G_k) = \{b_{s+2}, b_{s+3}, \dots, b_{2k+1}\} \cup \{a_{s+1}, a_{s+2}, \dots, a_{2k+1}\}$$

$$N_{a_s}(e | G_k) = \{a_1, a_2, \dots, a_s\} \cup \{b_1, b_2, \dots, b_{s+1}\}$$

بنابراین:

$$|N_{as+1}(e | G_k)| = 4k - 2s + 1$$

$$|N_{as}(e | G_k)| = 2s + 1$$

مشارکت یال $e = (a_s, b_{s+1})$ در فرمول Sz برابر است با:

$$(4k - 2s + 1)(2s + 1) = 8ks - 4s^2 + 4k + 1$$

فرض می‌کنیم s یک عدد زوج باشد که $s \in \{1, 2, \dots, 2k+1\}$ و $e = (a_s, b_{s+1})$ یک یال مایل است که $N_{as+1}(e | G_k)$ و $N_{as}(e | G_k)$ در معادلات زیر صدق می‌کنند:

$$N_{bs+1}(e | G_k) = \{b_s, b_{s+1}, \dots, b_{2k+1}\} \cup \{a_{s+1}, a_{s+2}, \dots, a_{2k+1}\}$$

$$N_{as}(e | G_k) = \{a_1, a_2, \dots, a_s\} \cup \{b_1, b_2, \dots, b_{s-1}\}$$

بنابراین:

$$\begin{aligned} n_{as}(e | G_k)n_{as+1}(e | G_k) &= (2s - 1)(4k - 2s + 3) \\ &= 8ks - 4s^2 + 8s - 4k - 3 \end{aligned}$$

سرانجام برای محاسبه Sz داریم:

$$\begin{aligned} Sz(G_k) &= \sum_{e=uv \in E(G_k)} n_u(e | G_k)n_v(e | G_k) \\ &= (k+1)(2k+1)^2 \\ &\quad + \sum_{s=0}^{k-1} (8k(2s+1) - 4(2s+1)^2 + 4k+1) \\ &\quad + \sum_{s=1}^k (8k(2s) - 4(2s)^2 + 8(2s) - 4k - 3) \\ &= (k+1)(2k+1)^2 + \sum_{s=1}^{2k} (8ks - 4s^2) + k(4k+1) + 8 \sum_{s=1}^k (2s) - k(4k+3) \\ &= \frac{4}{3}k^3 - 4k^2 - \frac{22}{3}k + 1. \end{aligned}$$

۶.۲ اندیس راندیک

تعریف ۱.۶.۲. برای یک گراف مولکولی، اندیس جامع راندیک ${}^{\circ}R_{\alpha}(G)$ به صورت مجموع $[d(u).d(v)]^{\alpha}$ برای تمام یال‌های uv گراف تعریف می‌شود. به عبارت دیگر:

$$R_{\alpha}(G) = \sum_{uv} [d(u).d(v)]^{\alpha}$$

به طوری که α یک عدد حقیقی دلخواه است [۲۰].

در سال ۱۹۷۵ شیمیدانی به نام میلان راندیک ${}^{\circ}R$ اندیس توپولوژیکی R ، $(R_{-1}, R_{-1/2})$ را با نام اندیس شاخه‌ای تعریف کرد که برای اندازه‌گیری شاخه‌های اتم کربن در ساختارهای هیدروکربنی مناسب بود. پس از آن در سال ۱۹۹۸، بولوباس ${}^{\circ}R$ و اردوس ${}^{\circ}R$ این اندیس را تعمیم دادند و مقدار R_{α} را جایگزین مقدار $R_{-1/2}$ کردند که در آن α یک عدد حقیقی دلخواه است. این اندیس، اندیس جامع راندیک و یا اندیس همبندی نامیده شد.

زمانی که α برابر $-1/2$ باشد به آن، اندیس راندیک استاندارد $R(G)$ می‌گویند.

$$R(G) = \sum_e \frac{1}{\sqrt{d(u).d(v)}}$$

در اصطلاح شیمی مقدار $R_1(G)$ ، دومین اندیس گروه زاگرب نامیده می‌شود که معادل است با [۲۰]:

$$R_1(G) = \sum_e d(u).d(v).$$

تعریف ۲.۶.۲. اندیس راندیک از مرتبه صفر به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۶]:

$$R_{\circ}(G) = \sum_{u \in V} \frac{1}{\sqrt{d(u)}}$$

بازه کران برای $R_{\circ}(G)$ معادل است با:

$$\frac{n}{\sqrt{\Delta}} \leq R_{\circ}(G) \leq \frac{n}{\sqrt{\delta}}$$

تساوی تنها زمانی اتفاق می‌افتد که G گراف منتظم از درجه بزرگتر از صفر باشد.

قضیه ۳.۶.۲. [۲۱] فرض کنید G یک گراف همبند و از مرتبه n باشد. اگر $0 < \alpha < \frac{1}{2}$ باشد، آنگاه:

$$R_{\alpha}(G) \leq \frac{n(n-1)^{1+2\alpha}}{2}$$

تساوی زمانی برقرار است که G یک گراف کامل باشد.

${}^{\circ}$ general Randic index

${}^{\circ}1$ Milan Randic

${}^{\circ}2$ Bollobas

${}^{\circ}3$ Erdos

برهان.

$$\begin{aligned} R_\alpha(G) &= \sum_{uv} [d(u).d(v)]^\alpha \leq \sum_{uv} \frac{d(u)^{2\alpha} + d(v)^{2\alpha}}{2} \\ &= \sum_{u \in V} \frac{d(u)^{1+2\alpha}}{2} \\ &\leq \frac{n(n-1)^{1+2\alpha}}{2}. \end{aligned}$$

□

ملاحظه ۴.۶.۲. [۲۰] فرض کنید G گرافی با n رأس باشد. آنگاه:

$$R(G) = \frac{n - n_0}{2} - \sum_{uv} w^*(e)$$

به طوری که n_0 تعداد رئوس ایزوله است و

$$w^*(e) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{d(u)}} - \frac{1}{\sqrt{d(v)}} \right)^2$$

مشخص است که اگر گراف همبند باشد $n_0 = 0$ است و لذا:

$$R(G) = \frac{n}{2} - \sum_{uv} w^*(e).$$

قضیه ۵.۶.۲. [۷] برای هر گراف ساده و همبند G با n راس داریم:

$$R(G) \geq \frac{n\delta}{\delta + \Delta}$$

برهان. بدون از دست دادن کلیت برای هر یال ij فرض می‌کنیم که $d_j \geq d_i$ و قرار می‌دهیم:

۶.۲.۲. اندیس راندیک. حال با توجه به تعریف که در ملاحظه (۴.۶.۲) آورده شده است داریم:

$$\begin{aligned}
 R(G) &= \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \left(\frac{1}{\sqrt{d_i}} - \frac{1}{\sqrt{d_j}} \right)^2 \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \left(\frac{\sqrt{d_i} - \sqrt{d_j}}{\sqrt{d_i d_j}} \right)^2 \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \frac{d_i + d_j - 2\sqrt{d_i d_j}}{d_i d_j} \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \frac{2d_i + t_{ij} - 2\sqrt{d_i(d_i + t_{ij})}}{d_i d_j} \\
 &\geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \frac{2d_i + t_{ij} - 2d_j}{d_i d_j} \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \frac{t_{ij}}{d_i d_j} \\
 &\geq \frac{n}{2} - \frac{1}{2} \sum_e \frac{\Delta - \delta}{d_i d_j} \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{\Delta - \delta}{2} \cdot \sum_e \frac{1}{\sqrt{d_i d_j} \sqrt{d_i d_j}} \\
 &\geq \frac{n}{2} - \frac{\Delta - \delta}{2\delta} \cdot \sum_e \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \\
 &= \frac{n}{2} - \frac{\Delta - \delta}{2\delta} R(G)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta + \delta}{2\delta} R(G) \geq \frac{n}{2}$$

$$R(G) \geq \frac{n\delta}{\Delta + \delta}$$

□

قضیه ۶.۶.۲. [۲۰] فرض کنید G گراف همبند و از مرتبه n باشد. آنگاه جدول زیر، کمترین و بیشترین مقدار $R_\alpha(G)$ را نشان می‌دهد.

جدول ۲-۳: کران‌هایی برای اندیس R_α

max	min	α
$\frac{n(n-1)^{1+\alpha}}{2}$	$\begin{cases} \frac{n}{2} & n = 2k \\ \frac{n-3}{2} + 2^{1+\alpha} & n = 2k+1 \end{cases}$	$[0, \infty)$
$\frac{n(n-1)^{1+\alpha}}{2}$	$\begin{cases} \min\{(n-1)^{1+\alpha}, \frac{n}{2}\} & n = 2k \\ \frac{n-3}{2} + 2^{1+\alpha} & n = 2k+1 \end{cases}$	$(-\frac{1}{2}, 0)$
$\frac{n}{2}$	$\sqrt{n-1}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{n}{2}$		$(-1, -\frac{1}{2})$
$\lceil \frac{n}{2} \rceil$	$\frac{n}{2(n-1)}$	-1
$\begin{cases} \frac{n}{2} & n = 2k \\ \frac{n-3}{2} + 2^{1+\alpha} & n = 2k+1 \end{cases}$	$\frac{n(n-1)^{1+\alpha}}{2}$	$(-\infty, -1)$

فصل ۳

گراف مولکولی فازی

در فصل گذشته گفته شد که نظریه گراف شیمی، یک شاخه از ریاضیات است که علم گراف و شیمی را با هم ترکیب می‌کند. از نظریه گراف برای مدلسازی ریاضی مولکول‌ها استفاده می‌شود و در واقع به ویژگی‌های فیزیکی این ترکیبات شیمیایی می‌پردازد. هرروزه تحقیقات گسترده‌ای هم در میدان ریاضی و هم در میدان شیمی، شروع شده و مقالات مختلفی در زمینه اندیس‌های توپولوژیکی منتشر می‌شود.

در گراف مولکولی، تمام رئوس و یال‌ها، مستقل از نوع مولکول و نوع پیوند برچسب‌گذاری می‌شوند و از این گراف برچسب‌گذاری شده، برای پیشگویی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی یک ترکیب، توصیف ساختارهای شیمیایی به صورت کمی و کیفی، ویژگی‌های ساختاری و فعالیتی که مرتبط با اندیس‌های توپولوژیکی است، استفاده می‌شود. اما از طرفی می‌دانیم خواص شیمیایی و ویژگی‌های ترکیبات، ارتباط بسیار نزدیکی با نوع مولکول و ویژگی‌های آن و پیوند بین آن‌ها دارد. در صورتی‌که در یک گراف مولکولی، اطلاعاتی درباره خواص مولکول و یا نوع پیوند و ویژگی‌های آن وجود ندارد. لذا پیش‌بینی می‌شود اگر این اطلاعات در یک گراف مولکولی لحاظ شود، نتایج حاصل از تحقیقات و محاسبات گراف مولکولی با نتایج به‌دست آمده از کار آزمایشگاه به صورت عملی و در واقعیت سازگاری بیشتری داشته باشد.

هدف ما در این فصل، تعریف یک گراف مولکولی فازی است که در آن برخی ویژگی‌های اتم‌ها و پیوند مدنظر قرار گرفته است.

از ویژگی‌های اتم که نقش بسیار مهمی در خواص ترکیبات دارد می‌توان به شعاع اتم^۱ و خاصیت الکترونگاتیوی^۲ آن اشاره کرد. طول پیوند^۳ و انرژی پیوند^۴ نیز از ویژگی‌های بسیار مهم پیوند است. ابتدا به تعریف و بررسی این اصطلاحات شیمیایی می‌پردازیم.

^۱atom radius

^۲electronegativity

^۳bond length

^۴bond energy

۱.۳ تعاریف و اصطلاحات شیمی

مطالب بخش‌های زیر از مراجع [۴] و [۱] و [۳] استخراج شده است.

۱.۱.۳ الکترونگاتیوی

تعریف ۱.۱.۳. الکترونگاتیوی میزان تمایل اتم در یک مولکول برای جذب جفت الکترون پیوندی به سوی خود است.

مقیاس نسبی الکترونگاتیوی پاولینگ، متداول‌ترین مقیاس و مبتنی بر مقادیر تجربی انرژی‌های پیوند است. در محاسبات الکترونگاتیوی تنها تفاوت الکترونگاتیوی عناصر تعیین می‌شود. برای بنا کردن یک مقیاس، به اتم فلورئور که دارای بیشترین مقدار الکترونگاتیوی است، عدد ۴ نسبت داده شده می‌شود.

روش‌های دیگری مانند الکترونگاتیویته آلد-روکر و الکترونگاتیوی مولیکن برای محاسبه الکترونگاتیوی عناصر مطرح شده است.

الکترونگاتیوی عناصر با افزایش تعداد الکترون‌های والانس و هم‌چنین کاهش اندازه اتم، افزایش می‌یابد و در هر دوره از جدول تناوبی از چپ به راست و در هر گروه از پائین به بالا افزایش می‌یابد. فلزات جاذبه کمی برای الکترون‌های والانس دارند و الکترونگاتیوی آن‌ها کم است ولی نافلزات به استثنای گازهای نجیب، جاذبه قوی برای این‌گونه الکترون‌ها دارند و الکترونگاتیوی آن‌ها زیاد است. بنابراین، مقادیر الکترونگاتیوی را می‌توان برای تعیین میزان فعالیت شیمیایی فلزات و غیرفلزات مورد استفاده قرار داد.

بیشترین الکترونگاتیوی عناصر، در گوشه بالایی سمت راست جدول تناوبی است و عناصری که کمترین الکترونگاتیوی را دارند، در گوشه پائینی سمت چپ این جدول قرار دارند.

کاربردهای الکترونگاتیوی

- برای تعیین میزان واکنش‌پذیری فلزات و غیرفلزات
- برای پیش‌بینی خصلت پیوندهای یک ترکیب
- با استفاده از مقادیر الکترونگاتیوی می‌توان نوع پیوندی را که یک ترکیب ممکن است داشته باشد، پیش‌بینی کرد. وقتی دو عنصر با اختلاف الکترونگاتیوی زیاد با یکدیگر ترکیب شوند، یک ترکیب یونی حاصل می‌شود.
- پیوند کووالانسی بین غیر فلزات وقتی تشکیل می‌شود که اختلاف الکترونگاتیوی آن‌ها خیلی زیاد نباشد. در این‌گونه موارد، اختلاف الکترونگاتیوی عناصر نشان‌دهنده میزان قطبی بودن پیوندهای

کوالانسی است. اگر اختلاف الکترونگاتیوی صفر یا خیلی کوچک باشد، می‌توان گفت که پیوند اساساً غیرقطبی است و اتم‌های مربوط، سهم مساوی یا تقریباً مساوی در الکترون‌های پیوند دارند. هر قدر اختلاف الکترونگاتیوی بیشتر باشد پیوند کوالانسی قطبی‌تر خواهد بود.

مفهوم الکترونگاتیوی گرچه مفید است ولی دقیق نیست. روشی ساده و مستقیم برای اندازه‌گیری خاصیت الکترونگاتیوی وجود ندارد و روش‌های گوناگونی برای اندازه‌گیری آن پیشنهاد شده است. در واقع چون این خاصیت علاوه بر ساختمان اتم موردنظر، به تعداد و ماهیت اتم‌های متصل به آن نیز بستگی دارد، الکترونگاتیوی یک اتم متغیر است.

۲.۱.۳ شعاع اتمی

تعریف ۲.۱.۳. شعاع یک اتم نشانگر اندازه مؤثر آن است، هنگامی که در ترکیب با اتم‌های دیگر اندازه‌گیری شده باشد.

احتمال وجود ابر الکترونی با دور شدن از هسته، هیچ‌گاه به صفر نمی‌رسد. از این رو حتی برای یک اتم منفرد نیز، نمی‌توان تعریف روشنی از شعاع اتمی ارائه داد. الکترون‌های موجود در محیط‌های شیمیایی مختلف، تحت تأثیر میدان اتم‌های مجاور قرار می‌گیرند و در نتیجه، چگونگی پخش ابرالکترونی الکترون‌ها بستگی به خصوصیات محیط شیمیایی آن‌ها خواهد داشت. در این صورت حتی اگر شعاع اتم منفرد را بتوان تعریف کرد، این شعاع در نتیجه ترکیب این اتم با اتم‌های مختلف تغییر می‌کند و در هر ترکیبی مقدار آن متفاوت خواهد بود. هر چند که در اغلب موارد میزان این تغییر از ترکیبی به ترکیب دیگر جزئی است. همان‌طور که گفتیم اگرچه شعاع یک اتم منفرد را نمی‌توان مشخص کرد، ولی فاصله بین اتم‌ها (طول پیوند) به طور تجربی قابل اندازه‌گیری است و شعاع اتم‌های تشکیل‌دهنده پیوند را می‌توان با استفاده از این طول پیوندها محاسبه کرد.

به هر حال بر حسب اینکه نوع پیوند بین دو اتم، کوالانسی، یونی یا ... باشد می‌توان شعاع‌های کوالانسی، یونی یا ... به دست آورد.

شعاع اتمی عناصری که در حالت عنصری خود به صورت مولکول دو اتمی هستند و بین دو اتم آن‌ها پیوند کوالانسی یگانه وجود دارد، می‌توان با استفاده از طول پیوند کوالانسی که به طور تجربی قابل اندازه‌گیری است، محاسبه کرد.

در جدول زیر شعاع اتمی برخی عناصر بر حسب پیکومتر pm آمده است.

جدول ۳-۱: شعاع اتمی برخی عناصر

۲۱۷	Na	۱۶۳	Li	۳۱	He	۵۳	H
۱۶۸	Mg	۱۰۹	Be	۳۸۶	Rb	۳۳۲	K
۱۳۷	Al	۸۲	B	۳۰۰	Sr	۲۵۶	Ca
۱۱۵	Si	۶۵	C	۱۷۱	In	۱۴۶	Ga
۱۰۰	P	۵۵	N	۱۵۱	Sn	۱۲۹	Ge
۸۸	S	۷۴	O	۱۳۵	Sb	۱۱۶	As
۷۸	Cl	۴۱	F	۱۲۲	Te	۱۰۵	Se
۷۱	Ar	۳۶	Ne	۱۱۲	I	۹۶	Br
				۱۰۳	Xe	۸۸	Kr

۳.۱.۳ طول پیوند

همواره در مولکول‌ها، اتم‌های تشکیل‌دهنده دارای حرکت نوسانی نسبت به یکدیگر می‌باشند. اگرچه در اثر نوسان اتم‌ها، فاصله پیوند آن‌ها همیشه متغیر است، با وجود این در همه پیوندها، در فاصله متوسطی بین هسته دو اتم تشکیل‌دهنده پیوند وجود دارد که آن را طول پیوند یا فاصله اتصال گویند.

اگر ماده‌ای را بتوان به صورت کریستال تهیه نمود، فاصله بین دو هسته اتم را به وسیله پرتو اشعه X می‌توان اندازه گرفت. در اغلب اوقات طول پیوند را به کمک طیف‌نگاری اشعه X محاسبه می‌کنند. البته روش‌های دیگری نیز برای محاسبه طول پیوند ترکیباتی که حالت کریستال ندارند، وجود دارد که مهم‌ترین آن‌ها مطالعه طیف مولکول‌ها می‌باشد. به وسیله تجزیه طیف مولکولی ممکن است محل یک هسته در داخل مولکول را نسبت به هسته دیگر به طور دقیقی تعیین نمود و بدین ترتیب تصویر روشنی از ماهیت ساختمان یک مولکول به دست آورد.

بررسی‌های دقیق نشان داده است که هرچه تفاوت الکترونگاتیوی بین دو اتم تشکیل‌دهنده یک پیوند بیشتر باشد، طول پیوند حاصل کوتاهتر و انرژی آن بیشتر خواهد بود. دلیل چنین رویدادی را، افزایش قطبیت پیوند و بار جزئی اتم‌ها و در نتیجه افزایش مقدار انرژی رزونانس یونی-کوالانسی پیوند حاصل می‌توان دانست.

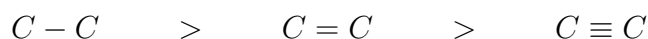
به عنوان مثال، طول شعاع کوالانسی اتم‌های کربن و فلورین برابر $۰/۷۷$ و $۰/۶۷$ آنگستروم است و انتظار می‌رود که طول پیوند $C - F$ در مولکول تترافلوریدکربن برابر $۱/۴۴$ آنگستروم باشد، در صورتی‌که از طریق تجربی طول این پیوند بسیار کوتاهتر و حدود $۱/۳۲$ آنگستروم به دست می‌آید.

خصوصیات یک پیوند به مقدار بسیار زیاد بستگی به ماهیت اتم‌های پیوند کننده دارد. با وجود این باید قبول کرد که بین دو اتم مشخص ممکن است پیوندهایی وجود داشته باشد که در ترکیبات مختلف طول آن‌ها و انرژی آن کاملاً متفاوت باشد. در واقع نوع پیوند تعیین کننده انرژی و طول آن است.

تعمیم‌های کلی زیر را می‌توان درباره طول پیوند انجام داد:

۱. طول پیوند بین اتم‌های از یک نوع، با تعداد پیوندها کاهش می‌یابد. طول پیوند کربن-کربن به

ترتیب ذیل می‌باشد:



۲. طول پیوند با افزایش ابعاد اتم‌های پیوند زیاد می‌شود. این اثر وقتی به سمت پائین جدول تناوبی می‌رویم شدیدتر است. لذا طول پیوند $C - H$ کوتاهتر از پیوند $C - F$ و آن هم کوتاهتر از $C - Cl$ است. از آن جا که طول پیوند، فاصله پیوند مرکز اتم‌های در پیوند است، این موضوع مورد انتظار است چرا که اتم‌های بزرگ‌تر باید پیوندهای بزرگ بسازند.

۳. وقتی که مقایسه‌ای در طول یک سطر جدول تناوبی انجام می‌دهیم پیوند از یک نوع مشخص (یگانه-دوگانه-سه‌گانه) بین یک اتم و یک سری از اتم‌های دیگر وقتی الکترونگاتیوی آن اتم‌ها زیاد می‌شود، کوتاهتر می‌گردد. لذا طول پیوند $C - F$ در مولکول $H_3C - F$ کوتاهتر از طول $C - C$ در مولکول $CH_3 - CH_3$ است. این امر به این خاطر اتفاق می‌افتد که اتم دارای الکترونگاتیوی بیشتر تمایل بیشتری به جذب الکترون‌های پیوند نسبت به شریک خود دارد و لذا الکترون‌های پیوند را به سمت خود می‌سازد، نسبت به اتمی که دارای الکترونگاتیوی کمتر است.

۴.۱.۳ انرژی پیوند

انرژی پیوند عبارت است از مقدار انرژی لازم برای شکستن پیوند.

در ستون‌های جدول تناوبی (مثلاً فلزات قلیایی) انرژی پیوند با افزایش عدد اتمی فلز کاهش می‌یابد و در مورد هالوژن‌ها نیز همین‌طور است. ولی در مقایسه با فلزات قلیایی، انرژی پیوند مولکول‌های دو اتمی هالوژن‌ها بیشتر است.

از نظر علمی ثبات تقریبی انرژی پیوند در ترکیبات مختلف نتیجه مهمی دارد، زیرا می‌توان یک پیوند بخصوص (مانند $C - H$) یا هر پیوند دیگر از این نوع را به وسیله انرژی پیوند مشخص کرد، که عبارت است از انرژی تقریبی لازم برای شکستن اتصال در هر ترکیبی که این اتصال در آن وجود دارد. از انرژی پیوند برای محاسبه گرمای ایجاد شده در واکنش‌های مختلف، هنگامی که به وسایل اندازه‌گیری دسترسی نباشد، استفاده می‌گردد.

در جدول زیر طول پیوند و انرژی پیوند برای برخی از پیوندها آورده شده است.

طول پیوند برحسب pm و انرژی پیوند برحسب kJ/mol می‌باشد.

جدول ۳-۲: مقادیر طول پیوند و انرژی پیوند

پیوند	طول پیوند	انرژی پیوند	پیوند	طول پیوند	انرژی پیوند
C-H	۱۰۹	۴۱۳	H-H	۷۴	۴۳۶
N-H	۱۰۱	۳۹۱	F-F	۱۴۲	۱۵۸
O-H	۹۶	۳۶۶	Cl-Cl	۱۹۹	۲۴۳
H-F	۹۲	۵۶۸	Br-Br	۲۲۸	۱۹۳
H-Cl	۱۲۷	۴۳۲	I-I	۲۶۷	۱۵۱
H-Br	۱۴۱	۳۶۶	C-N	۱۴۷	۳۰۸
H-I	۱۶۱	۲۹۸	C-O	۱۴۳	۳۶۱
C-C	۱۵۴	۳۴۸	C-S	۱۸۲	۲۷۲
C=C	۱۳۴	۶۱۴	C-F	۱۳۵	۴۸۸
O-O	۱۴۸	۱۴۵	C-Cl	۱۷۷	۷۸
O=O	۱۲۱	۴۹۸	C-Br	۱۹۴	۶۶
N-N	۱۴۱	۱۷۰	C-I	۲۱۴	۲۱۶

۲.۳ گراف مولکولی فازی

از مطالب گفته شده، چنین نتیجه‌گیری می‌شود که برای طول پیوند، انرژی پیوند و الکترونگاتیوی عناصر که کاربرد بسیاری در تعیین ویژگی‌های ترکیب دارند، عدد دقیقی وجود ندارد و مقادیر اندازه‌گیری شده کاملاً دقیق و قطعی نمی‌باشند. بنابراین از این نکته استفاده کرده و مفهوم فازی را وارد بحث می‌کنیم. برای لحاظ کردن ویژگی‌های اتم و پیوندها در یک گراف مولکولی، یک گراف مولکولی فازی تعریف می‌شود.

گراف‌های فازی را می‌توان به سه دسته تقسیم‌بندی کرد:

- گراف فازی که در آن رئوس و یال‌ها هر دو حالت فازی دارند.
- گراف فازی که در آن رئوس حالت فازی و یال‌ها قطعی هستند.
- گراف فازی که در آن رئوس قطعی و یال‌ها حالت فازی دارند.

در اینجا شش روش برای تعریف یک گراف مولکولی فازی مطرح می‌شود که در هر یک برخی از ویژگی‌های اتم و پیوند لحاظ شده است. حال به بیان این روش‌ها پرداخته و هر یک با مثالی شرح داده می‌شود.

۱.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب طول پیوند فازی

در این روش یک گراف مولکولی فازی (V, μ) : G تعریف می‌شود که رئوس قطعی هستند و یال‌ها حالت فازی دارند.

در یک گراف مولکولی که هر یال نماینده یک پیوند شیمیایی است تمامی پیوندها با طول پیوندهای متفاوت، دارای ارزش یکسان بودند. در حالی که طول پیوند یک ترکیب، عامل مهمی در تعیین ویژگی‌های یک ترکیب دارد. لذا پیش‌بینی می‌شود اگر در گراف مولکولی، طول پیوند هر پیوند لحاظ شود نتایج بهتری به دست می‌آید.

در این روش، نسبت طول پیوند هر پیوند را به ماکزیمم مقدار طول پیوند در همان ترکیب به دست می‌آوریم. روشن است که این نسبت همواره عددی در بازه $[0, 1]$ است. این عدد به عنوان درجه عضویت یال در یک گراف مولکولی فازی نسبت داده می‌شود. گراف مولکولی فازی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$G : (V, \mu)$$

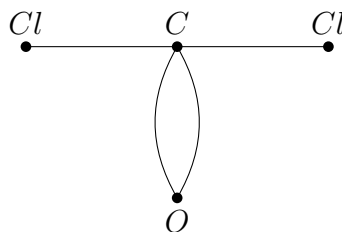
به طوری که $\mu : V \times V \rightarrow [0, 1]$

$$\mu(x, y) = \frac{l(e_i)}{\max l(e_i)}$$

$l(e_i)$ طول پیوند بین اتم x, y است.

لذا یال‌ها حالت فازی دارند و دارای یک درجه عضویت هستند که شدت عضویت آن، نسبت طول پیوند به ماکزیمم طول پیوند در همان ترکیب است. بنابراین هرچه طول پیوند یک ترکیب بیشتر باشد، شدت عضویت یال متناظر آن در گراف مولکولی فازی بیشتر و به یک نزدیک‌تر است.

مثال ۱.۲.۳. گراف مولکولی ترکیب $COCl_2$ را در نظر می‌گیریم:



شکل ۱.۳: گراف مولکولی ترکیب $COCl_2$

در این گراف رئوس و یال‌ها هر دو قطعی هستند.

در ترکیب $COCl_2$ ، دو نوع پیوند $C - Cl$ و $C = O$ وجود دارد. طول پیوند نسبت داده شده (L) به این پیوندها برابر است با:

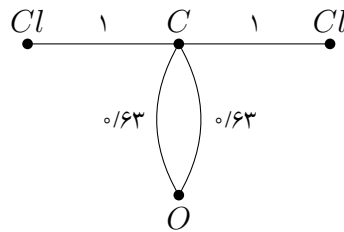
$$L(C - Cl) = 177pm, \quad L(C = O) = 112pm$$

بیشترین طول پیوند، مربوط به پیوند $C - Cl$ است. لذا نسبت طول پیوند $C = O$ را به پیوند $C - Cl$ به دست می‌آوریم و برابر درجه عضویت یال متناظر آن در گراف قرار می‌دهیم:

$$\frac{112}{177} = 0.63, \quad \frac{177}{177} = 1,$$

لذا گراف مولکولی فازی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$V = \{C, Cl, O\}, \quad E = \{(Cl - C, 1)(C - O, 0.63)(C - O, 0.63)(Cl - C, 1)\}$$



شکل ۲.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب طول پیوند

۲.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب انرژی پیوند

در این روش برای تعریف گراف مولکولی فازی، از مقدار انرژی پیوند بین اتم‌ها استفاده می‌شود. مشابه روش قبل نسبت انرژی پیوند به ماکزیمم انرژی پیوند در همان ترکیب به دست آورده و این عدد به عنوان درجه عضویت یال متناظر آن، در نظر گرفته می‌شود. لذا داریم:

$$G : (V, \mu)$$

$$\mu : V \times V \rightarrow [0, 1]$$

$$\mu(x, y) = \frac{e(e_i)}{\max e(e_i)}$$

که در آن $e(e_i)$ انرژی پیوند بین اتم‌های x, y است.

هرچه انرژی پیوند یک پیوند زیاد باشد پیوند قوی‌تری بین دو اتم آن وجود دارد. از طرفی در گراف مولکولی فازی، هرچه انرژی پیوند بیشتر باشد درجه عضویت آن به یک نزدیک‌تر است. یعنی شدت عضویت آن یال در گراف مولکولی فازی زیاد است.

مثال ۲.۲.۳. گراف مولکولی ترکیب $COCl_2$ را با استفاده از انرژی پیوند آن به صورت فازی تعریف می‌کنیم. مقادیر انرژی پیوند نسبت داده شده به پیوندهای $C - Cl$ و $C = O$ در شیمی به ترتیب 707 و 338 می‌باشد.

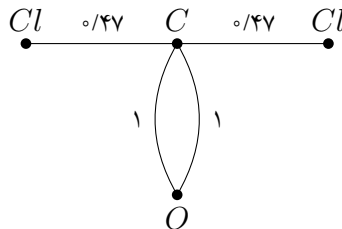
نسبت انرژی پیوند به ماکزیمم انرژی پیوند را برای هر پیوند به دست می‌آوریم:

$$\frac{338}{707} = 0.47, \quad \frac{707}{707} = 1$$

لذا درجه عضویت یال متناظر با پیوند $C = O$ برابر یک و درجه عضویت یال متناظر پیوند $C - Cl$ برابر 0.47 می‌باشد.

گراف مولکولی فازی با استفاده از این روش به شکل زیر است:

$$V = \{C, Cl, O\}, \quad E = \{(Cl - C, \circ/۴۷)(Cl - C, \circ/۴۷)(C - O, ۱)(C - O, ۱)\}$$



شکل ۳.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ برحسب انرژی پیوند

۳.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب متوسط طول پیوند

برای تعریف گراف مولکولی فازی با استفاده از طول پیوند، می‌توان از روش دیگری استفاده کرد. بدین ترتیب که در یک ترکیب مجموع تمام طول پیوندهای آن ترکیب را به دست آورده، سپس برای تعریف شدت عضویت هر یال، طول پیوند آن به مجموع طول پیوند ترکیب تقسیم می‌شود. عدد به دست آمده به عنوان شدت آن یال در نظر گرفته می‌شود. به عبارت دیگر:

$$G : (V, \mu)$$

$$\mu : V \times V \longrightarrow [0, 1]$$

$$\mu(x, y) = \frac{l(e_i)}{A}, \quad A = \sum_{i=1}^n l(e_i).$$

مثال ۳.۲.۳. ترکیب $COCl_2$ را در نظر می‌گیریم. داریم:

$$L(C - Cl) = ۱۷۷pm, \quad L(C = O) = ۱۱۲pm$$

دو پیوند $C - Cl$ و یک پیوند دوگانه $C = O$ داریم. مجموع طول پیوندهای این ترکیب برابر است با:

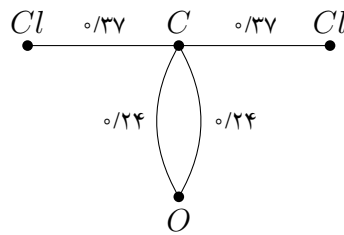
$$(۱۷۷ \times ۲) + ۱۱۲ = ۴۶۶$$

حال برای هر یال، نسبت طول پیوند را به ۴۶۶ محاسبه کرده و آن را معادل شدت عضویت یال قرار می‌دهیم.

$$\frac{۱۷۷}{۴۶۶} = \circ/۳۷, \quad \frac{۱۱۲}{۴۶۶} = \circ/۲۴$$

بنابراین:

$$V = \{C, Cl, O\}, \quad E = \{(Cl - C, \circ/۳۷)(Cl - C, \circ/۳۷)(C - O, \circ/۲۴)(C - O, \circ/۲۴)\}.$$



شکل ۴.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ برحسب متوسط طول پیوند

۴.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب متوسط انرژی پیوند

این روش فازی کردن گراف مولکولی با اندکی تغییر، مشابه روش قبل می‌باشد و تنها تفاوت آن استفاده از انرژی پیوند به جای طول پیوند است. بدین ترتیب که برای هر یال نسبت انرژی پیوند آن به مجموع انرژی پیوند آن ترکیب به دست آورده و این نسبت به عنوان شدت عضویت آن یال در نظر گرفته می‌شود.

$$G : (V, \mu)$$

$$\mu : V \times V \rightarrow [0, 1]$$

$$\mu(x, y) = \frac{e(e_i)}{B}, \quad B = \sum_{i=1}^n e(e_i).$$

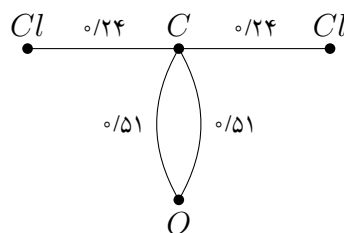
مثال ۴.۲.۳. گراف مولکولی ترکیب $COCl_2$ را با استفاده از این روش فازی می‌کنیم:

در این ترکیب دو پیوند $C - Cl$ و یک پیوند $C = O$ وجود دارد. انرژی نسبت داده شده به این پیوندها به ترتیب برابر ۷۰۷ و ۳۳۸ می‌باشد. مجموع انرژی پیوند این پیوندها را به دست می‌آوریم. داریم:

$$(338 \times 2) + 707 = 1383$$

$$\frac{707}{1383} = 0.51, \quad \frac{338}{1383} = 0.24$$

$$V = \{C, Cl, O\}, \quad E = \{(Cl - C, 0.24)(Cl - C, 0.24)(C - O, 0.51)(C - O, 0.51)\}$$



شکل ۵.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب متوسط انرژی پیوند

۵.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب الکترونگاتیوی

الکترونگاتیوی یک اتم از ویژگی‌های اتم است که از آن برای پیش‌بینی نوع پیوند استفاده می‌شود و در واقع اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم در قطبیت پیوند آن‌ها مؤثر است. در این روش مقدار الکترونگاتیوی عناصر را در گراف مولکولی لحاظ شده و یک گراف مولکولی فازی تعریف می‌شود. از آن‌جا که الکترونگاتیوی از ویژگی‌های اتم است، لذا گراف مولکولی فازی تعریف شده در این روش یک گراف فازی است که رئوس آن حالت فازی و یال‌ها حالت قطعی دارند.

طبق جدول الکترونگاتیوی، بیشترین مقدار الکترونگاتیوی مربوط به اتم فلوئور است که با توجه به مقیاس پائولینگ برابر ۳/۹۸ می‌باشد. حال در هر ترکیب، میزان الکترونگاتیوی هر اتم را به عدد ۳/۹۸ تقسیم کرده و این نسبت به عنوان درجه عضویت آن رأس قرار داده می‌شود. گراف مولکولی فازی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$G : (\sigma, E)$$

$$\sigma : V \rightarrow [0, 1], \quad E : V \times V \rightarrow \{0, 1\}$$

$$\sigma(x) = \frac{e_x}{3/98}$$

$e(x)$ الکترونگاتیوی اتم x است.

مثال ۵.۲.۳. ترکیب $COCl_2$ را در نظر می‌گیریم. با استفاده از جدول الکترونگاتیوی برای اتم‌های این ترکیب داریم:

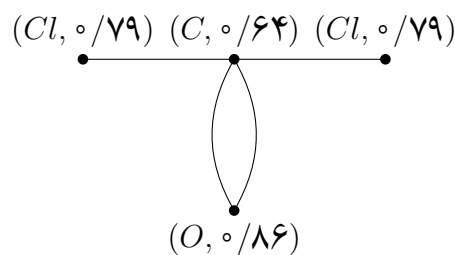
$$e(Cl) = 3/16, \quad e(C) = 2/55, \quad e(O) = 3/44$$

حال برای تعیین درجه عضویت هر اتم، این اعداد را به ۳/۹۸ تقسیم می‌کنیم.

$$\frac{3/16}{3/98} = 0/79, \quad \frac{2/55}{3/98} = 0/64, \quad \frac{3/44}{3/98} = 0/86$$

لذا گراف مولکولی فازی که در آن رئوس حالت فازی دارند، به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$V = \{(Cl, 0/79), (C, 0/64), (O, 0/86)\}, \quad E = \{Cl - C, Cl - C, C - O, C - O\}$$



شکل ۶.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب الکترونگاتیوی

۶.۲.۳ گراف مولکولی فازی بر حسب قطبیت پیوند

در این روش فازی سازی مشابه روش قبل از الکترونگاتیوی عناصر استفاده می‌شود. می‌دانیم که اختلاف الکترونگاتیوی دو اتم برابر قطبیت پیوند است. بیشترین و کم‌ترین مقدار الکترونگاتیوی مربوط به دو اتم فلور و فرانسیم به ترتیب با مقدار $3/98$ و $0/7$ می‌باشد. بنابراین قطبیت دو اتم حداکثر می‌تواند برابر $3/28$ باشد. حال اگر برای هر پیوند میزان قطبیت اتم را به $3/28$ تقسیم کنیم عددی در بازه $[0, 1]$ به دست می‌آید که این عدد به عنوان درجه عضویت هر یال به آن نسبت داده می‌شود.

$$G : (V, \mu)$$

$$\mu : V \times V \rightarrow [0, 1]$$

$$\mu(x, y) = \left| \frac{e(x) - e(y)}{3/28} \right|$$

مثال ۶.۲.۳. ترکیب $COCl_2$ را در نظر می‌گیریم.

با استفاده از جدول الکترونگاتیوی برای اتم‌های این ترکیب داریم:

$$e(Cl) = 3/16, \quad e(C) = 2/55, \quad e(O) = 3/44$$

قطبیت پیوندهای این ترکیب را به دست می‌آوریم.

برای پیوند کلر-کربن داریم:

$$\left| 3/16 - 2/55 \right| = 0/61$$

حال برای تعریف درجه عضویت هر یال قطبیت پیوند را به عدد $3/28$ تقسیم می‌کنیم.

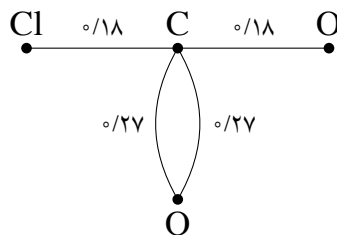
$$\frac{0/61}{3/28} = 0/18$$

به همین ترتیب برای پیوند کربن-اکسیژن داریم:

$$\left| 2/55 - 3/44 \right| = 0/89$$

$$\frac{0/89}{3/28} = 0/27$$

$$V = \{C, Cl, O\}, \quad E = \{(Cl-C, 0/18)(Cl-C, 0/18)(C-O, 0/27)(C-O, 0/27)\}$$



شکل ۷.۳: گراف مولکولی فازی ترکیب $COCl_2$ بر حسب قطبیت پیوند

فصل ۴

اندیس‌های توپولوژیکی فازی

اندیس‌های توپولوژیکی، توصیف‌کننده ویژگی‌های فیزیکی، شیمیایی و بیان‌کننده برخی فعالیت‌های زیستی مولکول است. لذا اگر اندیس‌های توپولوژیکی مبتنی بر برخی ویژگی‌های پیوند یا اتم‌ها باشد می‌تواند توصیف بهتری از ویژگی‌های ترکیب داشته باشد.

ویژگی‌های پیوند می‌تواند شامل نوع پیوند، انرژی پیوند و طول پیوند باشد. هم‌چنین از ویژگی‌های اتم می‌توان به شعاع اتمی و الکترونگاتیوی آن اشاره کرد. اما چنان‌چه در فصل قبل گفته شد اعداد دقیقی برای این ویژگی‌ها وجود ندارد، زیرا این ویژگی‌ها به عوامل بسیاری وابسته‌اند. لذا اعداد نسبت داده شده به آن‌ها همواره نادقیق می‌باشند.

از اندیس‌های توپولوژیکی می‌توان به اندیس وینر، گاتمن و PI اشاره کرد. در این فصل اندیس‌های توپولوژیکی فازی مبتنی بر گراف مولکولی فازی تعریف می‌گردد [۵].

۱.۴ اندیس وینر فازی

از اندیس‌های توپولوژیکی شیمی، اندیس وینر می‌باشد که تعریف آن در حالت قطعی به صورت زیر است:

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

این اندیس بر مبنای فاصله میان تمام جفت رئوس است و در گراف مولکولی مجموع فاصله بین اتم‌ها می‌باشد. این فاصله ارتباطی با نوع پیوند بین اتم‌ها ندارد و به تمامی پیوندها اعم از یونی، کوالانسی، هیدروژنی و با هر مقدار طول پیوند، نسبت یک داده و فاصله بین آن‌ها را حساب می‌کند. از این توصیف‌گر عددی برای پیش‌بینی نقطه جوش، مقدار مولار، گرمای ایزومری و ... استفاده می‌کند.

در فصل گذشته گفته شد که اگر از گراف مولکولی فازی استفاده کنیم، پیش‌بینی با استفاده از تئوری گراف به واقعیت نزدیک‌تر خواهد بود. بر همین اساس روش‌های مختلفی برای تعریف گراف مولکولی

فازی بیان شد. در چهار روش اول یک گراف مولکولی فازی تعریف شد که رئوس حالت قطعی و یال‌ها حالت فازی داشتند و برای هر یال یک درجه عضویت نسبت داده شد. در روش پنجم گراف مولکولی فازی تعریف شد که رئوس حالت فازی و یال‌ها حالت قطعی داشتند. چون درجه رئوس در محاسبه اندیس وینر نقشی ندارد و فقط با فاصله رئوس سروکار دارد لذا اندیس وینر فازی که از گراف مولکولی فازی به دست می‌آید با حالت قطعی برابر است.

تعریف ۱.۱.۴. فرض کنید P_{uv} مسیر بین دو رأس u و v باشد. مینیمم درجه تعلق یال‌های مسیر P_{uv} را شدت آن مسیر نامیده و به صورت زیر نمایش می‌دهیم:

$$\mu_{uv} = \wedge \{ \mu(u, v) \mid (u, v) \in P_{uv} \}$$

تعریف ۲.۱.۴. ماتریس مسافت فازی از گراف مولکولی فازی \tilde{G} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{d}_{uv} = \begin{cases} (l_{uv}, \mu_{u,v}), & u \neq v \\ \circ, & u = v \end{cases}$$

که در آن l_{uv} طول کوتاهترین مسیر بین رأس u و v و $\mu(u, v)$ شدت مسیر u, v می‌باشد. به عبارت دیگر:

$$\tilde{D} = [\tilde{d}_{uv}] = [(l_{uv}, \mu_{uv})] \quad uv \in P_{uv}$$

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \circ & \dots & \tilde{d}_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{d}_{n1} & \dots & \circ \end{bmatrix}$$

تعریف ۳.۱.۴. فرض کنید G یک گراف مولکولی فازی باشد. اندیس وینر فازی از گراف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tilde{W}(G) = \sum_{u,v \in V(G)} \tilde{d}(u, v).$$

که در آن $\tilde{d}(u, v)$ ماتریس مسافت فازی از گراف مولکولی فازی می‌باشد.

برای محاسبه اندیس وینر فازی، باید ماتریس مسافت از گراف مولکولی فازی را به دست آورد. هر درایه از ماتریس مسافت فاصله بین دو رأس در گراف است. در حالت فازی، فاصله بین دو رأس را برابر مجموع درجه عضویت یال‌ها در آن مسیر قرار داده، سپس اعضای قطر بالا مثلثی ماتریس مسافت فازی را با هم جمع کرده و اندیس وینر فازی محاسبه می‌شود.

مثال ۴.۱.۴. اندیس وینر فازی ترکیب CO_2 را با استفاده از گراف‌های مولکولی فازی تعریف شده فصل قبل به دست می‌آوریم:

گراف ساختاری ترکیب CO_2 و ماتریس مسافت این گراف در حالت قطعی برابر است با:



شکل ۱.۴: گراف مولکولی ترکیب CO_2

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$W(G) = 1 + 2 + 1 \implies W(G) = 4.$$

حال اندیس وینر فازی را با استفاده از روش‌های گفته شده بررسی می‌کنیم:

روش‌های محاسبه اندیس وینر فازی

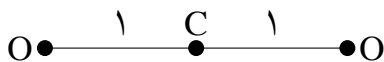
فازی‌سازی بر حسب طول پیوند با استفاده از جدول طول پیوند داریم:

$$(C - O) = 143 pm$$

برای تعریف درجه عضویت باید نسبت طول پیوند را به ماکزیمم طول پیوند به دست آوریم.

$$\frac{143}{143} = 1$$

گراف فازی در این حالت به صورت زیر می‌باشد:



شکل ۲.۴: گراف مولکولی فازی CO_2

لذا ماتریس مسافت فازی به صورت زیر است:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{W}(G) = 1 + 2 + 1 \implies W(G) = 4$$

فازی‌سازی بر حسب انرژی پیوند مقدار انرژی پیوند برای پیوند $C - O$ برابر $360 kJ/mol$ است.

چون یک نوع پیوند داریم ماکزیمم انرژی پیوند با انرژی پیوند برابر است و لذا درجه عضویت هر یال برابر یک است. گراف فازی در این حالت در شکل (۳.۴) نشان داده شده است.



شکل ۳.۴: گراف مولکولی فازی CO_2

ماتریس مسافت فازی به صورت زیر است:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{W}(G) = 1 + 2 + 1 \implies W(G) = 4.$$

فازی‌سازی بر حسب متوسط طول پیوند مجموع طول پیوند ترکیب CO_2 برابر است با:

$$143 + 143 = 286$$

درجه عضویت یال‌ها در این روش به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\mu = \frac{143}{286} = 0.5$$

گراف فازی در این حالت به صورت زیر می‌باشد:



شکل ۴.۴: گراف مولکولی فازی CO_2

لذا ماتریس مسافت فازی به صورت زیر است:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0.5 & 1 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 1 & 0.5 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{W}(G) = 0.5 + 1 + 0.5 \implies W(G) = 2.$$

فازی‌سازی بر حسب متوسط انرژی پیوند برای فازی‌سازی با این روش باید نسبت انرژی پیوند

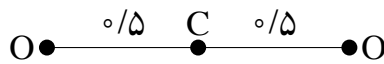
به مجموع انرژی پیوند ترکیب محاسبه می‌شود.

$$360 + 360 = 720 \implies \mu = \frac{360}{720} = 0.5$$

گراف فازی در این حالت به صورت زیر می‌باشد:

لذا ماتریس مسافت فازی به صورت زیر است:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0.5 & 1 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 1 & 0.5 & 0 \end{bmatrix}$$



شکل ۵.۴: گراف مولکولی فازی CO_2

$$\tilde{W}(G) = \circ/5 + 1 + \circ/5 \implies W(G) = 2$$

فازی سازی بر مبنای الکترونگاتیوی این روش فازی سازی گراف، یک گراف مولکولی فازی تعریف می‌کند که در آن رئوس حالت فازی دارند و یال‌ها قطعی هستند. چون در محاسبه اندیس وینر رئوس نقشی ندارند لذا اندیس وینر فازی با اندیس وینر قطعی برابر است.

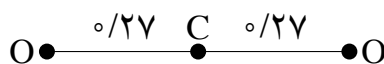
فازی سازی بر حسب قطبیت پیوند الکترونگاتیوی عناصر کربن و اکسیژن برابر $3/44$ و $2/55$ است. لذا قطبیت پیوند برابر است با:

$$| 3/44 - 2/55 | = \circ/89$$

برای تعریف درجه عضویت هر یال باید نسبت قطبیت هر پیوند به عدد $3/28$ را به دست می‌آوریم:

$$\frac{\circ/89}{3/28} = \circ/27$$

لذا درجه عضویت هر یال برابر $\circ/27$ می‌باشد. بنابراین گراف مولکولی فازی و ماتریس مسافت فازی به صورت زیر است:

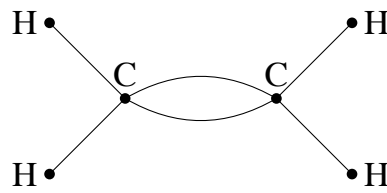


شکل ۶.۴: گراف مولکولی فازی CO_2

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \circ & \circ/27 & \circ/54 \\ \circ/27 & \circ & \circ/27 \\ \circ/54 & \circ/27 & \circ \end{bmatrix}$$

$$\tilde{W}(G) = \circ/27 + \circ/54 + \circ/27 \implies \tilde{W}(G) = 1/\circ 8$$

مثال ۵.۱.۴. اندیس وینر فازی را برای ترکیب C_2H_4 بررسی می‌کنیم. گراف ساختاری این ترکیب به شکل زیر است:



شکل ۷.۴: گراف مولکولی C_2H_6

ماتریس مسافت این گراف برابر است با:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 & 2 & 3 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 0 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

اندیس وینر مجموع قطر بالامثلثی ماتریس مسافت است. بنابراین:

$$W(G) = 2 + 1 + 2 + 3 + 3 + 1 + 2 + 3 + 3 + 1 + 2 + 2 + 1 + 1 + 2$$

$$W(G) = 29$$

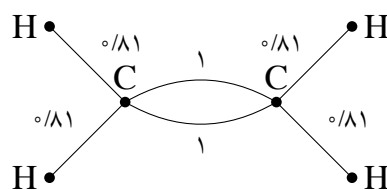
حال با استفاده از روش‌های فازی‌سازی یک گراف مولکولی فازی تعریف کرده و اندیس وینر فازی را محاسبه می‌کنیم:

فازی‌سازی بر حسب طول پیوند اگر از روش اول برای فازی‌سازی گراف استفاده کنیم، گراف مولکولی فازی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$L(C-H) = 109, \quad L(C=C) = 134$$

$$\mu_{(C-H)} = \frac{109}{134} \Rightarrow \mu_{(C-H)} = 0/81$$

$$\mu_{(C=C)} = \frac{134}{134} \Rightarrow \mu_{(C=C)} = 1$$



شکل ۸.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_6

ماتریس مسافت فازی با این روش برابر است با:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1/62 & 0/81 & 1/81 & 2/62 & 2/62 \\ 1/62 & 0 & 0/81 & 1/81 & 2/62 & 2/62 \\ 0/81 & 0/81 & 0 & 1 & 1/81 & 1/81 \\ 1/81 & 1/81 & 1 & 0 & 0/81 & 0/81 \\ 2/62 & 2/62 & 1/81 & 0/81 & 0 & 1/62 \\ 2/62 & 2/62 & 1/81 & 0/81 & 1/62 & 0 \end{bmatrix}$$

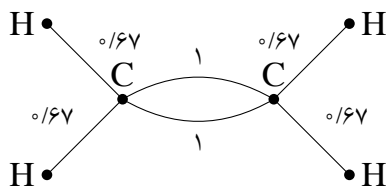
حال اگر اعضای قطر بالا مثلثی ماتریس مسافت را با هم جمع کنیم اندیس وینر به دست می‌آید که برابر با $25/20$ است.

فازی‌سازی بر حسب انرژی پیوند ماتریس مسافت فازی در این روش به صورت زیر است:

$$e(C-H) = 413, \quad e(C=C) = 614$$

$$\mu_{(C-H)} = \frac{413}{614} \Rightarrow \mu_{(C-H)} = 0/67$$

$$\mu_{(C=C)} = \frac{614}{614} \Rightarrow \mu_{(C=C)} = 1$$



شکل ۹.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4

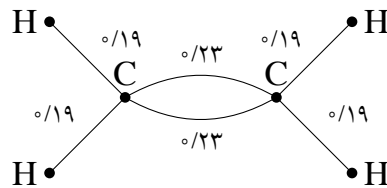
$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1/34 & 0/67 & 1/67 & 2/34 & 2/34 \\ 1/34 & 0 & 0/67 & 1/67 & 2/34 & 2/34 \\ 0/67 & 0/67 & 0 & 1 & 1/67 & 1/67 \\ 1/67 & 1/67 & 1 & 0 & 0/67 & 0/67 \\ 2/34 & 2/34 & 1/67 & 0/67 & 0 & 1/34 \\ 2/34 & 2/34 & 1/67 & 0/67 & 1/34 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \tilde{W}(G) = 22/4$$

فازی‌سازی بر حسب متوسط طول پیوند گراف فازی مولکولی با استفاده از این روش به صورت زیر است:

$$(4 \times 109) + 134 = 570 \implies \mu_{(C-H)} = \frac{109}{570} \quad \mu_{(C=C)} = \frac{134}{570}$$

$$\mu_{(C-H)} = 0/19, \quad \mu_{(C=C)} = 0/23$$



شکل ۱۰.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0/38 & 0/19 & 0/42 & 0/61 & 0/61 \\ 0/38 & 0 & 0/19 & 0/42 & 0/61 & 0/61 \\ 0/19 & 0/19 & 0 & 0/23 & 0/42 & 0/42 \\ 0/42 & 0/42 & 0/23 & 0 & 0/19 & 0/19 \\ 0/61 & 0/61 & 0/42 & 0/19 & 0 & 0/38 \\ 0/61 & 0/61 & 0/42 & 0/19 & 0/38 & 0 \end{bmatrix}$$

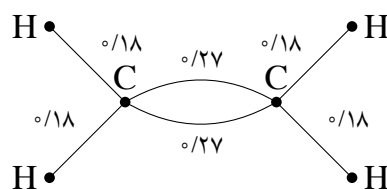
$$\implies \tilde{W}(G) = 5/87$$

فازی‌سازی بر حسب متوسط انرژی پیوند با استفاده از این روش فازی‌سازی گراف داریم:

$$(413 \times 4) + 614 = 2266$$

$$\mu_{(C-H)} = \frac{413}{2266}, \quad \mu_{(C=C)} = \frac{614}{2266}$$

$$\mu_{(C-H)} = 0/18, \quad \mu_{(C=C)} = 0/27$$



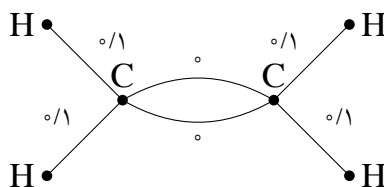
شکل ۱۱.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0/36 & 0/18 & 0/45 & 0/63 & 0/63 \\ 0/36 & 0 & 0/18 & 0/45 & 0/63 & 0/63 \\ 0/18 & 0/18 & 0 & 0/27 & 0/45 & 0/45 \\ 0/45 & 0/45 & 0/27 & 0 & 0/18 & 0/18 \\ 0/63 & 0/63 & 0/45 & 0/18 & 0 & 0/36 \\ 0/63 & 0/63 & 0/45 & 0/18 & 0/36 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\implies \tilde{W}(G) = 6/03$$

گراف فازی بر حسب قطبیت پیوند در این روش فازی سازی که از قطبیت پیوند استفاده می کند، داریم:

$$e(C) = 2/55, \quad e(H) = 2/20 \implies \mu_{(C-H)} = \frac{|2/55 - 2/20|}{3/28} \implies \mu_{(C-H)} = 0/10$$



شکل ۱۲.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_6

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0/1 & 0/2 & 0/1 & 0/2 & 0/2 \\ 0/1 & 0 & 0/1 & 0 & 0/1 & 0/1 \\ 0/2 & 0/1 & 0 & 0/1 & 0/2 & 0/2 \\ 0/1 & 0 & 0/1 & 0 & 0/1 & 0/1 \\ 0/2 & 0/1 & 0/2 & 0/1 & 0 & 0/1 \\ 0/2 & 0/1 & 0/2 & 0/1 & 0/2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\implies \tilde{W}(G) = 2.$$

با بررسی مثال های بیشتر در می یابیم که بهترین روش برای محاسبه اندیس وینر فازی، استفاده از گراف مولکولی فازی روش اول می باشد. حال این اندیس را با استفاده از اعداد مثلثی فازی محاسبه می کنیم:

۱.۱.۴ اندیس وینر فازی با استفاده از اعداد مثلثی

در فصل قبل به این نکته اشاره شد که طول پیوند نسبت داده شده به پیوندها به صورت تقریبی و دارای ابهام است و می توان آن را به صورت یک عدد فازی تعریف کرد. در اینجا می خواهیم طول پیوند یک

ترکیب را به صورت یک عدد فازی مثلثی تعریف کنیم.

یکی از روش‌های معمول برای محاسبه طول پیوند، اندازه‌گیری مجموع شعاع اتمی دو سر پیوند است. اما با مطالعات بیشتر می‌توان گفت که به طور کمی، انحراف از جمع بین شعاع‌های اتمی و طول پیوند وجود دارد که ناشی از نوع پیوند بین اتم‌هاست. برای تعریف عدد فازی مثلثی طول پیوند، از این مقدار انحراف استفاده می‌شود.

طول پیوند نسبت داده شده با استفاده از محاسبات شیمی که به صورت تقریبی است به عنوان مرکز مثلث در نظر گرفته و قرار می‌دهیم:

$$|L - R| = \alpha$$

به طوری که L طول پیوند دو اتم و R مجموع شعاع اتمی دو اتم که با هم پیوند دارند می‌باشد و α مقدار انحراف این دو عدد است.

عدد فازی مثلثی طول پیوند را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$(a_1, a_2, a_3) = (L - \alpha, L, L + \alpha).$$

این عدد فازی مثلثی را که به صورت متقارن می‌باشد، به عنوان طول پیوند دو اتم در نظر گرفته و برای سادگی محاسبات α -برش آن را محاسبه و با A_α نشان می‌دهیم.

حال برای تعریف گراف مولکولی فازی از روش اول استفاده می‌کنیم. به عبارت دیگر یک گراف مولکولی فازی که در آن یال‌ها حالت فازی و رئوس قطعی هستند، تعریف کرده که درجه عضویت هر یال را از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\mu_i = \frac{A_{i\alpha}}{\max A_{i\alpha}}.$$

اندیس وینر بر مبنای فاصله بین اتم‌ها می‌باشد و در واقع مجموع درایه‌های قطر بالا مثلثی ماتریس مسافت است. حال برای محاسبه اندیس وینر فازی از ماتریس مسافت فازی استفاده می‌کنیم و فاصله دو رأس را برابر مجموع درجه عضویت یال‌ها در آن مسیر در نظر می‌گیریم.

مثال ۶.۱۰۴. اندیس وینر فازی را برای ترکیب $CHCl_3$ به دست می‌آوریم. اطلاعات زیر درباره شعاع اتمی R اتم‌های ترکیب در دسترس است:

$$R(Cl) = 78, \quad R(C) = 65, \quad R(H) = 53.$$

هم‌چنین برای طول پیوند مقادیر زیر داده شده‌اند:

$$L(C - Cl) = 177, \quad L(C - H) = 109$$

حال برای تعریف عدد فازی مثلثی طول پیوند $C - Cl$ به صورت زیر عمل می‌کنیم. طول پیوند نسبت داده شده به پیوند در شیمی را به عنوان مرکز مثلث در نظر گرفته و برای دو کران بالا و پائین مثلث داریم:

$$R = 78 + 65$$

$$\alpha = |R - L| \Rightarrow \alpha = |177 - 143| \quad \alpha = 34$$

$$L - \alpha = 177 - 34 \Rightarrow a_1 := 143$$

$$L + \alpha = 177 + 34 \Rightarrow a_3 := 211$$

طول پیوند $C - Cl$ بصورت عدد فازی مثلثی برابر است با:

$$L(C - Cl) = (143, 177, 211)$$

به همین ترتیب برای پیوند $C - H$ داریم:

$$R = 65 + 53$$

$$\alpha = |R - L| \Rightarrow \alpha = |118 - 109| = 9$$

$$L - \alpha = 100 \Rightarrow a_1 := 100$$

$$L + \alpha = 118 \Rightarrow a_3 := 118$$

طول پیوند $C - H$ بصورت عدد فازی مثلثی برابر است با:

$$L(C - H) = (100, 109, 118)$$

برای سادگی محاسبات α -برش اعداد فازی مثلثی را به دست آورده و با استفاده از روش اول، گراف مولکولی فازی را تعریف می‌کنیم.

برای پیوند $C - Cl$ داریم: $A_\alpha = [34\alpha + 143, -34\alpha + 211]$

برای پیوند $C - H$ داریم: $B_\alpha = [9\alpha + 100, -9\alpha + 118]$

حال برای فازی‌سازی گراف باید نسبت طول هر پیوند را به بیشترین طول پیوند، که در این ترکیب

پیوند $C - Cl$ است، به دست آورد.

$$\frac{A_\alpha}{A_\alpha} = \left[\frac{34\alpha + 143}{-34\alpha + 143}, \frac{-34\alpha + 211}{34\alpha + 211} \right]$$

$$\alpha = 0 \Rightarrow \frac{A_\alpha}{A_\alpha} = [0/67, 1/47]$$

$$\alpha = 1 \Rightarrow \frac{A_\alpha}{A_\alpha} = 1$$

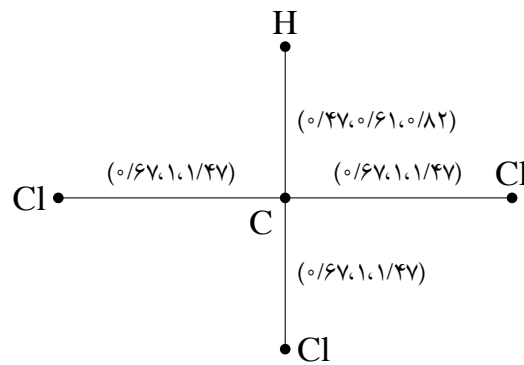
$$\Rightarrow \frac{A_\alpha}{A_\alpha} = [0/67, 1, 1/47]$$

$$\frac{B_\alpha}{A_\alpha} = \left[\frac{9\alpha + 100}{-34\alpha + 211}, \frac{-9\alpha + 118}{34\alpha + 143} \right]$$

$$\alpha = 0 \Rightarrow \frac{B_\alpha}{A_\alpha} = [0/47, 0/82]$$

$$\alpha = 1 \Rightarrow \frac{B_\alpha}{A_\alpha} = 0/61$$

$$\Rightarrow \frac{B_\alpha}{A_\alpha} = [0/47, 0/61, 0/82]$$



شکل ۱۳.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب $CHCl_3$

بنابراین گراف مولکولی فازی به شکل زیر است:
ماتریس مسافت فازی برابر است با:

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \circ & (1/14, 1/61, 2/29) & (0/67, 1, 1/47) & (1/34, 2, 2/94) & (1/34, 2, 2/94) \\ (1/14, 1/61, 2/29) & \circ & (0/47, 0/61, 0/82) & (1/14, 1/61, 2/29) & (1/14, 1/61, 2/29) \\ (0/67, 1, 1/47) & (0/47, 0/61, 0/82) & \circ & (0/67, 1, 1/47) & (0/67, 1, 1/47) \\ (1/34, 2, 2/94) & (1/14, 1/61, 2/29) & (0/67, 1, 1/47) & \circ & (1/34, 2, 2/94) \\ (1/34, 2, 2/94) & (1/14, 1/61, 2/29) & (0/67, 1, 1/47) & (1/34, 2, 2/94) & \circ \end{bmatrix}$$

در نتیجه اندیس وینر فازی برابر است با:

$$\Rightarrow \tilde{W}(G) = (9/92, 14/44, 20/92).$$

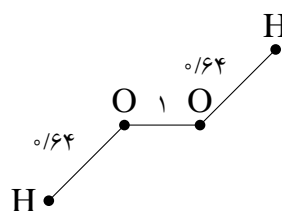
توجه به نکات زیر ضروری است:

- قضایای گفته شده در حالت قطعی برای این اندیس، با نتایج آن در حالت فازی متفاوت است. به طور مثال در حالت قطعی داریم:

$$W(K_{1,n-1}) \leq W(T) \leq W(P_n).$$

با یک مثال نقض نشان می‌دهیم که این قضیه در حالت فازی برقرار نیست.

مثال ۷.۱.۴. گراف مولکولی فازی ترکیب H_2O_2 به صورت یک مسیر P_4 می‌باشد. اندیس وینر فازی این ترکیب برابر است با:

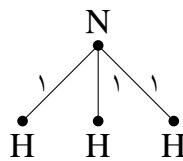


شکل ۱۴.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب H_2O_2

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0/64 & 1/64 & 2/29 \\ 0/64 & 0 & 1 & 1/64 \\ 1/64 & 1 & 0 & 0/64 \\ 2/29 & 1/64 & 0/64 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\implies \tilde{W}(P_n) = 7/8$$

گراف مولکولی فازی ترکیب NH_3 یک درخت به شکل مقابل است:



شکل ۱۵.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب NH_3

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\implies \tilde{W}(T) = 9$$

بنابراین اندیس وینر P_4 از اندیس وینر فازی T با چهار رأس کمتر است. یعنی:

$$\tilde{W}(T) \not\leq \tilde{W}(P_4).$$

- برای ترکیباتی که فقط از یک نوع پیوند تشکیل می‌شوند، مانند آلکان‌ها، اندیس وینر فازی با حالت قطعی برابر است.

قضیه ۸.۱.۴. برای هر گراف G داریم:

$$\min\left\{\frac{\text{طول پیوند}}{\text{بیشترین طول پیوند}}\right\} \times \frac{n(n-1)}{2} \leq \tilde{W}(G) \leq W(G)$$

که در آن $\tilde{W}(G)$ اندیس وینر فازی و $W(G)$ اندیس وینر در حالت قطعی است.

برهان. می‌دانیم اندیس وینر برابر مجموع اعضای قطر بالامثلثی از ماتریس مسافت است و تعداد اعضای قطر بالای یک ماتریس برابر با $\frac{n(n-1)}{2}$ است.

حال برای هر عضو، شدت عضویت آن برابر با $\frac{\text{طول پیوند}}{\text{طول پیوند max}}$ است. بنابراین هر عضو ماتریس، از کمترین مقدار این اعداد بیشتر است. لذا قسمت اول نامساوی اثبات می‌شود.

می‌دانیم ماکزیمم شدت عضویت هر یال یک می‌باشد. در حالت قطعی شدت عضویت تمام یال‌ها یک می‌باشد. این بدین معنی است که اندیس وینر در حالت قطعی یک کران بالا برای حالت فازی محسوب می‌شود. □

۲.۴ اندیس گاتمن فازی

برای محاسبه اندیس گاتمن فازی، باید یک گراف مولکولی فازی تعریف کرد. چون در محاسبه اندیس گاتمن علاوه بر فاصله بین رئوس، با درجه رئوس نیز سروکار داریم لذا پیشنهاد می‌گردد یک گراف مولکولی فازی بر مبنای طول پیوند تعریف کرده و سپس برای محاسبه درجه هر رأس از تعریف فازی آن استفاده کنیم.

تعریف ۱.۲.۴. فرض کنید $G : (\sigma, \mu)$ یک گراف فازی باشد. درجه رأس u در گراف فازی به صورت زیر تعریف می‌شود:

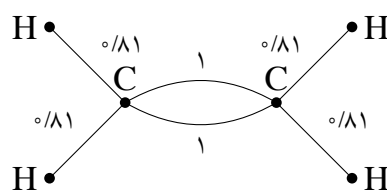
$$d_G(u) = \sum_{u \neq v, v \in V} \mu(u, v).$$

تعریف ۲.۲.۴. اندیس گاتمن در حالت فازی با فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$\tilde{Gut}(G) = \sum_{u, v \in G} \tilde{deg}(u) \cdot \tilde{deg}(v) \cdot d(u, v).$$

حال به ارائه یک مثال می‌پردازیم:

مثال ۳.۲.۴. گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4 به صورت زیر است:



شکل ۱۶.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب C_2H_4

ماتریس مسافت این گراف برابر است با:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 & 2 & 3 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 0 & 2 \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

حال در محاسبه اندیس گاتمن فازی از درجه رئوس فازی استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \tilde{Gut}(G) &= \sum_{u,v \in G} \tilde{deg}(u) \cdot \tilde{deg}(v) \cdot d(u,v) \\ &= 4 \times [(3 \times 0/81 \times 0/81)] + 2 \times [(0/81 \times 0/81 \times 2)] + 4 \times [(2 \times 0/81 \times 3/62)] \\ &\quad + 2 \times [(1 \times 3/62 \times 3/62)] + 4 \times [(1 \times 0/81 \times 3/62)] \\ &= 71/87 \end{aligned}$$

۳.۴ اندیس Sz فازی

اندیس Sz در حالت فازی از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\tilde{Sz}(G) = \sum_{e \in E} \tilde{n}_u(e) \tilde{n}_v(e)$$

به طوری که:

$$\tilde{n}_u(e) = | \tilde{N}_u(e) | \quad \tilde{n}_v(e) = | \tilde{N}_v(e) |$$

$$\tilde{N}_u(e) = \{x \in V : \tilde{d}(u,x) \leq \tilde{d}(v,x)\}$$

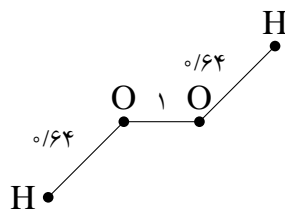
$$\tilde{N}_v(e) = \{x \in V : \tilde{d}(v,x) \leq \tilde{d}(u,x)\}.$$

هم چنین نشان داده شد که این اندیس رابطه بسیار نزدیکی با اندیس وینر دارد، به طوری که برای گراف‌های غیردوری و درخت‌ها این دو اندیس باهم معادلند.

برای محاسبه اندیس وینر فازی گفته شد که استفاده از روش اول فازی‌سازی نتیجه بهتری می‌دهد. به دلیل ارتباط نزدیک این دو اندیس، برای فازی‌سازی اندیس Sz نیز از روش اول تعریف گراف فازی استفاده می‌کنیم.

حال در محاسبه $N_v(e)$ و $N_u(e)$ برای مقایسه مسافت بین رئوس، از مسافت فازی استفاده می‌کنیم و مقادیر $n_v(e)$ و $n_u(e)$ را به دست می‌آوریم.

مثال ۱.۳.۴. گراف فازی ترکیب H_2O_2 را در نظر می‌گیریم:



شکل ۱۷.۴: گراف مولکولی فازی ترکیب H_2O_2

اندیس Sz فازی برای گراف برابر است با:

$$\tilde{Sz}(G) = \sum_{e \in E} \tilde{n}_u(e) \tilde{n}_v(e) = (1 \times 3) + (2 \times 2) + (3 \times 1) = 10$$

۴.۴ نتیجه‌گیری و چشم‌انداز

مدل‌بندی طرح گراف مولکولی فازی از ویژگی‌های عمده این پایان‌نامه می‌باشد. طرح اندیس‌های توپولوژیکی فازی مانند اندیس وینر فازی، اندیس گاتمن فازی، اندیس PI و اندیس Sz از جمله نوآوری‌های این پایان‌نامه می‌باشد. به عنوان چشم‌انداز آینده می‌توان به اخذ نتایج آزمایشگاهی و مقایسه آن با مدل‌های ارائه شده اشاره کرد.

مراجع

- [۱] دکتر حسین آقابزرگ و دکتر حمید آقابزرگ. مبانی شیمی معدنی. انتشارات جهاد دانشگاهی تربیت معلم. ۱۳۸۴.
- [۲] سکینه شاکری کارد. بررسی اندیس PI در گراف‌های مولکولی. پایان‌نامه کارشناسی ارشد. دانشگاه دامغان. ۱۳۹۲.
- [۳] کاتن و فرانک آلبرت. شیمی معدنی. ترجمه منصور عابدینی و قاسم خدادای. انتشارات دانشگاه تهران. ۱۳۶۸.
- [۴] چارلز مورتیمور. شیمی عمومی. ترجمه دکتر عیسی یآوری. نشر علوم دانشگاهی تهران. ۱۳۸۰.
- [5] Z. Ashuri and S. Rahimi, *Fuzzy topological indices*, 13-th Iranian Conference on Fuzzy Systems (IFSC), Islamic Azad University of Qazvin, 2013.
- [6] E. Andovaa and et. all, *Bounds on gutman index*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 67:(515-524), 2012.
- [7] M. Aouchiche and P. Hansen, *Variable neighborhood search for extremal graphs*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 58:(83-102), 2007.
- [8] J.B. Babujee and J. Senbagamalar, *Wiener index of graphs using degree sequence*, Applied Mathematical Sciences, 88:(4387-4395), 2012.
- [9] J. Clark and D.A. Holton, *A first look at graph theory*, World Scientific publishing Co, 1991.
- [10] M.V. Diudea and I. Gutman, *Wiener-type topological indices*, Croatica Chemica Acta, 71(1): (21-51), 1998.
- [11] S. Fujita, *Combinatorial enumeration of three dimensional trees as stereo chemical models of alkanes*, Jurnal of Mathematical Chemistry, 93(1): (141-201), 2008.
- [12] A.N. Gani and J. Malarvizhi, *Some graphs with external szeged index*, Mathematica Slovaca, 50(1): (1-15), 2000.

- [13] I. Gutman and B. Zhou, *Laplacian energy of graph*, Linear Algebra and it's Applications, 414: (29–37), 2008.
- [14] I. Gutman and et.all, *On terminal Wiener indices of kenograms and plerograms*, Iranian Journal of Mathematical Chemistry, 4(1): (77–89), 2013.
- [15] Q. Hu , Y. Liang and K. Fang, *The matrix expression, topological index and atomic attribute of molecular topological structure*, Journal of Data Science, 1: (361–389), 2003.
- [16] O. Ivancicuc, *Design of topological indices*, Revue Roumaine de chimie, 45(5): (475–493), 2000.
- [17] P.E. Johna, P. V. Khadikarb and J. Singh, *A method of computing the PI Index of benzenoid hydrocarbons using orthogonal cuts*, Journal of Mathematical Chemistry, 42(1): (37–49), 2007.
- [18] Z. Kovijanic Vukicevic, *Some topological indices for hexagonal chains*, Scripta Scientiarum Naturalium, 2: (55–60), 2011.
- [19] K.H. Lee, *“First Course on Fuzzy Theory and Applications”*, Advanced Institute of Science and Technology, KAIST Taejon Republic of South Korea, 2005.
- [20] X. Li and Y. Shi, *A survey on the Randic index*, Math Mulheim an der Ruhr, Germany, 59(1): (127–156), 2008.
- [21] X. Li and Y. Yang, *Sharp bounds for the General Randic index*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 51: (155–166), 2004.
- [22] S. Mathew and M.S. Sunitha, *Types of arcs in a fuzzy graph*, Information Sciences, 179: (1760–1768), 2009.
- [23] B.K. Mishra, *Molecular (graph) characteristics of some hydrocarbons through graph theory*, First International Lecture Series on Discrete Mathematical chemistry, Biology and physics. Jyoti Vihar, 768 019, 2007.
- [24] S. Mukwembi, *On the upper bound of gutman index of graphs*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 68: (343–348), 2012.
- [25] H.S. Ramane , D.S. Revankar and A.B. Ganagi, *On the wiener index of a graph*, Journal of the Indonesian Mathematical Society, 18(1): (57–66), 2012.
- [26] J.A. Rodriguez and J. M. Sigarreta, *On the Randic index and conditional parameters of a graph*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry , 54 (2): (403–416), 2005.

-
- [27] N. Sabine Schmuck, *The Wiener index of a graph*, Diploma Thesis, Graz University of Technology, 2012.
- [28] N. Trinajstić, *Chemical graph theory*, laibrary of congress in publication, 1936 .

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

الف

alkan	آلکان
atom	اتم
electronegativity	الکترونگاتیوی
index	اندیس
hyper-wiener index	اندیس ابروینر
electropy index	اندیس الکتروپی
bond flexibility index	اندیس انعطاف‌پذیر پیوند
Balaban index	اندیس بالابان
topological index	اندیس توپولوژیکی
schultz index	اندیس شولتز
kappa index	اندیس کاپا
quasi-wiener index	اندیس کواسی وینر
kirchoff index	اندیس کیرشهف
gutman index	اندیس گاتمن
zagred group index	اندیس گروه زاگرد
centric index	اندیس میانی
wiener index	اندیس وینر
harry index	اندیس هاری
overall connectivity	اندیس همبندی سراسری
edge connectivity index	اندیس همبندی یالی
hosoya index	اندیس هوسویا
Sz index	اندیس SZ
isolate	ایزوله
isomer	ایزومر

bond energy	انرژی پیوند
	ب
benzon	بنزن
	پ
bond	پیوند
	ت
transposed	ترانهاده
autocorrelation descriptors	توصیف‌گر خودهمبستگی
	ج
periodic table	جدول تناوبی
	د
digraph	دی‌گراف
	ر
fuzzy relation	رابطه فازی
	ز
linear chain	زنجیر خطی
	س
acyclic systems	ساختار مارپیچی
	ش
degree membership	شدت عضویت
strong path	شدت مسیر
atomic radius	شعاع اتمی
	ط
bond lentgh	طول پیوند
spectrum	طیف
	ظ
chemical capacity	ظرفیت شیمیایی
	ع
charactrisitic number	عدد مشخصه
	غ
concentration	غلظت
	ف

structural formula	فرمول ساختاری
	ق
huckel theory	قضیه هاکل
	کگ
constitutional graph	گراف تشکیل‌دهنده
line graph	گراف خطی
structural graph	گراف ساختاری
fuzzy graph	گراف فازی
regular graph	گراف منتظم
molecular graph	گراف مولکولی
	م
adjacency matrix	ماتریس مجاورت
distance matrix	ماتریس مسافت
laplacian matrix	ماتریس لاپلاسیان
inverse matrix	ماتریس معکوس
fuzzy set	مجموعه فازی
average distance	مسافت میانگین
	ه
neighborhood	همسایگی
	ی
lateral edge	یال افقی
vertical edge	یال عمودی
diagonal edge	یال مایل
parallel edge	یال موازی

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

A

acyclic systems	ساختار مارپیچی
adjacent	مجاور
adjacency matrix	ماتریس مجاورت
alkan	آلکان
arc	کمان
atom	اتم
atomic radius	شعاع اتمی
autocorrelation descriptors	توصیف‌گر خودهمبستگی
average distance	مسافت میانگین

B

Balaban index	اندیس بالابان
benzen	بنزن
bond energy	انرژی پیوند
bond flexibility index	اندیس انعطاف‌پذیر پیوند
bond length	طول پیوند
bound	کران

C

centric index	اندیس میانی
characteristic number	عدد مشخصه
chemical capacity	ظرفیت شیمیایی
concentration	غلظت
constitutional graph	گراف تشکیل‌دهنده

D

degree membership	درجه عضویت
-------------------	------------

diagonal edge	یال مایل
distance matrix	ماتریس مسافت
E	
edge connectivity index	اندیس همبندی یالی
electronegativity	الکترونگاتیوی
electropy index	اندیس الکتروپی
F	
fuzzy graph	گراف فازی
fuzzy relation	رابطه فازی
fuzzy set	مجموعه فازی
G	
gutman index	اندیس گاتمن
H	
harry index	اندیس هاری
hosoya index	اندیس هوسایا
huckel theory	قضیه هاگل
hyper-wiener index	اندیس ابر-وینر
I	
index	اندیس
inverse matrix	ماتریس معکوس
isolate	ایزوله
isomer	ایزومر
k	
kappa index	اندیس کاپا
kirchoff index	اندیس کیرشهف
L	
laplacian matrix	ماتریس لاپلاسیان
lateral edge	یال افقی
line chain	زنجیر خطی
line graph	گراف خطی
M	
molocular graph	گراف مولکولی

	N
neighborhood.....	همسایگی
	O
overall connectivity.....	همبندی سراسری
	P
parallel edge.....	یال موازی
periodic table.....	جدول تناوبی
	Q
quasi-wiener index.....	اندیس کواسی-وینر
	S
schultz index.....	اندیس شولتز
strong path.....	شدت مسیر
structural formula.....	فرمول ساختاری
Sz index.....	اندیس SZ
	T
topological index.....	اندیس توپولوژیکی
	V
vertical edge.....	یال عمودی
	W
wiener index.....	اندیس وینر
	Z
zagred group index.....	اندیس گروه زاگرب

نمایه

- α -برش، ۱۳
- گشت، ۴
- اندیس توپولوژیکی، ۱۷
- ماتریس انحراف، ۱۱
- اندیس جامع راندیک، ۳۴
- ماتریس لاپلاسین، ۱۰
- اندیس وینر، ۱۹
- ماتریس مجاورت، ۸
- اندیس گاتمن، ۲۹
- ماتریس مسافت، ۹
- انرژی پیوند، ۴۲، ۳۸
- ماتریس معکوس، ۱۰
- مجاور، ۳
- ایزوله، ۳
- مجموعه فازی، ۱۲
- خاصیت الکترونگاتیوی، ۳۸
- محدب، ۱۳
- درجه، ۳
- مسیر، ۴
- دی‌گراف، ۹
- منتظم، ۴
- رابطه‌ی فازی، ۱۲
- نامحدب، ۱۳
- شدت مسیر، ۱۳
- هسته، ۱۳
- شعاع اتم، ۳۸
- همبند، ۵
- طول پیوند، ۳۸
- همسایگی، ۳
- عدد فازی، ۱۳
- یکریخت، ۳
- عدد فازی مثلثی، ۱۴
- فاصله رئوس، ۴
- قطبیت پیوند، ۴۸
- قطع، ۱۳
- گراف، ۳
- گراف خطی، ۵
- گراف ستاره، ۵
- گراف شیمی، ۵
- گراف فازی، ۱۲
- گراف مولکولی، ۶
- گراف مولکولی فازی، ۴۳

Abstract

In this thesis we investigate the fuzzy molecular graphs. In the first chapter some definitions and preliminaries are presented. The second chapter is dedicated to introducing some topological indices related to the molecular graph. In the chapter third we define fuzzy molecular graph by using the concept of fuzzy numbers. The fourth chapter is devoted to calculation of some fuzzy topological indices based on fuzzy molecular graph.

keywords: Molecular graph, number fuzzy, topological indices



Shahrood University Of Technology

Shahrood University of Technology
Faculty Of Mathematical Sciences

Dissertation Submitted in Partial
Fulfillment of The Requirements For The
Degree of Master of Science in
Applied Mathematics

Fuzzy Molecular Graph

Supervisor

Dr.Sadegh Rahimi Sharbaf

Advisor

Dr.Hossein Nikoofard

by

Zahra Ashuri

February, 2014