

## محاسبه شاخص خروج از مرکز ادیز برای گراف‌های بنزنی

محمد رهگشا<sup>۱</sup>، مهدی علائیان<sup>۲</sup>

۱- استاد دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده ریاضی، تهران، ایران،

۲- دانشجوی دکتری، گروه ریاضی، واحد کرج، دانشگاه آزاد اسلامی، کرج، ایران

(دریافت: ۱۳۹۷/۰۸/۲۵ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۷/۰۲)

### چکیده

فرض کنیم  $G$  گرافی همبند با مجموعه رئوس  $V$  باشد، در این صورت شاخص خروج از مرکز ادیز گراف  $G$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{ecc}(G) = \sum_{v \in V} \frac{S_v}{ecc(v)}$$

که در آن،  $S_v$  مجموع درجات همسایه‌های رأس  $v$  و  $v$  خروج از مرکز آن است. در این مقاله شاخص خروج از مرکز ادیز گراف‌های بنزنی را محاسبه می‌کنیم. نتیجه حاصله از این شاخص در قضیه ۱-۲ بیان شده است.

**واژه‌های کلیدی:** گراف‌های بنزنی، خروج از مرکز، خروج از مرکز ادیز، شاخص‌های مکان شناسی

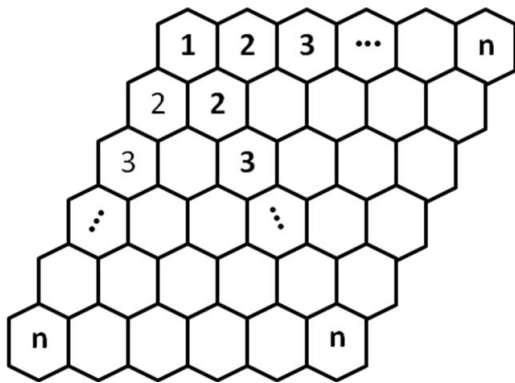
### ۱- مقدمه

علم جبر دارای تاریخچه‌ای طولانی است و در دهه‌های اخیر تغییرات مهمی روی آن ایجاد شده است. این علم تاثیر مهمی در ایجاد و گسترش رشته‌های جدید ریاضی از جمله نظریه جبری گراف و نظریه گراف‌های کاربردی داشته است. علوم شیمیایی و علوم پزشکی نیز بهره بسیار از نظریه گروه‌ها و نظریه گراف‌ها گرفته‌اند، و موجب ایجاد علوم بین رشته‌ای شده‌اند.

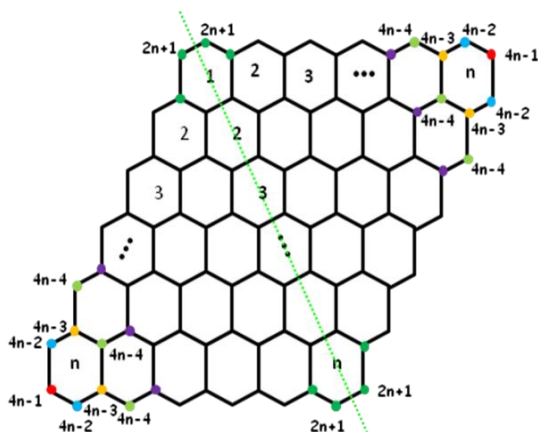
شاخص‌های توپولوژیکی مفاهیم جدید شیمی هستند که بعلاوه کاربرد زیاد این شاخص‌ها، اخیراً خاصیت ریاضی این شاخص‌ها بسیار مورد توجه قرار گرفته است. یک شاخص توپولوژیکی مقدار عددی است که به یک گراف از جمله گراف مولکولی نسبت داده می‌شود. این عدد همبستگی بسیار نزدیک با مقادیر حقیقی نظیر مقدار پتانسیل، نقطه جوش و دیگر ویژگی‌های ساختارهای شیمیایی دارد. شیمی کوانتومی اولین رشته‌ای بود که از طریق آن چند جمله‌ای‌ها به نظریه گراف شیمیایی وارد شدند. موادی از قبیل سولفید سرب، سولفید روی، فسفات ایندیوم و غیره بسته به اندازه، طول موج یا رنگ معینی از نور را پس از تحریک الکترون‌ها با استفاده از یک منبع خارجی از خود ساطع می‌کنند. انتشار نور توسط نقاط کوانتومی در تشخیص‌های پزشکی کاربرد فراوانی دارد. این نقاط به صورت برجسب فلئوئورسانتی عمل

می‌کنند با این تفاوت که در برابر درخشان شدن خاصیت و توانایی خود را از دست نمی‌دهند و در برابر تعداد سیکل‌ها و انتشار نور تحریک و مقاومت بیشتری از خود نشان می‌دهند. نقاط کوانتومی، کریستال‌هایی در حد نانو هستند که از خود نور ساطع می‌کنند. طول موج نور ساطع شده از آنها به اندازه کریستال بستگی دارد. به علت این‌که الکترون‌ها در این کریستال‌های در حد نانو به روش یکسانی رفتار می‌کنند آنها را نقاط کوانتومی می‌نامند. موادی از قبیل سولفید سرب، سولفید روی، فسفات ایندیوم و غیره بسته به اندازه، طول موج یا رنگ معینی از نور را پس از تحریک الکترون‌ها با استفاده از یک منبع خارجی از خود ساطع می‌کنند. انتشار نور توسط نقاط کوانتومی در تشخیص‌های پزشکی کاربرد فراوانی دارد. این نقاط به صورت برجسب فلئوئورسانتی عمل می‌کنند با این تفاوت که در برابر درخشان شدن خاصیت و توانایی خود را از دست نمی‌دهند و در برابر تعداد سیکل‌های تحریک و انتشار نور مقاومت بیشتری از خود نشان می‌دهند. نقاط کوانتومی می‌توانند به‌گونه‌ای تنظیم شوند که در رنگ‌های مختلف با یک طول موج نور معین بدرخشند. به عبارتی می‌توانیم نقاط کوانتومی را بسته به فرکانس مورد نیاز نور انتخاب کنیم و باعث شویم تا یک گروه از نقاط کوانتومی مشابه گروه دیگری با یک طول موج بدرخشند.

$4n-1$  و کمینه خروج از مرکز یالی آن نیز برابر است با  $2n$ . در شکل (۲) خروج از مرکز رئوس گراف  $L_n(G)$  نشان داده شده است. همچنین در شکل (۳) مشاهده می‌شود  $2n$  نوع خط در این گراف وجود دارد. در خط اول یک رأس با  $Max(ecc(u)) = 4n-1$  و  $S_u = 4$  موجود است. در خط دوم دو رأس با  $ecc(u) = 4n-2$  و  $S_u = 5$  و همچنین در خط سوم دو رأس با  $ecc(u) = 4n-3$  و  $S_u = 7$  موجودند. از طرفی در خط  $2n$ ،  $n+1$  رأس داریم به طوری که  $n-1$  تای آنها با  $ecc(u) = 2n$  و  $S_u = 9$  می‌باشند. در دو تای دیگر نیز داریم:  $ecc(u) = 2n+1$  و  $S_u = 5$ . در خطوط دیگر نیز دو حالت زیر را خواهیم داشت:



شکل (۱): گراف  $L_n(G)$



شکل (۲): خروج از مرکز رئوس گراف  $L_n(G)$

حالت اول) خطوط فرد: تعداد رئوس در خطوط ۵، ۷، ۹، ... و  $2n-1$  به ترتیب برابرند با ۳، ۴، ۵، ... و  $n$  و خروج از مرکز آنها به ترتیب برابرند با  $4n-5$ ،  $4n-7$ ، ... و  $2n+3$ . همچنین در خط  $m$  از این خطوط دو رأس با  $S_u = 7$  و  $m-2$  رأس با  $S_u = 9$  می‌باشند.

این امر به برچسب‌های چندگانه امکان می‌دهد تا با استفاده از یک منبع نور وارد ردیابی شوند. تاکنون ده‌ها شاخص توپولوژیک معرفی شده‌اند که هر کدام کاربردهای ویژه‌ای پیدا کرده‌اند. از جمله شاخص‌های توپولوژیکی معروف شاخص وینر، فوق وینر، سگد، پادماکار-ایوان و شاخص خروج از مرکز می‌باشند [۳، ۲، ۱، ۴، ۵].

فرض کنیم  $G$  گرافی همبند با مجموعه رئوس  $V(G)$  و مجموعه یال‌های  $E(G)$  باشد. طول کوتاهترین مسیر بین دو رأس دلخواه  $x$  و  $y$  از  $V(G)$  را فاصله آن دو رأس نامیده و آن را با  $d(x, y)$  نشان می‌دهیم:

شاخص وینر که به وسیله مولف آن، عدد مسیر نامگذاری شده بود و در نهایت به شاخص یا عدد وینر معروف شد، یکی از موضوعات اصلی برای محققان در سال‌های اخیر تبدیل شده است. شاخص وینر به صورت رابطه (۱) تعریف می‌شود [۶]:

$$W(G) = \sum_{\{u,v\} \in V(G)} d(u, v) \quad (1)$$

شاخص خروج از مرکز به صورت  $\xi^c(G) = \sum_{u \in V(G)} deg(u) \cdot ecc(u)$  تعریف می‌شود که در آن  $deg(u)$  (درجه  $u$ ) تعداد یال‌هایی است که از رأس  $u$  می‌گذرند. همچنین  $ecc(u)$  را خروج از مرکز  $u$  نامیم که بیشینه فاصله رأس  $u$  از دیگر رأس‌های گراف  $G$  می‌باشد. اکنون شاخص خروج از مرکز اصلاح شده نیز به صورت  $S_u \cdot ecc(u)$  تعریف می‌شود که در آن  $S_u$  مجموع درجات رئوس همسایه‌های رأس  $u$  می‌باشد. همچنین شاخص خروج از مرکز ادیز گراف  $G$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود [۶، ۷]:

$$E \xi^c(G) = \sum_{v \in V} \frac{S_v}{ecc(v)} \quad (2)$$

## ۲- مباحث اصلی

هدف از این بخش محاسبه شاخص خروج از مرکز ادیز برای گراف‌های بنزنی می‌باشد.

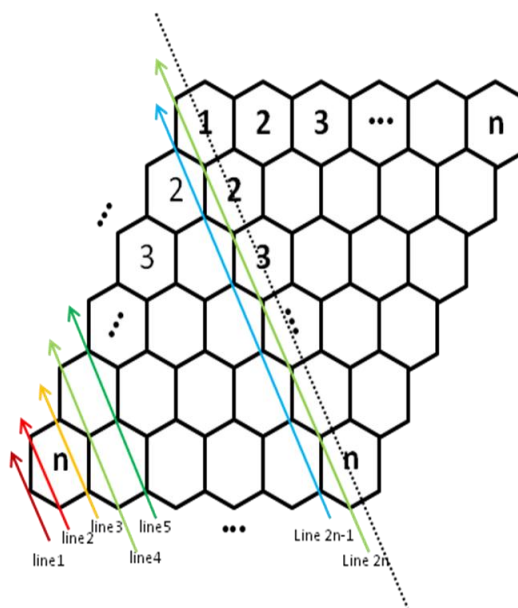
گراف‌های بنزنی از شش ضلعی‌های به هم پیوسته به صورت خطی نامتناهی تشکیل می‌شوند که با نماد  $L_n(G)$  نشان می‌دهیم که در آن  $n$  تعداد شش‌ضلعی‌ها را در هر سطر و ستون نشان می‌دهد. با توجه به شکل (۱) معلوم می‌شود گراف  $L_n(G)$  دارای  $2n(n+2)$  رأس و  $3n^2 + 4n - 1$  یال می‌باشد. از طرفی ملاحظه می‌شود که بیشینه خروج از مرکز  $L_n(G)$  برابر است با

۱-۲ قضیه. شاخص خروج از مرکز ادیز  $L_n(G)$  برابر است با:

$$E_{\xi^C}(L_n(G)) = 24 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{1}{4n-2i} + 28 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{1}{4n-2i-1} + 18 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{i-1}{4n-2i} + 18 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{i-1}{4n-2i-1} + \frac{576n^2 - 1152n^5 + 1116n^4 + 596n^3 - 719n^2 - 7n + 46}{64n^4 - 64n^3 - 4n^2 + 16n - 3} \quad (۴)$$

### ۳- نتیجه گیری

در این مقاله روش محاسبه شاخص خروج از مرکز ادیز برای گرافهای بنزنی آورده شده است. این روش برای تمام نانوساختارها و بنزنها مناسب می باشد. ما در این مقاله روش خود را برای خانواده نامتناهی از گرافهای بنزنی خطی  $L_n(G)$  به کار برده ایم.



شکل (۳):  $2n$  نوع خط در گراف  $L_n(G)$  وجود دارد.

جدول (۱): خروج از مرکز گراف  $L_n(G)$

Type Of Vertices	Num	Ecc	$S_u$
۱	۱	$n^4-۱$	۴
۲	۲	$n^4-۲$	۵
۳	۲	$n^4-۳$	۷
۴	۲	$n^4-۴$	۶
۴	۱	$n^4-۴$	۹
۵	۲	$n^4-۵$	۷
۵	۱	$n^4-۵$	۹
۶	۲	$n^4-۶$	۶
۶	۲	$n^4-۶$	۹
۷	۲	$n^4-۷$	۷
۷	۲	$n^4-۷$	۹
...	...	...	...
$n^2-۲$	۲	$۲+n^2$	۶
$n^2-۲$	$۲-n$	$۲+n^2$	۹
$n^2-۱$	۲	$۲+n^2$	۵
$n^2-۱$	۲	$۱+n^2$	۷
$n^2-۱$	$n-۲$	$۱+n^2$	۹
$n^2$	$n-۱$	$۱+n^2$	۹

حالت دوم) خطوط زوج: تعداد رئوس در خطوط ۴، ۶، ۸، ... و  $2n-2$  به ترتیب برابرند با ۳، ۴، ۵، ... و  $n$  و خروج از مرکز آنها به ترتیب برابرند با  $4n-4$ ،  $4n-6$ ، ... و  $2n+2$ . همچنین در خط  $m$  از این خطوط دو رأس با  $S_u = 6$  و  $m-2$  رأس با  $S_u = 9$  می باشند. (جدول (۱) را ببینید)

بنابراین خواهیم داشت:

$$E_{\xi^C}(L_n(G)) = \sum_{v \in V} \frac{ecc(v)}{S_v} = 2 \left( 12 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{1}{4n-2i} + 14 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{1}{4n-2i-1} + 9 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{i-1}{4n-2i} + 9 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{i-1}{4n-2i-1} + \frac{4}{4n-1} + \frac{10}{4n-2} + \frac{14}{4n-3} + \frac{9(n-2)}{2n+1} + \frac{10}{2n+1} + \frac{14}{2n+1} + \frac{9(n-1)}{2n} \right) = 24 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{1}{4n-2i} + 28 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{1}{4n-2i-1} + 18 \sum_{i=2}^{n-1} \frac{i-1}{4n-2i} + 18 \sum_{i=2}^{n-2} \frac{i-1}{4n-2i-1} + \frac{576n^2 - 1152n^5 + 1116n^4 + 596n^3 - 719n^2 - 7n + 46}{64n^4 - 64n^3 - 4n^2 + 16n - 3} \quad (۵)$$

اکنون قضیه زیر را خواهیم داشت:

#### ۴- مراجع

- [1] S. Bajaj, S. S. Sambhi, S. Gupta, and A. K. Madan, "Model for prediction of anti- HIV activity of 2- pyridinone derivatives using novel topological descriptor," *QSAR & Combinatorial Science*, vol. 25, no. 10, pp. 813-823, 2006.
- [2] J. Devillers and A. T. Balaban, eds, "Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPAR," CRC Press, 2000.
- [3] M. V. Diudea, "QSPR/QSAR Studies by molecular descriptors, Nova Sci.," Publ., Huntington, NY, 2000.
- [4] M. Karelson, "Molecular descriptors in QSAR/QSPR," Wiley-Interscience, 2000.
- [5] R. Todeschini and V. Consonni, "Handbook of molecular descriptors," vol. 11, John Wiley & Sons, 2008.
- [7] S. Ediz, "Computing Ediz eccentric connectivity index of an infinite class of nanostar dendrimers," *Optoelectron. Adv. Mater. Rapid Commun*, vol. 4, pp. 1847-1848, 2010.
- [8] S. Ediz, "The Ediz eccentric connectivity index of one pentagonal carbon nanocones," *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, vol. 21, no. 2, pp. 113-116, 2013.