Teoria dei Grafi e Applicazioni alla Chimica

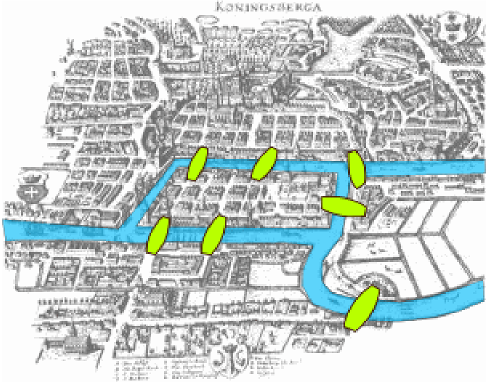
Francesco Pibiri
Università degli studi di Cagliari

Corso di Laurea Triennale in Matematica
Relatore di Tesi: Prof. Andrea Loi

26 Febbraio 2013

Teoria dei Grafi

Problema dei Ponti Koningsberg.
"E' possibile fare un giro a piedi della cittadina passando una ed una sola volta attraverso ciascun ponte e ritornando al punto di partenza ?"



Teoria dei Grafi Astratta:

$V_i = \{v_i \| \ v_i vertici, \ i < \infty\}$

$E_g = \{\{v_i, v_j\} \|\forall v_i \in V_i \wedge \forall v_j \in V_j\}$

Teoria dei Grafi Topologica:

$V_i = \{v_i \| \ v_i punti, \ i < \infty\}$

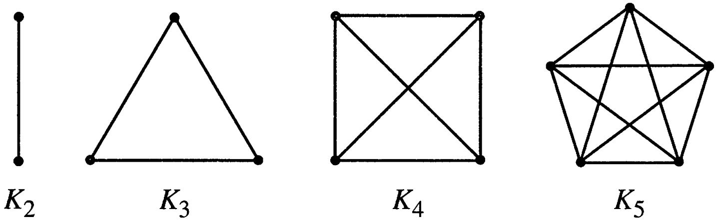
$E_g = \{e_{ij} \| e_{ij} \textit{ spigolo che unisce } v_i \textit{ a } v_j\}$

Ovvero e_{ij} è un sottoinsieme chiuso e limitato di $\mathbb{R}$ avente come punti di frontiera v_i e v_j.

Corrispondenza biunivoca tra i grafi della Teoria dei Grafi Astratta e i grafi della Teoria dei Grafi Topologica

Grafo Completo di n vertici K_n:

ha n vertici e una collezione di spigoli tali che ogni paia di vertici è unito da un singolo spigolo

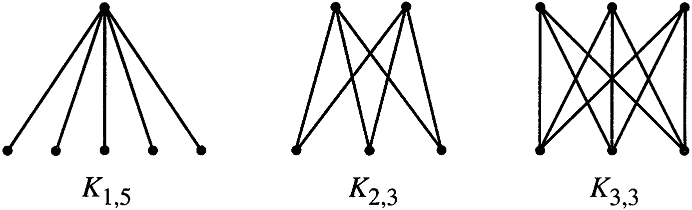


Grafo Completo Bipartito di $m + n$ vertici $K_{m,n}$:

Possono essere divisi in un insieme $V_m$di m vertici e in un insieme V_n di n vertici

(i) Ciascuno spigolo unisce un vertice di V_ma un vertice di V_n

(ii) Ogni paio di vertici $v \in V_m$ e $v' \in V_n$è unito da un singolo spigolo



Definizione

Sia G un grafo. Per ciascun vertice $v \in V_g$, definiamo *grado di v* il numero di spigoli incidenti a v, contandolo 2 volte se collega v a se stesso.

Definizione

Sia G un grafo:

- Un *cammino chiuso* è un cammino che inizia e finisce con lo stesso vertice.
- Un cammino chiuso nel quale non si ripetono spigoli è chiamato *circuito.*
- Un circuito nel quale non si ripetono vertici(eccetto il primo e l'ultimo) viene chiamato *ciclo.*

Definizione

Sia G un grafo.

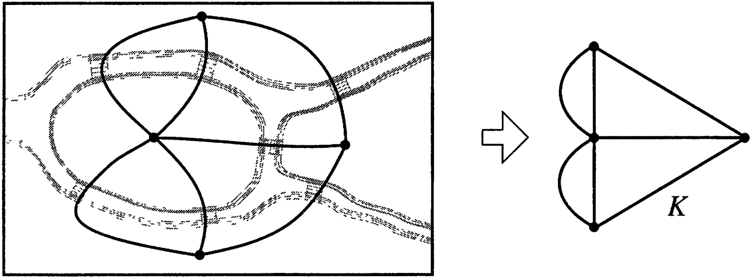
- Un *cammino euleriano* in G è un cammino che attraversa ogni spigolo in G esattamente una volta.
- Un *circuito euleriano* è un cammino euleriano chiuso in G.
- Diciamo che G è *euleriano* se contiene un circuito euleriano.

Definizione

Un grafo G si dice *Connesso se* $\forall u \in V_g, \forall v \in V_g \; \exists$ *un cammino che collega* u *a* v.

Grafo di Konigsberg K

Modellando i lembi di terra di Konigsberg come vertici e i loro ponti come spigoli



Nel 1734 Eulero trovò una C.N.S perchè un grafo possa contenere un Circuito o Cammino Euleriano

Teorema

Sia G un grafo connesso:

(i) $\exists$un *Circuito Euleriano* $\Longleftrightarrow$tutti i vertici di V_g hanno grado pari

(ii) $\exists$un *Cammino Euleriano* ma non un Circuito Euleriano $\Longleftrightarrow G$ ha esattamente 2 vertici di grado dispari (ovvero il primo e l'ultimo).

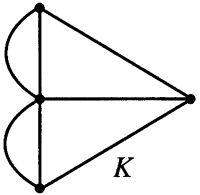
Dimostrazione

(i) Condizione Necessaria: Se $\exists$un Circuito Euleriano C in G che attraversa una ed una sola volta tutti i vertici di $V_g \Rightarrow C$ "entra" ed "esce" in ogni vertice(tranne nel primo e nell'ultimo da cui esce all'inizio ed entra alla fine) senza mai passare nello stesso spigolo. Quindi tutti i vertici devono avere necessariamente grado pari.

Condizione sufficiente:

Per ipotesi ogni vertice v ha grado pari. Costruiamo un circuito euleriano.
Sia $v \in V_g$.
Usciamo da v attraverso uno spigolo, entrando in un altro vertice u di V_g.Poichè u ha grado pari,possiamo uscire da u con uno spigolo diverso da quello con cui siamo entrati.
Possiamo ripetere il procedimento senza mai passare 2 volte sullo stesso spigolo e, poichè il grafo è finito, prima o poi torneremo sul vertice v.
Abbiamo cosi costruito un ciclo, che non è necessariamente euleriano,poichè potremmo non aver attraversato tutti gli spigoli del grafo.
Allora consideriamo il grafo $G\prime$da G ottenuto cancellando gli spigoli del ciclo.Se tutti i vertici di $G\prime$hanno grado zero allora il ciclo costruito è euleriano.

Altrimenti consideriamo un vertice v' appartenente al ciclo rimosso che abbia ancora grado positivo. Tale vertice deve esistere poichè G è connesso.
Ripetiamo il procedimento sul grafo G'a partire dal vertice v'.Otteniamo un nuovo ciclo che interseca il precedente nel vertice v'.
Iterando il procedimento, prima o poi tutti gli spigoli verranno usati, ottenendo cosi un ciclo euleriano.



Il Grafo di Konigsberg K ha 4 vertici di grado dispari, segue che *Non si può avere nè un Circuito* Euleriano *nè un Cammino Euleriano.*

Non è possibile attraversare tutti e 7 i ponti di Konigsberg esattamente una sola volta.

Un' Applicazione della Teoria dei Grafi alla Chimica

- *Studiare le proprietà chimico-fisiche di una molecola tramite l'utilizzo della Teoria dei Grafi.*
- *Le strutture chimiche avranno una struttura di Grafo.*
- *Gli atomi e le molecole come vertici di un Grafo e i loro legami come spigoli.*
- *Presenteremo una classe particolare di Idrocarburi, gli Alcani.*

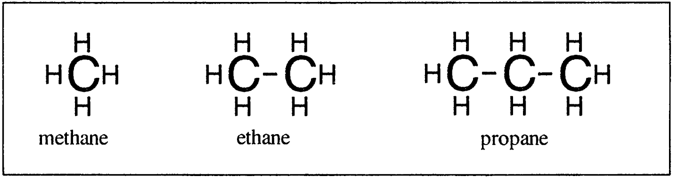
Definizione

Sia G un grafo:

- Per i vertici v e $v\prime$in G, definiamo *distanza* di v da $v\prime$come il minore numero di spigoli in un cammino.
- L'*Indice di Wiener* $W(G)$ di G è la somma delle distanze tra ciascuna coppia di vertici di G.

Applichiamo l'*Indice di Wiener* agli Alcani.

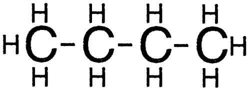
Gli Alcani sono molecole a base di Carbonio C e Idrogeno H. Esitono Alcani a catena lineare e Alcani a catena ramificata. Gli Alcani più semplici sono il *Metano*, l'*Etano* e il *Propano*.



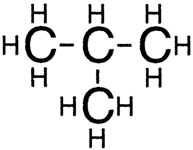
Da una particolare classe di Alcani a catena lineare, si possono creare alcani a catena ramificata inserendo un Carbonio tra un Carbonio e un Idrogeno della catena originale.

Da una molecola di Propano si possono ottenere 2 tipi di alcani a 4 atomi di Carbonio.

Da una molecola di Propano si possono ottenere 2 tipi di alcani a 4 atomi di Carbonio.

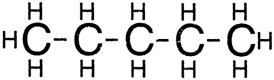


n-butane

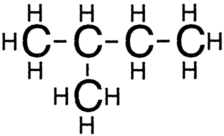


2-methylpropane

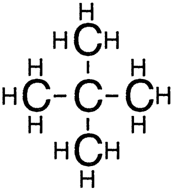
Sempre dal Propano si possono ottenere 3 tipi di alcani a 5 atomi di Carbonio.



n-pentane

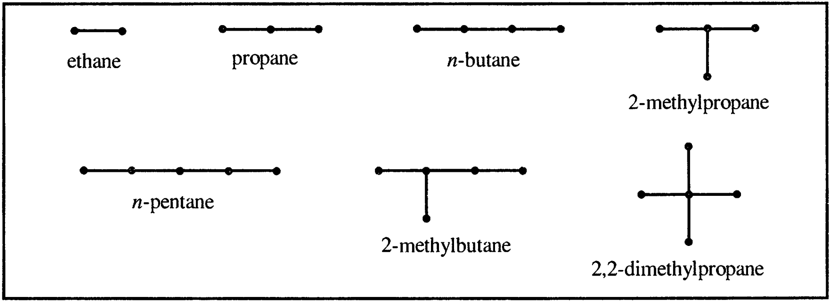


2-methylbutane



2,2-dimethylpropane

Si possono modellare gli Alcani in modo tale che ad ogni atomo di Carbonio corrisponda un *vertice* e ad ogni legame tra atomi di Carbonio uno *spigolo*.
In questo modo otteniamo il Grafo corrispondente ad ogni molecola di Alcani.

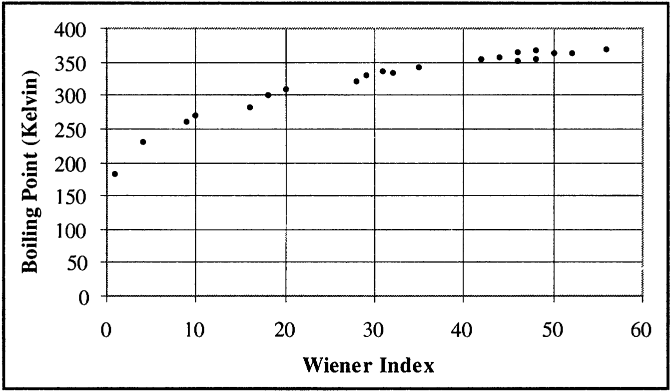


Osserviamo per ogni Alcano il suo *Indice di Wiener WI* e il suo relativo *Punto di ebollizione* in Kelvin $BP(K)$.

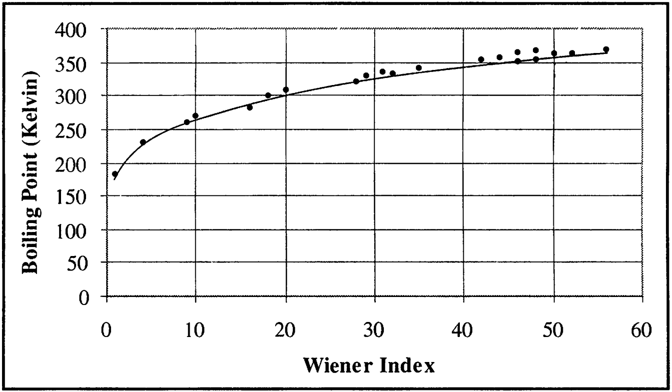
Name	WI	BP (K)
ethane	1	184
propane	4	233
n-butane	10	272
2-methylpropane	9	261
n-pentane	20	309
2-methylbutane	18	301
2,2-dimethylpropane	16	283
n-hexane	35	342
2-methylpentane	32	333
3-methylpentane	31	336

2,3-dimethylbutane	29	331
2,2-dimethylbutane	28	323
n-heptane	56	371
2-methylhexane	52	363
3-methylhexane	50	365
2,2-dimethylpentane	46	352
3,3-dimethylpentane	44	359
2,3-dimethylpentane	46	363
2,4-dimethylpentane	48	354
3-ethylpentane	48	366
2,2,3-trimethylbutane	42	354

Una proprietà quantitativa di un modello matematico è strettamente legata ad una proprietà fisica della molecola stessa.
Stretta correlazione tra WI e $BP(K)$



La relazione tra WI e $BP(K)$ può essere approssimata da una curva crescente.
Adattando un'equazione di potenza $B = \alpha W^{\beta}$all' *Indice di Wiener* W e al *Punto di ebollizione* B, si ottiene l'equazione approssimata $B = 181 W^{0,1775}$



L'Ottano è un alcano a catena lineare con 8 atomi di Carbonio.
Il suo WI è 84. Utilizzando l' equazione di potenza si ottiene $B = 397K$.
Molto vicino al suo effettivo $BP(K) = 399K$.

- *“La molecola si comporterà come previsto?”*
- *“La molecola avrà tossicità minima?”*