match no. 4 pp. 103 - 111 1978

ENUMERATION DES GROUPES ALCOYLES PAR LES FONCTIONS DE PARTITION

Jean-Michel Kornprobst
Laboratoire des Produits Naturels, Faculté des Sciences, Université de Dakar-Fann, République du Sénégal.

(received: December 1977)

Résumé. Nous présentons une méthode simple et récurrente permettant d'énumérer et de construire, sans omission ni répétition, l'ensemble des groupes alcoyles ayant un nombre de carbones donné.

Introduction.

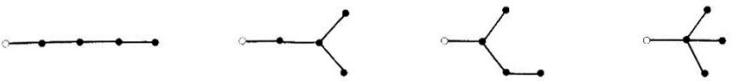
L'énumération des groupes alcoyles est généralement obtenue à l'aide du théorème de POLYA (1) ; ce théorème classique de l'analyse combinatoire (2) est cependant d'application délicate et conduit rapidement à des calculs inextricables sans ordinateur.

Nous présentons ici une méthode de calcul récurrente utilisant les fonctions de partition d'entiers (3) qui rend l'énumération et la construction graphique des groupes alcoyles particulièrement facile.

Arbre planté et groupe alcoyle.

En théorie des graphes un arbre planté est un arbre enraciné pour lequel le degré de la racine est égal à 1 (4) ; c'est donc précisemment la notion de groupe alcoyle -R. Dans la suite du texte nous représenterons la racine par le symbole ○ et un atome de carbone par •

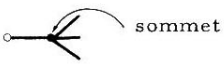
Exemple : Il existe quatre arbres plantés d'ordre 4 (à 4 points) représentant les quatre groupes butyle.



Notion de groupe primaire, secondaire, tertiaire.

L'exemple précédent met en évidence ces trois uniques possibilités. Un groupe primaire est un groupe dont le carbone lié au reste de la molécule est monosubstitué ; secondaire s'il est bisubstitué et tertiaire s'il est trisubstitué.

Cette notion se ramène ainsi au degré du premier point de l'arbre lié à la racine (groupe primaire si le degré de ce point est égal à 1, ...etc.) ; nous appellerons ce point le sommet du groupe.



Enumération des groupes alcoyles.

a) groupes primaires. Le nombre des groupes alcoyles primaires ayant p carbones est égal au nombre total des groupes alcoyles en ayant (p-1). En effet, pour obtenir les groupes primaires à p carbones, il suffit de considérer tous les groupes en ayant (p-1) et de les relier au carbone supplémentaire pris comme sommet.

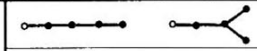
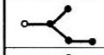
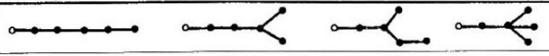
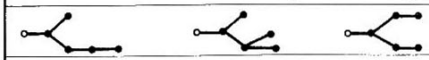
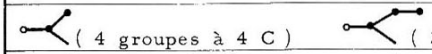
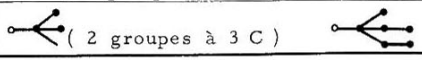
b) groupes secondaires. Les groupes alcoyles secondaires ayant p carbones sont formés, à partir du sommet secondaire, par toutes les combinaisons possibles des (p-1) atomes restant, pris 2 à 2 ; leur nombre est donc égal à $p_2(p-1)$.

c) groupes tertiaires. De la même façon, les groupes tertiaires à p carbones sont obtenus, à partir du sommet tertiaire, par toutes les combinaisons possibles des (p-1) atomes restant, pris 3 à 3 ; leur nombre est donc égal à $p_3(p-1)$.

Cette méthode récurrente permet de calculer rapidement l'ensemble des groupes alcoyles à p carbones en sommant les nombres des groupes primaires, secondaires et tertiaires.

Le tableau I donne les premiers termes de la récurrence.

Tableau 1 - Enumération des groupes alcoyles -

p	Arbre représentatif	Primaires	Secondaires		Tertiaires		Σ
			Partition	Nb. cas	Partition	Nb. cas	
1		1					1
2		1					1
3		1					2
			1, 1	1			
4		2					4
			1, 2	1			
					1, 1, 1	1	
5		4					8
			1, 3 2, 2	2 1			
					1, 1, 2	1	
6	(8 groupes à 5 C)	8					17
	 (4 groupes à 4 C) (2 groupes 3 C)		1, 4 2, 3	4 2			
	 (2 groupes à 3 C)				1, 1, 3 1, 2, 2	2 1	

Exemple de calcul : p = 7.

groupes primaires	:	les 17 groupes à 6 carbones.
groupes secondaires	:	donnés par $p_2(6)$, soit :
1,5	:	les 8 groupes à 5 carbones.
2,4	:	les 4 groupes à 4 carbones.
3,3	:	les 3 combinaisons des 2 groupes à 3 carbones. (*)
groupes tertiaires	:	donnés par $p_3(6)$, soit :
1,1,4	:	les 4 groupes à 4 carbones.
1,2,3	:	les 2 groupes à 3 carbones.
2,2,2	:	une seule possibilité.

Au total, on obtient :

N = 17 (primaires) + 15 (secondaires) + 7 (tertiaires).
= 39

Construction des groupes : Pour construire les groupes alcoyles ayant un nombre de carbones donné, il suffit de les former à partir des différentes partitions ; aucune omission ni répétition ne sont possibles.

Le tableau 2 donne les éléments de cette construction jusqu'à p = 12.

Les 39 groupes alcoyles à 7 carbones sont donnés en annexe.

(*)- On rappelle que le nombre de combinaisons avec répétitions de p objets, pris n à n est donné par $\binom{n + p - 1}{n}$.

Tableau 2 - Eléments de construction des groupes alcoyles.

p	$\sum$prim.	$p_2(p-1)$	Nb. cas	$\sum$sec.	$p_3(p-1)$	Nb. cas	$\sum$ter.	$\sum$
7	17	1,5 2,4 3,3	8 4 3	15	1,1,4 1,2,3 2,2,2	4 2 1	7	39
8	39	1,6 2,5 3,4	17 8 8	33	1,1,5 1,2,4 1,3,3 2,2,3	8 4 3 2	17	89
9	89	1,7 2,6 3,5 4,4	39 17 16 10	82	1,1,6 1,2,5 1,3,4 2,2,4 2,3,3	17 8 8 4 3	40	211
10	211	1,8 2,7 3,6 4,5	89 39 34 32	194	1,1,7 1,2,6 1,3,5 1,4,4 2,2,5 2,3,4 3,3,3	39 17 16 10 8 8 4	102	507
11	507	1,9 2,8 3,7 4,6 5,5	211 89 78 68 36	482	1,1,8 1,2,7 1,3,6 1,4,5 2,2,6 2,3,5 2,4,4 3,3,4	89 39 34 32 17 16 10 12	249	1238
12	1238	1,10 2, 9 3, 8 4, 7 5, 6	507 211 178 156 136	1188	1,1,9 1,2,8 1,3,7 1,4,6 1,5,5 2,2,7 2,3,6 2,4,5 3,3,5 3,4,4	211 89 78 68 36 39 34 32 24 20	631	3057

Remarque - Le principe du calcul reste valable quel que soit le degré des points de l'arbre planté. Pour énumérer tous les arbres plantés à p points, il suffit de considérer les partitions jusqu'à $p_{p-1}(p-1)$. On énumère ainsi les arbres enracinés en fonction du degré de la racine, tout en disposant d'une méthode de construction par récurrence.

Bibliographie et Notes

1 - R. C. READ dans A. T. BALABAN " Chemical Applications of Theory ", Academic Press, 1976, chapitre 4. Voir également O. E. POLANSKY, Match, 1, 11, 1975.

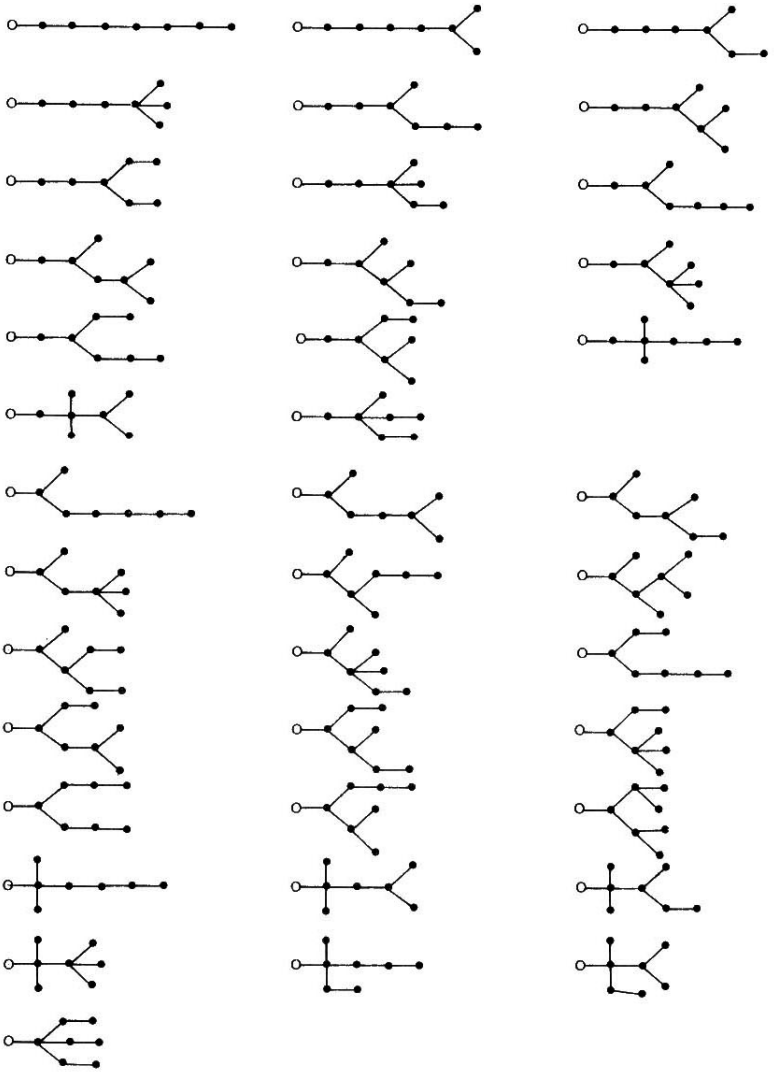
2 - Plusieurs articles récents ont été consacrés au théorème de POLYA ; en particulier : L. COMTET, " Analyse Combinatoire ", Presses Universitaires de France, 1970, tome 2, chapitre 6, p. 86 à 96. F. HARARY, E. M. PALMER " Graphical Enumeration " Academic Press, 1973, chapitre 2. A. KERBER, Match, 1, 5, 1975. F. HARARY, E. M. PALMER, R. ROBINSON, R. C. READ, référence 1, chapitre 3.

3 - Concernant les fonctions arithmétiques en général et les fonctions de partition en particulier, voir G. H. HARDY, E. M. WRIGHT, " An Introduction to the Theory of Numbers ", The English Language Book Society and Oxford University Press, fourth edition, 1959, chapitre XIX.

4 - F. HARARY, E. M. PALMER, " Graphical Enumeration ", Academic Press, 1973, p. 60.

ANNEXE

Les 39 groupes alcoyles à 7 carbones



PROGRAMME DETER-TERP

LONGIFOLENE

LIAISONS ENTREES

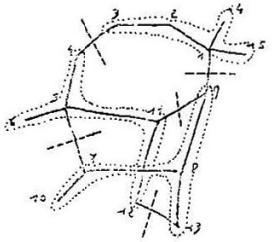
1-15 1-14 1- 2 1- 9 2- 5 3- 4 4- 5 5- 6 6- 7 7-10 7- 8 5-11 11- 9 8- 9 11-12
12-13 13- 8

LIAISONS SUSCEPTIBLES D'ETRE ROMPUES

1- 2 2- 5 3- 4 4- 5 5- 7 7- 8 1- 9 8- 9 5-11 9-11 11-12 8-13 12-13

UNE SOLUTION EST OBTENUE PAR
5 COUPURE(S) DE 3- 4 5- 7 1- 9 9-11 12-13

```
 3
 1  3
 2  1  2
 0  0  0  1
 0  0  0  1  3
 0  0  0  0  1  1
 0  0  0  0  0  0  2
 0  0  0  0  0  0  1  3
 0  0  0  0  0  0  0  1  1
 0  0  0  0  0  0  1  0  0  1
 0  0  0  0  1  0  0  0  0  2
 0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  1
 0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  1
 1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1
 1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1
```



NOMBRE DE PASSAGES DANS NCOUP 1297
NOMBRE DE PASSAGES DANS NFORM 540
NOMBRE DE PASSAGES DANS NTEST 85
NOMBRE DE CAS POSITIFS 1
FIN DU TRAITEMENT

PIMARANE

LIAISONS ENTREES

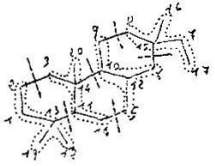
1- 2	2- 3	3-14	14-20	1-13	13-19	13-18	13-11	11-14	14-10	11- 4	4- 5	5-12	12-10	10- 9
9- 8	8-13	19- 6	6-12	15-16	15- 7	7-17								

LIAISONS SUSCEPTIBLES D'ETRE ROMPUES

1- 2	2- 3	4- 5	8- 9	9-10	4-11	5-12	6-12	10-12	1-13	11-13	3-14	10-14	11-14	6-15
7-15	8-15													

UNE SOLUTION EST OBTENUE PAR
LA COUPURE(S) DE 2- 3 4- 5 8- 9 11-13 10-14 6-15

```
 2
 1  1
 2  0  1
 0  0  0  1
 0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  2
 0  0  0  0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  0  1  2
 0  0  0  1  0  0  0  0  0  2
 0  0  0  0  1  1  0  0  0  1  0  3
 1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  3
 0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  3
 0  0  0  0  0  0  1  1  0  0  0  0  0  0  5
 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  1
 0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  1
 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0  0  0  1
```



NOMBRE DE PASSAGES DANS NCOUP 12376
NOMBRE DE PASSAGES DANS NFORM 3811
NOMBRE DE PASSAGES DANS NTEST 243
NOMBRE DE CAS POTITIFS 1
FIN DU TRAITEMENT