N° 40. — Sur le nombre d'isomères possibles dans une molécule carbonée; par M. DELANNOY.

M. Friedel a posé, dans l'*Intermédiaire des mathématiciens*, la question suivante :

« Étant données n boules garnies chacune de quatre crochets placés symétriquement, trouver le nombre des arrangements possibles des n boules accrochées les unes aux autres de façon à former un ensemble, chaque boule étant attachée *au moins* à une autre et pouvant en recevoir jusqu'à quatre.

« Le problème a été résolu par Cayley.

« Mais il serait intéressant pour les chimistes de savoir, d'abord s'il existe une méthode générale simple de le résoudre autrement que par des constructions graphiques construites de proche en proche et dans ce cas d'avoir cette méthode.

« Une note abrégée sur le travail de M. Cayley se trouve dans les *Berichte der deutschen Gesellschaft* (t. **8**, p. 1056; 1875). Un mathématicien rendrait service aux chimistes en publiant dans un journal de chimie une *sorte* de traduction du travail de M. Cayley ou au moins de la note des *Berichte* et la rendant aussi accessible que possible aux savants qui ne sont pas des mathématiciens proprement dits. »

Je n'ai pas pu me procurer le mémoire de Cayley; je n'ai eu sous les yeux que la note des *Berichte* qui, malgré quelques inexactitudes, m'a donné une idée du procédé qu'avait pu employer Cayley. Il doit être analogue au procédé suivant, dont je me suis servi pour résoudre le problème.

Les enchaînements de boules forment des arbres géométriques, que nous distinguerons en arbres à centre unique, c'est-à-dire sortant d'un seul nœud, et en arbres à deux centres, c'est-à-dire sortant de deux nœuds convenablement choisis et réunis entre eux.

Le nombre des arbres à deux centres dépend de celui des arbres à un centre et ce dernier dépend, à son tour, de celui des *arbres-racines* ou *tiges* (1), qui servent à former les arbres à un centre.

(1) La note des *Berichte* appelle *würzelbaüme* ces *arbres-racines;* nous les désignerons sous le nom de *tiges*, pour éviter toute confusion avec les arbres à un ou à deux centres.

Il s'agit donc, avant tout, de déterminer le nombre des *tiges*.

Les tiges. — Les *tiges* peuvent avoir une, deux ou trois branches.

Une *tige* de hauteur h, a une branche de hauteur h; la hauteur de ses autres branches (s'il en existe), peut varier de 1 à h.

Les *tiges* à une branche et à n nœuds, de hauteur h, s'obtiennent en greffant sur un nœud les *tiges* à une, deux ou trois branches et à $(n-1)$ nœuds, de hauteur $h-1$.

Les *tiges* à deux branches et à n nœuds, de hauteur h, s'obtiennent en greffant sur un même nœud, deux *tiges* à une, deux ou trois branches, contenant ensemble $(n-1)$ nœuds, la hauteur de l'une de ces *tiges* étant $(h-1)$, et celle de l'autre variant de 0 à $h-1$.

Les *tiges* à trois branches et à n nœuds, de hauteur h, s'obtiennent en greffant sur un nœud unique trois *tiges* à une, deux ou trois branches, contenant à elles trois $(n-1)$ nœuds, la hauteur de l'une d'elles étant $(h-1)$ et celle des deux autres variant de 0 à $h-1$.

On voit qu'en procédant ainsi, on peut obtenir les *tiges* de hauteur h au moyen des *tiges* de hauteur moindre.

Ce mode de construction permet d'établir le tableau ci-après, qui donne le nombre des *tiges* jusqu'à $n=9$.

Afin de bien faire comprendre le mode de formation de ce tableau, nous allons indiquer le détail des opérations effectuées pour obtenir, par exemple, le nombre des *tiges* à 8 nœuds, de hauteur 4, à une, deux et trois branches.

Nous avons le nombre des *tiges* à une branche en additionnant le nombre des *tiges* à une, deux et trois branches et à 7 nœuds, de hauteur 3, savoir : $4+8+3=15$.

Le nombre des *tiges* à deux branches s'obtient en prenant :

Les *tiges* contenant 1 nœud (dans le tableau il y en a 1) avec les *tiges*, de hauteur 3, contenant 6 nœuds (il y en a 8); puis les *tiges* contenant 2 nœuds (il y en a 1) avec les *tiges* de hauteur 3 contenant 5 nœuds (il y en a 3); et enfin les *tiges* contenant 3 nœuds (il y en a 2) avec les *tiges* de hauteur 3 contenant 4 nœuds (il y en a 1).

Ce que nous mettrons sous la forme :

1, 6................................	$1.8=8$
2, 5................................	$1.3=3$
3, 4................................	$2.1=2$
Total..................	13

1. — *Tableau des tiges.*

VALEURS DE n.	HAUTEUR 0.	HAUTEUR 1.			HAUTEUR 2.			HAUTEUR 3.			HAUTEUR 4.			HAUTEUR 5.			HAUTEUR 6.			HAUTEUR 7.			HAUTEUR 8.		
		Branche			Branche			Branche			Branche			Branche			Branche			Branche			Branche		
		1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.
1	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
2	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
3	»	»	1	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
4	»	»	»	1	1	1	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
5	»	»	»	»	1	2	1	2	1	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
6	»	»	»	»	»	2	2	4	3	1	3	1	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»
7	»	»	»	»	»	2	3	4	8	3	8	4	1	4	1	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»
8	»	»	»	»	»	1	3	5	13	9	15	13	4	13	5	1	5	1	»	1	»	»	»	»	»
9	»	»	»	»	»	1	3	4	22	17	27	33	14	32	19	5	19	6	1	6	1	»	1	»	»

Nous aurons de même pour les *tiges* à trois branches :

1, 1, 5	1.1.3 = 3
1, 2, 4	1.1.1 = 1
Total	4

Les arbres à un centre. — Les arbres à un centre ont deux, trois ou quatre branches.

Un arbre à un centre de hauteur h a deux branches de hauteur h; la hauteur des autres branches (s'il en existe) varie de 1 à h.

Les arbres à un centre, à deux, trois ou quatre branches, et à n nœuds, de hauteur h, s'obtiennent en greffant sur un centre unique, respectivement deux, trois ou quatre *tiges* contenant ensemble $(n-1)$ nœuds ; deux de ces *tiges* sont de hauteur $(h-1)$; les autres (s'il en existe) ont une hauteur variant de 0 à $h-1$.

Nous trouverons dans le tableau I tous les éléments nécessaires pour construire le tableau des arbres à un centre.

Supposons, par exemple, que l'on veuille le nombre des arbres à un centre comprenant 10 nœuds. En ~~employant~~ la notation employée pour les *tiges*, nous aurons :

Hauteur 2 — 3 branches.

1, 4, 4	1.1.1 = 1
2, 3, 4	1.1.1 = 1
3, 3, 3	1.1.1 = 1
	3

Hauteur 2 — 4 branches.

1, 1, 3, 4 .	1.1.1.1 = 1
1, 2, 2, 4 ..	1.1 1.1 = 1
1, 2, 3, 3 ..	1.1.1.1 = 1
2, 2, 2, 3 ..	1.1.1.1 = 1
	4

Hauteur 3 — 2 branches.

3, 6..........	1.4 = 4
2, 5..........	2.4 = 8
	12

Hauteur 3 — 3 branches.

1, 3, 5	1.1.4 = 4
1, 4, 4 ... (*a*)	$1.\frac{2.3}{1.2} = 3$
2, 3, 4	1.1.2 = 2
3, 3, 3	2.1.1 = 2
	11

Hauteur 3 — 4 branches.

1, 1, 3, 4 ..	1.1.1.2 = 2
1, 2, 3, 3 ..	1.1.1.1 = 1
	3

Hauteur 4 — 2 branches

4, 5..........	1.3 = 3

Hauteur 4 — 3 branches.

1, 4, 4	1.1.1 = 1

RÉCAPITULATION

3
4
12
11
3
3
1
Total : 37

(*a*) Il y a lieu de remarquer que, lorsqu'on doit combiner ensemble des *tiges* ayant le même nombre de nœuds et la même hauteur, il ne faut pas prendre le produit des nombres trouvés dans le tableau I, mais bien le nombre des combinaisons complètes que l'on peut former avec ces nombres. Ainsi, pour les deux *tiges* à 4 nœuds, de hauteur 2, il ne faut pas prendre 2×2, mais $\frac{2(2+1)}{1.2}$. Toutefois si les facteurs sont égaux à 1, on peut laisser subsister le produit 1.1.1, car le nombre des combinaisons complètes $\frac{(2+1)(1+1)1}{1.2.3} = 1$.

II. — *Tableau des arbres à un centre.*

VALEURS de n.	HAUTEUR 0.	HAUTEUR 1. Branche			HAUTEUR 2. Branche			HAUTEUR 3. Branche			HAUTEUR 4. Branche			HAUTEUR 5. Branche			HAUTEUR 6. Branche			TOTAUX.
		2.	3.	4.	2.	3.	4.	2.	3.	4.	2.	3.	4.	2.	3.	4.	2.	3.	4.	
1	1	«	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	1
2	»	0	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	0
3	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	1
4	»	»	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	1
5	»	»	»	1	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	2
6	»	»	»	»	1	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	2
7	»	»	»	»	2	2	1	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	6
8	»	»	»	»	1	3	2	2	1	»	»	»	»	»	»	»	»	»	»	9
9	»	»	»	»	1	3	4	7	3	1	1	»	»	»	»	»	»	»	»	20
10	»	»	»	»	»	3	4	12	11	3	3	1	»	»	»	»	»	»	»	37
11	»	»	»	»	»	2	5	23	24	12	14	4	1	1	»	»	»	»	»	86
12	»	»	»	»	»	1	4	30	51	28	39	19	4	4	1	»	»	»	»	181
13	»	»	»	»	»	1	4	42	88	66	108	63	20	13	5	1	1	»	»	422
14	»	»	»	»	»	»		47			244			84			5		»	»

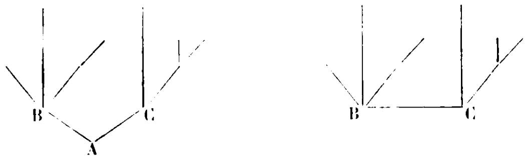
Nous avons ajouté à ce tableau les arbres à un centre et à deux branches, de 14 nœuds, qui nous serviront à trouver le nombre des arbres à deux centres, de 13 nœuds.

Les arbres à deux centres. — Dans les arbres bi-centriques, il sort de chaque centre une, deux ou trois branches.

Les arbres à deux centres, de hauteur h, ont, pour chaque centre, une branche de hauteur h; la hauteur des autres branches (s'il en existe) varie de 1 à h.

Le nombre des arbres à deux centres et à n nœuds, de hauteur h, est égal au nombre des arbres à un centre, à deux branches et à $(n+1)$ nœuds, de hauteur $(h+1)$.

En effet, si l'on prend l'un quelconque des arbres à un centre, de hauteur $(h+1)$, à deux branches contenant $(n+1)$ nœuds, on peut le remplacer par un arbre bi-centrique à n nœuds, de hauteur h en supprimant le nœud A et réunissant les nœuds B et C.



On peut donc, au moyen du tableau II, former le tableau suivant :

III. — *Tableau des arbres à deux centres.*

VALEURS de n.	HAUTEUR 0.	HAUTEUR 1.	HAUTEUR 2.	HAUTEUR 3.	HAUTEUR 4.	HAUTEUR 5.	HAUTEUR 6.	TOTAUX.
1	»	»	»	»	»	»	»	0
2	1	»	»	»	»	»	»	1
3	»	»	»	»	»	»	»	0
4	»	»	1	»	»	»	»	1
5	»	»	1	»	»	»	»	1
6	»	»	2	1	»	»	»	3
7	»	»	1	2	»	»	»	3
8	»	»	1	7	1	»	»	9
9	»	»	»	12	3	»	»	15
10	»	»	»	23	14	1	»	38
11	»	»	»	30	39	4	»	73
12	»	»	»	42	108	23	1	174
13	»	»	»	47	244	84	5	380

En réunissant les totaux des tableaux II et III, nous obtenons le total des arbres à un et à deux centres, c'est-à-dire le nombre des enchaînements de boules de $n=1$ à $n=13$.

IV. — *Tableau récapitulatif des arbres à un et à deux centres.*

VALEURS DE n.	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.	11.	12.	13.
Arbres à un centre.....	1	0	1	1	2	2	6	9	20	37	86	181	422
Arbres à deux centres..	0	1	0	1	1	3	3	9	15	38	79	174	380
Totaux	1	1	1	2	3	5	9	18	35	75	159	355	802

Il existe deux légères différences entre nos résultats et ceux de Cayley, qui a trouvé 183 arbres à un centre de 12 nœuds et 419 arbres à un centre de 13 nœuds.

Comme j'ai retrouvé les totaux de mon tableau IV par un procédé tout différent, que je vais exposer ci-après, je suis en droit de considérer mes chiffres comme exacts.

La méthode que nous avons employée permet d'obtenir les arbres sans construction graphique; mais elle ne les donne que de proche en proche, c'est-à-dire que pour trouver le nombre d'arbres à n nœuds, de hauteur h, il faut avoir obtenu toutes les *tiges* de hauteur moindre et d'un nombre de nœuds moindre.

Pour satisfaire au *desideratum* de M. Friedel, nous avons cherché une autre méthode fournissant directement le nombre d'enchaînements des n boules.

Voici celle que nous avons trouvée.

Désignons par b_α une boule qui a α crochets d'engagés.

Les boules accrochées deux à deux forment une chaîne, dont chaque extrémité est terminée par une boule b_1.

Si l'on accroche une boule au troisième crochet de l'une des boules de la chaîne, on commence ainsi une chaîne auxiliaire qui se termine par une boule b_1. Si au quatrième crochet on accroche une autre boule, on commence une seconde chaîne auxiliaire, qui se termine également par une boule b_1.

En désignant par B_α la somme des boules b_α, on aura donc :

$$B_1 = 2 + B_3 + 2B_4. \tag{1}$$

Comme on a, d'autre part,

$$B_1 + B_2 + B_3 + B_4 = n, \tag{2}$$

La combinaison des équations (1) et (2) donne

$$3B_4 + 2B_3 + B_2 = n - 2.$$

En résolvant cette équation indéterminée, pour une valeur donnée de n, on aura le nombre de boules b_1, b_2, b_3, b_4 entrant dans chaque chaîne. En permutant ces boules, dans l'intérieur de la chaîne, de toutes les manières possibles, en ayant soin d'éviter les répétitions, on aura le nombre de manières dont les n boules peuvent s'accrocher les unes aux autres.

Prenons, par exemple, $n = 8$. L'équation

$$3B_4 + 2B_3 + B_2 = 6,$$

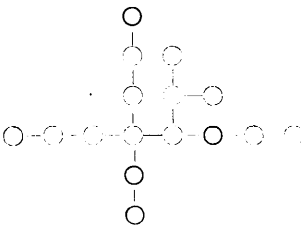
fournit les valeurs de B_2, B_3, B_4; en les portant dans l'équation (2) on obtient B_1.

Nous indiquons ces valeurs dans le tableau ci-après :

	B_4.	B_3.	B_2.	B_1.
I	0	0	6	2
II	0	1	4	3
III	0	2	2	4
IV	0	3	0	5
V	1	0	3	4
VI	1	1	1	5
VII	2	0	0	6

On peut donc former sept chaînes.

Reste à trouver le nombre des permutations des boules dans chaque chaîne. Pour simplifier l'écriture, représentons les boules b_2, b_3, b_4 par leurs indices et négligeons les boules b_1, de telle sorte que la chaîne ci-contre sera représentée par la formule $224_2^{2^2}3^2 22$.



La première chaîne donne une seule solution : 222222.

La seconde en donne quatre : 32222, 2322, 22322 et $23^2 22$.

La troisième chaîne donne cinq solutions : 3322, 3232, 3223, 2332 et $33^2 2$.

La quatrième ne donne qu'une solution : 333.

La cinquième en donne trois : 4222, 2422 et $24^2 2$.

La sixième, également trois : 432, 324, 243.

La septième, une seule : 44.

Donc, en tout, 18 solutions.

Quand une chaîne se bifurque à ses extrémités, il faut commencer par la branche la plus longue ou, en cas d'égalité de longueur, par la branche dont la première boule a le plus fort indice (c'est l'inverse pour l'extrémité finale).

Ainsi on n'écrira pas $34^{2^2}23^{3^2}22$.

Mais bien $224^3 23^{2^2} 32$.

Ceci est indispensable pour éviter les répétitions.

Nous avons appliqué cette méthode jusqu'à la valeur de $n = 13$ et nous avons trouvé identiquement les nombres inscrits sous la dénomination : *Totaux*, dans le tableau IV.

Il serait, sinon impossible, du moins bien difficile de trouver une formule générale donnant le nombre d'enchaînements des boules pour une valeur quelconque de n. Le problème en question est un cas particulier du problème non résolu des *partitions*, cas particulier peut-être plus difficile que le cas général par suite de la présence des chaînes auxiliaires.

On peut cependant donner une formule qui fournit le nombre C des enchaînements de boules, pour les premières valeurs de n.

Dans le cas de n pair et égal à $2p$, on a :

$$C = 1 + (p-1) + (p-2)(p-1) + \frac{p-3}{3}(2p^2 + 3p - 20)$$
$$+ \frac{p-4}{6}(2p^3 + 62p^2 - 537p + 1053) - (2p-9)^2.$$

Pour $n = 2p + 1$, on a :

$$C = 1 + 2(p-1) + (p-2)(3p-5) + \frac{p-3}{3}(14p^2 - 66p + 82)$$
$$+ \frac{p-4}{6}(18p^3 - 42p^2 - 471p + 1491) - 2[(2p-9)^2 + 1].$$

Dans ces formules, il faut remplacer par zéro les facteurs qui deviennent négatifs par suite des valeurs données à n ; on ne doit donc pas faire de réductions de termes.

De plus, ces formules, malgré leur complication, ne sont exactes que jusqu'à $n = 11$. Pour des valeurs supérieures de n, il faudrait ajouter de nouveaux termes, la valeur de C étant représentée par un polynôme de degré $p - 1$.