Mathematics and Society
University of Isfahan
http://math-sci.ui.ac.ir

Journal of Mathematics and Society
ISSN (print): 2345-6493, ISSN (on-line): 2345-6507
Vol. 8 No. 1 (2023), pp. 1-16.
© 2023 The Author(s)
http://ui.ac.ir

FROM PERMUTATION PATTERNS TO THE PERIODIC TABLE**

LARA PUDWELL

TRANSLATORS: SAEID ALIKHANI* AND MARYAM SAFAZDEH

Abstract. Permutation patterns is a burgeoning area of research with roots in enumerative combinatorics and theoretical computer science. This article first presents a brief overview of pattern avoidance and a survey of enumeration results that are standard knowledge within the field. Then, we turn our attention to a newer optimization problem of pattern packing. We survey pattern packing results in the general case before we consider packing in a specific type of permutation that leads to a new and surprising connection with physical chemistry. Note that the original paper has published in "Notices of the American Mathematical Society, 67, Number 7, 994-1001" and we have translated it into Farsi. This is just an extended abstract for Journal of Mathematics and Society.

1. Introduction

Let S_k be the set of all permutations on $[k] = \{1, 2, \ldots, k\}$. Given $\pi \in S_k$ and $\rho \in S_l$, we say that π contains ρ as a pattern if there exist $1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_\ell \leq k$ such that $\pi_{i_a} \leq \pi_{i_b}$ if and only if $\rho_a \leq \rho_b$. In this case we say that $\pi_{i_1} \ldots \pi_{i_\ell}$ is order-isomorphic to ρ, and that $\pi_{i_1} \ldots \pi_{i_\ell}$ is an occurrence or a copy of ρ in π. If π does not contain ρ, then we say that π avoids ρ.

Keywords: Permutation, Periodic table, Chemistry.

Communicated by Ali Reza Ashtafi.

Article Type: Translation Paper.

*Corresponding author.

The above abstract has been extracted by the translator from the original article (L. Pudwell, From Permutation Patterns to the Periodic Table, *Notices of the American Mathematical Society*, **67 994–1001.)

Received: 16-03-2022, Accepted: 24-01-2023, Published Online: 07-06-2023.

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501 .

The definition of pattern containment may be made more visual by considering the plot of π. In particular, for $\pi = \pi_1\pi_2\cdots\pi_k \in S_k$, the plot of π is the graph of the points (i, π_i) in the Cartesian plane.

Of particular interest are the sets $S_k(\rho) = \{\pi \in S_k | \pi \textit{ avoids } \rho\}$. For example,

$$S_4(123) = \{1432, 2143, 2413, 2431, 3142, 3214, 3241, 3412, 3421, 4132, 4213, 4231, 4312, 4321\}$$

and $\pi = 43512 \in S_5(123)$ since there is no increasing subsequence of length 3 in π.

2. Main Results

Much of the existing literature in permutation patterns studies the quantity $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$ for various patterns ρ.

Starting with the simplest case, it is immediate that $s_k(1) = 0$ if $k \geq 1$ since each digit of a nonempty permutation is a copy of the pattern 1. We also have that $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$ for $k \geq 0$, since the unique permutation of length avoiding 12 (resp., 21) is J_k (resp., I_k). For more information, please refer to the original paper.

Rather than focusing on packing in all permutations, the author of the original paper in the rest of the paper focus on packing patterns into permutations with extra restrictions. This family of packing problems will provide a new link between permutations and physical chemistry.

Definition 2.1. *Permutation π is an alternating permutation if*

$$\pi_1 < \pi_2 > \pi_3 < \pi_4 \cdots .$$

Alternating permutations are also known as zig-zag permutations or up-down permutations.

Theorem 2.2. *The maximum number of copies of* 123 *in an alternating permutation of length k is given by*

$$\nu(123, \widehat{I_k}) = \begin{cases} \dfrac{(k-2)(k^2-4k+6)}{6} & k \textit{ is even}, \\ \dfrac{(k-1)(k-2)(k-3)}{6} & k \textit{ is odd}. \end{cases}$$

3. Conclusion

This connection between pattern packing and physical chemistry is striking even to long-time permutation patterns researchers. Similarly, the quasi-polynomial sequence obtained for $\nu(123, \widehat{I_k})$ had no previous interpretation in the literature other than as a sequence of atomic numbers. What, if any, chemical interpretation is there for $\nu(123, \widehat{I_k})$ when $k > 10$? What other chemical or physical structures can be described in terms of pattern packing or pattern avoidance? Are there other combinatorial

http://dx.doi.org/10.22108//msci.2023.133089.1501

structures that give alternate ways to generate the sequences of atomic numbers of particular groups of chemical elements? The variety of applications of permutation patterns has grown tremendously in recent decades, and modeling electron orbitals can now be added to the list.

Saeid Alikhani
Department of Mathematical Sciences, Yazd University, 89195-741, Yazd, Iran
Email: alikhani@yazd.ac.ir

Maryam Safazadeh
Department of Mathematical Sciences, Yazd University, 89195-741, Yazd, Iran
Email: msafazadeh92@gmail.com

ریاضی و جامعه
شاپا (چاپی): ۲۳۴۵-۶۴۹۳، شاپا(الکترونیکی): ۲۳۴۵-۶۵۰۷
جلد ۸، شماره ۱ (۱۴۰۲)، صص. ۱-۱۶
The Author(s) ۱۴۰۲ ©
http://www.ui.ac.ir
http://math-sci.ui.ac.ir

از الگوهای جایگشتی تا جدول تناوبی**

لارا پادول
مترجمان: سعید علیخانی* و مریم صفازاده

چکیده. چکیده مترجم: این مقاله، نخست یک بررسی کوتاه درباره اجتناب از الگو و یک بررسی از نتایج شمارشی، که دانش استاندارد در این زمینه است، ارائه می‌دهد. سپس به یک مسئله بهینه‌سازی جدیدتر از دسته‌بندی الگو پرداخته می‌شود. نتایج دسته‌بندی الگو را در حالت کلی بررسی کرده و ارتباط جدید و شگفت‌انگیز با شیمی فیزیک مشاهده می‌شود.

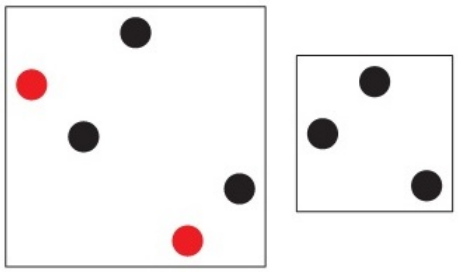
۱. متن اصلی

الگوهای جایگشتی بحثی از پژوهشِ در حال رشد با ریشه در ترکیبیات شمارشی و علوم کامپیوتر نظری است. اگرچه بخش زیادی از کار کنونی در این زمینه هنوز به اصول آن در علوم کامپیوتر مربوط است، گسترش سریع آن در طول دو دهۀ گذشته منجر به ارتباطات شگفت‌انگیزی با بخش‌های دیگر ریاضیات شده است. این مقاله در ابتدا یک بررسی اجمالی درباره اجتناب از الگو و یک بررسی از نتایج شمارشی که دانش استاندارد در این زمینه است، ارائه می‌دهد. سپس ما توجه خود را به یک مسئله بهینه‌سازی جدیدتر از دسته‌بندی الگو معطوف می‌کنیم. قبل از اینکه دسته‌بندی را در نوع خاصی از جایگشت مورد توجه قرار دهیم، که منجر به ارتباطی جدید و شگفت‌انگیز با شیمی فیزیک می‌شود، نتایج دسته‌بندی الگو را در حالت کلی بررسی می‌کنیم.

فرض کنیم S_k مجموعه همه جایگشت‌ها روی $[k] = \{1, 2, \ldots, k\}$ است. دو جایگشت $\pi \in S_k$ و $\rho \in S_\ell$ داده شده است، گوییم π به‌عنوان یک الگو شامل ρ است، اگر $1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_\ell \leq k$ وجود داشته باشد به‌طوری‌که $\pi_{i_a} \leq \pi_{i_b}$ اگر و تنها اگر $\rho_a \leq \rho_b$ (در این‌جا منظور از π_j یا ρ_j، همان تصویر j تحت جایگشت π یا ρ است، به‌عبارت‌دیگر $\pi_j = \pi(j)$ یا $\rho_j = \rho(j)$ (مترجمان)). در این حالت گوییم $\pi_{i_1} \cdots \pi_{i_\ell}$ یکریخت–مرتب با ρ و $\pi_{i_1} \cdots \pi_{i_\ell}$ یک پیشامد (وقوع) یا یک نسخه از ρ در π است. اگر π شامل ρ نباشد، آن‌گاه می‌گوییم π از ρ اجتناب می‌کند. برای مثال $\pi = 43512$ شامل الگوی $\rho = 231$ است زیرا ارقام $\pi_2\pi_3\pi_5 = 352$ دارای نظم مرتبط یکسان مانند ارقام ρ است؛ این یکی از چهار مثال ۲۳۱ در π است.

دبیرتخصصی رابط: علی‌رضا اشرفی
نوع مقاله: ترجمه ای
* نویسنده مسئول
**نوشته حاضر ترجمه مقاله زیر است:
L. Pudwell, From Permutation Patterns to the Periodic Table, *Notices of the American Mathematical Society*, **67** 994–1001.
تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۲/۲۵ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۱/۰۴ تاریخ انتشار آنلاین: ۱۴۰۲/۰۳/۱۷
http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

تعریف مهار الگو ممکن است با درنظر گرفتن طرح π بصری‌تر شود. به‌ویژه برای $\pi = \pi_1\pi_2\cdots\pi_k \in S_k$، طرح π نمودار نقاط (i,π_i) در صفحه دکارتی است. طرح‌های $\pi = ۴۳۵۱۲$ و $\rho = ۲۳۱$ در شکل ۱ داده شده است. به‌عنوان یک راه جایگزین برای اینکه ببینید π شامل ρ است، به این توجه کنید که اگر سطرها و ستون‌ها با نقاط قرمز را از طرح π حذف کنیم، نقاط (سیاه) باقی‌مانده، یک طرح از ρ تشکیل می‌دهند.



شکل ۱. نمودارهای $\rho = ۲۳۱$ و $\pi = ۴۳۵۱۲$

Figure 1: The plots of $\pi = 43512$ and $\rho = 231$

یکی از مجموعه‌های مورد علاقهٔ ویژه، مجموعه‌های $S_k(\rho) = \{\pi \in S_k | \pi$ از ρ اجتناب می‌کند$\}$ است. برای مثال

$$S_۴(۱۲۳) = \{۱۴۳۲, ۲۱۴۳, ۲۴۱۳, ۲۴۳۱, ۳۱۴۲, ۳۲۱۴, ۳۲۴۱, ۳۴۱۲, ۳۴۲۱, ۴۱۳۲, ۴۲۱۳, ۴۲۳۱, ۴۳۱۲, ۴۳۲۱\}$$

و $\pi = ۴۳۵۱۲ \in S_۵(۱۲۳)$، زیرا هیچ زیردنباله صعودی به طول ۳ در π وجود ندارد. یک پیشامد (وقوع) اخیر از اجتناب الگو قضیه اردوش–سکرش [1] است که به‌صورت زیر قابل بازنویسی است [۹]:

فرض کنیم $I_a = ۱۲\ldots a$ جایگشتی صعودی به‌طول a و $J_b = b(b-۱)\ldots ۱$ جایگشتی نزولی به‌طول b است. در این‌صورت اگر $k > (a-۱)(b-۱)$، آنگاه $S_k(I_a) \cap S_k(J_b) = \emptyset$. مطالعه جایگشت‌های الگو–اجتناب در نوع خود توسط کارهای کنوت[2] در کتاب هنر برنامه‌نویسی کامپیوتر [۱۲] آغاز شد که او نشان داد جایگشت $\pi \in S_k$ بعد از عبور از پشته، قابل مرتب‌سازی است اگر و تنها اگر $\pi \in S_k(۱۲۳)$. اجتناب الگویی همچنین ثابت کرده است که یک زبان مفید برای توصیف ورودی‌های قابل مرتب‌سازی از طریق انواع ماشین‌های دیگر است. تعمیم اجتناب الگویی برای مشخص‌کردن ویژگی‌های هندسی واریته شوبرت[3] استفاده شده است. به‌تازگی، پژوهشگران الگوهای جایگشتی را با نتایجی در ژنومیک، مکانیک آماری و موارد دیگری مرتبط کرده‌اند.

۲. شمارش

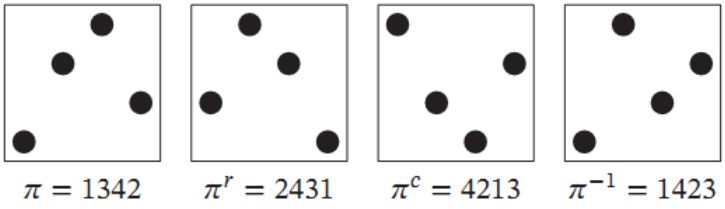
بیشتر نوشتارهای علمیِ موجود در الگوهای جایگشتی، کمیت $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$ را برای الگوهای مختلف ρ مطالعه می‌کنند. درحالی‌که نتایج موجود در این بخش ایده‌های اصلی در پژوهشِ الگوهای جایگشتی هستند، که ارتباط نزدیکی با نتیجه نهایی این مقاله ندارند. خواننده علاقمند به ارتباط با شیمی ممکن است بخواهد به بخش دسته‌بندی الگو برود.

با ساده‌ترین حالت شروع می‌کنیم، سریع این نتیجه حاصل می‌شود که اگر $k \geq ۱$ آنگاه $s_k(۱) = ۰$، چرا که هر رقم از جایگشت ناتهی یک کپی از الگوی ۱ است. همچنین برای $k \geq ۰$ داریم $s_k(۱۲) = s_k(۲۱) = ۱$ ، زیرا جایگشت یکتا به طول k که از ۱۲ (به‌ترتیب ۲۱) اجتناب می‌کند برابر است با J_k (به‌ترتیب I_k).

[1] Erdös-Szekeres [2] Knuth [3] Schubert varieties

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

این حقیقت که $s_k(۱۲) = s_k(۲۱)$ حالتی خاص از یک پدیده کلی‌تر است. درصورتی‌که برای همه kها $s_k(\rho) = s_k(\rho^*)$، گوییم ρ و ρ^* ویلف–هم‌ارز هستند. تعدادی از هم‌ارزی‌های ویلف با درنظرگرفتن طرح یک جایگشت، مانند شکل‌های ۱ و ۲ مشخص می‌شوند. همه نقاط در طرح π در مربع $[۱,k] \times [۱,k]$ قرار دارند و بنابراین ممکن است تقارن‌های مختلف مربع را اعمال کنیم که برگشت‌ها را روی مجموعه S_k به‌دست آوریم. برای $\pi \in S_k$، تعریف می‌کنیم $\pi^r = \pi_k \cdots \pi_۱$ و $\pi^c = (k+۱-\pi_۱)\cdots(k+۱-\pi_k)$ که به‌ترتیب معکوس و مکمل π نامیده می‌شوند. توجه کنید که طرح π^r از انعکاس طرح π در امتداد خط عمودی در $\frac{k+۱}{۲}$ گرفته می‌شود و π^c از انعکاس طرح π در امتداد خط افقی در $\frac{k+۱}{۲}$. هم‌ارزی مهم دیگری را با در نظر گرفتن $\pi^{-۱}$ به‌دست می‌آوریم که طرح π را روی خط $y=x$ منعکس می‌کند. برای مثال نمودارهای $\pi = ۱۳۴۲$ و $\pi^r = ۲۴۳۱$ و $\pi^c = ۴۲۱۳$ و $\pi^{-۱} = ۱۴۲۳$ در شکل ۲ نشان داده شده‌اند. توجه کنید که اگر π شامل ρ باشد، آن‌گاه π^r شامل ρ^r، π^c شامل ρ^c و $\pi^{-۱}$ شامل $\rho^{-۱}$ است. بنابراین این برگشت‌ها روی S_k یک نگاشت دوسویی نیز بین $S_k(\rho)$، $S_k(\rho^r)$، $S_k(\rho^c)$ و $S_k(\rho^{-۱})$ ایجاد می‌کند. به‌عنوان یک نتیجه، برای هر الگوی ρ، ρ ویلف–هم‌ارز با ρ^r، ρ^c و $\rho^{-۱}$ است. این ویلف–هم‌ارزها که از عمل گروه دوجهی روی طرح π نتیجه می‌شود، به‌عنوان ویلف–هم‌ارزهای بدیهی شناخته می‌شوند.



شکل ۲. نمودارهای $\pi = ۱۳۴۲$ و $\pi^r = ۲۴۳۱$ و $\pi^c = ۴۲۱۳$ و $\pi^{-۱} = ۱۴۲۳$ از چپ به راست

Figure 2: The plots of $\pi = 1342$, $\pi^r = 2431$, $\pi^c = 4213$ and $\pi^{-1} = 1423$

با ویلف–هم‌ارز بدیهی، داریم:

$$s_k(۱۳۲) = s_k(۲۱۳) = s_k(۲۳۱) = s_k(۳۱۲),\ \ s_k(۱۲۳) = s_k(۳۲۱).$$

در حقیقت، برای هر $\rho \in S_۳$ نتیجه می‌شود $s_k(\rho) = \frac{\binom{۲k}{k}}{k+۱}$. به حالت $s_k(۱۳۲)$ توجه کنید. داریم $s_۰(۱۳۲) = s_۱(۱۳۲) = ۱$. حال، $\pi \in S_k(۱۳۲)$ درنظر بگیرید و فرض کنیم که $\pi_i = k$. برای هر π_a و π_b با $a < i < b$، باید $\pi_a > \pi_b$؛ در غیر این‌صورت $\pi_a k \pi_b$ یک الگوی ۱۳۲ شکل می‌دهد. از آن‌جا که $\pi_۱ \cdots \pi_{i-۱}$ و $\pi_{i+۱} \cdots \pi_k$ هم باید از ۱۳۲ اجتناب کنند، ایجاب می‌کند که

$$s_k(۱۳۲) = \sum_{i=۱}^{k} s_{i-۱}(۱۳۲) \cdot s_{k-i}(۱۳۲).$$

به‌راحتی قابل بررسی است که $s_k(\rho) = \frac{\binom{۲k}{k}}{k+۱}$ در این رابطهٔ بازگشتی صدق می‌کند و با مقادیر اولیه مورد نیاز مطابقت دارد. توجه کنید که $s_k(\rho)$ عدد kام کاتالان است. جایگشت‌های الگو–اجتناب، تنها یکی از صدها مباحثی است که دارای زمینه‌های ترکیبیاتی شمارشی هستند. مثلاً استنلی[۴] [۱۶] بیش از ۲۰۰ پیشامد از دنباله مشهور اعداد کاتالان را جمع‌آوری کرده است.

[4] Stanley

همچنین تعدادی نگاشت دوسویی بین $S_k(۱۲۳)$ و $S_k(۱۳۲)$ وجود دارد که ارقام مختلف را حفظ می‌کند. برای مثال، متن بونا[۵] در [۷] را ببینید.

اگرچه $s_k(\rho)$ برای الگوهای به‌طول حداکثر ۳ فقط به k و $|\rho|$ بستگی دارد، اما حالت کلی پیچیده‌تر است. مشخص است که اگر $\rho \in S_۴$، آنگاه ρ ویلف–هم‌ارز نسبت به ۱۳۴۲، ۱۲۳۴ یا ۱۳۲۴ است اما $s_k(۱۳۴۲)$، $s_k(۱۲۳۴)$ و $s_k(۱۳۲۴)$ برای k به‌قدر کافی بزرگ، سه مقدار متمایز هستند. بونا [۶] نشان داد که دنباله $s_k(۱۳۴۲)$ دارای یک تابع مولد جبری غیرگویا است. گسل [۱۰] نشان داد که دنباله $s_k(۱۲۳۴)$ دارای یک تابع مولد هولونرم غیرجبری است. اگرچه فرمول کلی شناخته شده برای $s_k(۱۳۲۴)$ وجود ندارد و درک بهتر ساختار $S_k(۱۳۲۴)$ برای k بزرگ یک بخش فعال در حال پیشرفت از پژوهش است.

الگوهایی که تاکنون در مورد آن‌ها بحث کردیم به‌عنوان الگوهای جایگشتی کلاسیک شناخته می‌شوند. تعدادی از تغییرات درنظر گرفته شده است که شامل الگوهای متوالی (جایی‌که ارقام ρ باید در موقعیت‌های مجاور π ظاهر شوند)، الگوهای پیوندی (یک ترکیب بین الگوهای متوالی و کلاسیک) و الگوهای دوگوشی (که روی اندازه‌های نسبی ارقامی که یک کپی از ρ تشکیل می‌دهند، و نه فقط در موقعیت‌های آن‌ها، محدودیت‌هایی ایجاد می‌کند) است. الگوهای بارد، یعنی جایی‌که π از ρ اجتناب می‌کند، مگر آن‌که ρ بخشی از یک الگوی مشخص بزرگتر از π باشد، در توصیف جایگشت‌های قابل مرتب‌سازی پس از عبور از پشته و در توصیف ویژگی‌های هندسی از واریته شوبوت مفید بوده‌اند. انواع دیگر سوالات شمارشی نیز مورد توجه هستند. پژوهشگران کلمات الگو–اجتناب، افرازهای مجموعه‌ای، افرازهای اعداد صحیح، مسیرهای مشبک و دیگر اشیا ترکیبی با تعاریف مناسب از الگوها را برشمرده‌اند. اجتناب الگویی به خودی خود یک حالت خاص از سوال عمومی‌تر مورد مطالعه است؛

$$S_{k,c}(\rho) = \{\pi \in S_k | \text{است } \rho \text{ از کپی } c \text{ شامل } \pi\}$$

تاکنون ما روی وضعیتی که $c = ۰$ باشد، تمرکز کرده‌ایم. برای بعضی الگوهای خاص ρ، $|S_{k,c}(\rho)|$ برای $c \geq ۱$ شناخته شده است، اما در کل، سوالِ مهار الگو سخت است. تاریخچهٔ جایگشت‌های الگو–اجتناب بسیار گسترده است، اما در ادامه این مقاله روی دسته‌بندی‌های الگو متمرکز می‌شویم. به‌عبارت دیگر با یک الگوی ρ، حداکثر مقدار c را درنظر می‌گیریم (به‌عنوان تابعی از k داده شده) که $S_{k,c}(\rho)$ برای آن ناتهی است.

۳. دسته‌بندی

در این بخش، حداکثر تعداد کپی از ρ را درنظر می‌گیریم که می‌تواند در یک جایگشت به طول k رخ دهد. فرض کنیم $\nu(\rho, \pi)$ تعداد رُخدادهای ρ در π باشد. اگر بخواهیم $\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)$ را تعیین کنیم، سودمند است که به‌جای اینکه فقط تعداد کپی‌ها را گزارش کنیم، درصد کپی‌های ρ از همه زیردنباله‌های به طول $|\rho|$ در π را گزارش دهیم.

تعریف ۱.۳. چگالی دسته‌بندی ρ که با $d(\rho)$ نشان داده می‌شود، به‌صورت زیر است:

$$d(\rho) = \lim_{k \to \infty} \frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}.$$

در ادامه این بخش تاریخچهٔ دسته‌بندی را بررسی می‌کنیم. اگرچه برای آخرین ارتباط‌مان با شیمی فیزیک، ما به دسته‌بندی در نوع خاصی از جایگشت اهمیت می‌دهیم که در بخش بعدی به آن پرداخته می‌شود. خواننده‌ای که بیشتر از دسته‌بندی الگویی

[5] Bóna

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

به این ارتباط شیمی علاقمند است، ممکن است تعریفِ مجموع در زیر را بخواند و سپس به بخش مربوط به جایگشت‌های متناوب بپردازد.

ساده‌ترین الگو به طول a برای دسته‌بندی کردن، الگوی افزایش یکنواخت است. داریم $d(I_a) = ۱$، زیرا هر زیردنباله از I_k به طول a یک کپی از I_a است. برای الگوهای کلی‌تر ممکن است در ابتدا مشخص نباشد که $d(\rho)$ وجود دارد، اما یک استدلال منتشر نشده از فرد گالوین[۶] (شرح داده شده توسط پرایس[۷] در [۱۵]) نشان می‌دهد که $\frac{\max_{\pi\in S_k}\nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$ برای $k \geq |\rho|$ ناافزایشی است. زیرا این دنباله، که به وضوح از پایین کراندار به ۰ است، همگرا می‌شود. نوع اصلی دیگر الگوی جایگشتی که می‌توانیم چیزی در مورد $d(\rho)$ بگوییم، الگوهای لایه‌ای است.

تعریف ۲.۳. مجموع جایگشت‌های $\alpha = \alpha_۱\cdots\alpha_a$ و $\beta = \beta_۱\cdots\beta_b$ که با $\alpha\oplus\beta$ نشان داده می‌شود، از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$\alpha\oplus\beta = \begin{cases} \alpha_i & ۱ \leq i \leq a \\ a+\beta_{i-a} & a+۱ \leq i \leq a+b \end{cases}$$

تعریف ۳.۳. یک جایگشت، جایگشت لایه‌ای است اگر بتوان آن‌را به‌فرم $J_{a_۱}\oplus J_{a_۲}\oplus\cdots\oplus J_{a_p}$ به‌ازای اعداد صحیح مثبت $a_۱$، ... و a_p، نوشت.

جایگشت نشان داده شده در شکل ۳ مثالی از یک جایگشت لایه‌ای است چون به فرم $J_۱\oplus J_۲\oplus J_۲\oplus J_۲\oplus J_۱$ است. اگرچه ساده‌ترین الگوی جایگشت لایه‌ای نابدیهی، $J_۲\oplus J_۱ = ۱۳۲$ است. استرامکویست[۸] [۱۷] نشان داد اگر ρ لایه‌ای باشد، آن‌گاه $\frac{\max_{\pi\in S_k}\nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$ توسط یک π لایه‌ای به‌دست آمده است. استرامکویست و بعدتر بارتن[۹] [۱۷] با تمرکز بر لایه $\pi\in S_k$ نشان دادند که $d(۱۳۲) = ۲\sqrt{۳}-۳ \simeq ۰/۴۶۴$ و نشان دادند که $\frac{\max_{\pi\in S_k}\nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$ هنگامی به‌دست آمده است که لایه بالایی از اندازه $a \simeq (\frac{۳-\sqrt{۳}}{۲})k$ بوده و ورودی‌های باقی‌مانده به‌صورت بازگشتی با یک جایگشت لایه‌ای ۱۳۲–دسته‌ای بهینه به‌طول $k-a$ پر شوند.

برای الگوی به طول ۴، پرایس [۱۵] نشان داد که $d(۱۴۳۲)$ از ریشه $x^۳ - ۱۲x^۲ + ۱۵۶x - ۶۴$ به‌دست آمده است و $d(۲۱۴۳) = \frac{۳}{۸}$. بعدتر آلبرت و همکاران [۱] نشان دادند که $d(۱۲۴۳) = \frac{۳}{۸}$. کران‌های برای $d(۱۳۲۴)$، $d(۱۳۴۲)$ و $d(۲۴۱۳)$ شناخته شده هستند. اما هنوز معلوم نشده است که آیا دقیق هستند یا نه؟ حالت ۱۳۲۴، این را نشان می‌دهد که ممکن است یک الگو، الگوی لایه‌ای باشد و اما تشخیص آن از روی چگالی دسته‌بندی ساده نباشد. انواع دسته‌بندی‌های دیگر برای هر دو الگوهای دسته‌بندی به جایگشت‌ها و کلمات وجود دارد (برای مثال، جایگشت با ارقام تکراری) [۵، ۸، ۱۱، ۱۸، ۱۹، ۲۰]، اما در حالت کلی، مسائل دسته‌بندی پیشرفت کندتری نسبت به مسائل اجتناب از الگو داشته است.

۴. دسته‌بندی در جایگشت‌های متناوب

به‌جای تمرکز روی دسته‌بندیِ همه جایگشت‌ها، در ادامه این مقاله بر روی دسته‌بندی الگوها به جایگشت‌هایی با محدودیت‌های بیشتر تمرکز خواهیم کرد. این خانواده از مسائلِ دسته‌بندی، پیوند جدیدی بین جایگشت‌ها و شیمی فیزیک فراهم خواهد کرد.

[6]Fred Galvin [7]Price [8]Stromquist [9]Barton

تعریف ۱.۴. جایگشت π یک جایگشت متناوب است اگر

$$\pi_1 < \pi_2 > \pi_3 < \pi_4 \cdots .$$

جایگشت‌های متناوب به نام جایگشت‌های زیگ–زاگ یا جایگشت‌های بالا–پایین نیز شناخته می‌شوند. آن‌ها را نخستین بار آندره[10] [۲، ۳] در قرن نوزدهم مطالعه کرد. فرض کنیم $\mathcal{A}_k$ مجموعه جایگشت‌های متناوب به طول k باشد. آندره نتیجه شگفت‌انگیزی را ثابت کرد که

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{|\mathcal{A}_k| x^k}{k!} = \sec(x) + \tan(x),$$

که یک تفسیر ترکیبیاتی برای بسط یک سری از توابع مثلثاتی ارائه می‌دهد.

حال، به‌جای تعریف چگالی دسته‌بندی که در بالا بیان شد، تعریف تعدیل شده زیر را درنظر می‌گیریم.

تعریف ۲.۴. چگالی دسته‌بندی متناوب ρ که با $d_A(\rho)$ نشان داده می‌شود، برابر است با

$$d_A(\rho) = \lim_{k\to\infty} \frac{\max_{\pi\in\mathcal{A}_k} \nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}}.$$

اگرچه برای شیمی و یا شیمی‌دان و نتایج آینده آن‌ها ضروری به‌نظر نمی‌رسد، اما خوانندهٔ علاقه‌مند ممکن است بخواهد $d_A(\rho)$ را با چگالی دسته‌بندی کلاسیک d_ρ که در بخش قبل معرفی شد، مقایسه کند. می‌دانیم $d(\rho)$ وجود دارد، زیرا

$$\frac{\max_{\pi\in S_k} \nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}},$$

نسبت به k ناافزایشی است. اگرچه وقتی توجه‌مان را به جایگشت‌های متناوب محدود می‌کنیم، موضوع دیگر برای $\frac{\max_{\pi\in\mathcal{A}_k} \nu(\rho,\pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$ اینگونه نبوده و این کسر ناافزایشی نیست . اگر $d_A(\rho)$ وجود داشته باشد، بی‌درنگ برای هر الگوی ρ، به دست می‌آوریم $d_A(\rho) \le d(\rho)$، زیرا $\mathcal{A}_k \subseteq S_k$، در واقع معلوم شده که برای هر الگوی ρ، $d_A(\rho) = d(\rho)$. چون $d(\rho)$ وجود دارد، ممکن است دنباله‌ای از جایگشت‌ها با $\tau_k \in S_k$ بسازیم به‌طوری‌که $\lim \frac{\nu(\rho,\tau_k)}{\binom{k}{|\rho|}} = d(\rho)$. اثبات این‌که $d_A(\rho) = d(\rho)$ به ساختاری بستگی دارد که هر نقطه در طرح τ_k را با یک جایگشت متناوب جایگزین می‌کند تا یک دنباله از جایگشت‌های متناوب σ_k با $\lim \frac{\nu(\rho,\sigma_k)}{\binom{k}{|\rho|}} = d(\rho)$ نیز تولید کند.

برای دیدن ارتباط با شیمی فیزیک، مسئله آخری که آن‌را درنظر می‌گیریم، دسته‌بندی I_a به یک جایگشت متناوب به طول k است. ما از قبل راه بهینه برای دسته‌بندی I_a به جایگشت دلخواه به طول k را می‌دانیم که آن‌را به I_k دسته‌بندی می‌کنیم، جایی‌که هر زیردنباله به طول a یک کپی از I_a است. اگرچه $I_k \notin \mathcal{A}_k$. برای رسیدگی به‌این، جایگشت متناوب $\widehat{I}_k$ را می‌سازیم

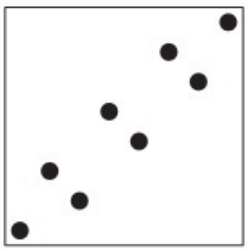
[10] André

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

که به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$\hat{I}_k = \begin{cases} \underbrace{J_1 \oplus J_2 \oplus \cdots \oplus J_2 \oplus J_1}_{\frac{k}{2}-1 \text{ بار}} & k \text{ زوج است.} \\ \underbrace{J_1 \oplus J_2 \oplus \cdots \oplus J_2}_{\frac{k-1}{2} \text{ بار}} & k \text{ فرد است.} \end{cases}$$

به‌عنوان یک مثال، طرح $\widehat{I}_k$ در شکل ۳ داده شده است.



شکل ۳. نمودار $\widehat{I}_8$

Figure 3: The plot of $\widehat{I}_8$

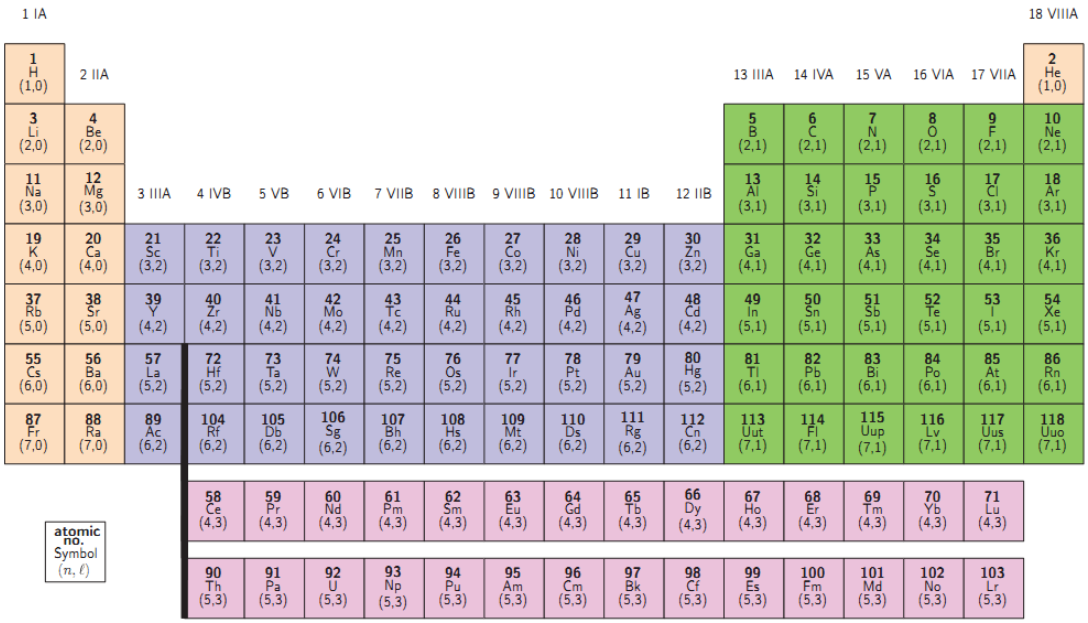
اگرچه برای مقادیر خاص k، $\frac{\nu(I_a, \widehat{I}_k)}{\binom{k}{a}} < 1$ ، ادعا می‌کنیم که $\widehat{I}_k$ ساختاری است که ثابت می‌کند $d_A(I_a) = 1$. برای موردی که $I_3 = 123$ را به $\pi = \widehat{I}_k$ دسته‌بندی می‌کنیم، توجه کنید که هر زیردنباله به طول ۳ هنوز هم یک ۱۲۳ الگو تشکیل می‌دهد، مگر اینکه ۲ رقم از زیردنباله از لایه یکسانی از $\widehat{I}_k$ بیابید. در حالی‌که $\binom{k}{3}$ زیردنباله به‌طول ۳ در $\widehat{I}_k$ وجود دارد، کمتر از $2\binom{k}{2}$ زیردنباله با دو رقم از لایه یکسان $\widehat{I}_k$ وجود دارد. بنابراین $\nu(I_3, \widehat{I}_k) \geq \binom{k}{3} - 2\binom{k}{2}$ و

$$1 \geq d_A(123) \geq \lim_{k\to\infty} \frac{\binom{k}{3} - 2\binom{k}{2}}{\binom{k}{3}} = \lim_{k\to\infty} \frac{k-8}{k-2} = 1.$$

از آنجا که یک زیردنباله به طول ۳ از $\widehat{I}_k$ تنها زمانی نمی‌تواند یک الگوی ۱۲۳ باشد که از ارقام مجاوری استفاده کند که باید به‌وسیله تعریف جایگشت متناوب در ترتیب نزولی باشد، در واقع $\widehat{I}_k$ جایگشتی متناوب به‌طول k با حداکثر تعداد از کپی‌های ۱۲۳ است. پیدا کردن مقدار دقیق $\nu(123, \widehat{I}_k)$ تمرینی ساده است. داریم:

قضیه ۳.۴. حداکثر تعداد کپی‌های ۱۲۳ در جایگشت متناوب به طول k از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$\nu(123, \widehat{I}_k) = \begin{cases} \frac{(k-2)(k^2-4k+6)}{6} & k \text{ زوج است،} \\ \frac{(k-1)(k-2)(k-3)}{6} & k \text{ فرد است.} \end{cases}$$



شکل ۴. جدول تناوبی عناصر شیمیایی

Figure 4: The periodic table of chemical elements

اثبات. در حالتی‌که k زوج است، $\frac{k}{۲}-۱$ لایه از اندازه ۲ و دو لایه از اندازه ۱ در $\widehat{I}_k$ وجود دارد. یک کپی از ۱۲۳ می‌تواند با استفاده از هر دو، یکی یا هیچ کدام از لایه‌ها از اندازه ۱ ساخته شود. اگر از هر دو لایه از سایز ۱ استفاده کنیم، فقط می‌ماند که یک لایه از اندازه ۲ انتخاب کنیم و سپس یک نقطه از لایه انتخاب کنیم که الگوی ۱۲۳ کامل شود. اگر از یک لایه از اندازه ۱ استفاده کنیم، ابتدا باید لایه از اندازه ۱ و سپس دو لایه از اندازه ۲ و یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. اگر از هیچ کدام از لایه‌های با اندازه ۱ استفاده نکنیم، آن‌گاه نیاز است که سه لایه مجزا از اندازه ۲ و سپس یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. بنابراین

$$۲\left(\frac{k}{۲}-۱\right)+۸\binom{\frac{k}{۲}-۱}{۲}+۸\binom{\frac{k}{۲}-۱}{۳}=\frac{(k-۲)(k^۲-۴k+۶)}{۶}$$

کپی از ۱۲۳ در $\widehat{I}_k$ وجود دارد، اگر k زوج است.

حالت فرد هم مشابه همین است، با این تنظیم که اکنون $\frac{k-۱}{۲}$ لایه از اندازه ۲ و یک لایه از اندازه ۱ در $\widehat{I}_k$ وجود دارد. $۴\binom{\frac{k-۱}{۲}}{۲}$ راه برای ساختن یک الگوی ۱۲۳ با استفاده از لایه اولیه از اندازه ۱ و دو لایه از اندازه ۲ وجود دارد. از طرف دیگر، باید سه لایه مجزا از اندازه ۲ و سپس یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. بنابراین

$$۴\binom{\frac{k-۱}{۲}}{۲}+۸\binom{\frac{k-۱}{۲}}{۳}=\frac{(k-۱)(k-۲)(k-۳)}{۶}.$$

کپی از ۱۲۳ در $\widehat{I}_k$ وجود دارد، هرگاه k فرد است. □

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

در حالی‌که این استدلال پیچیده نیست، خود اعداد جالب هستند. جدول ۱ مقادیر $\nu(۱۲۳, \widehat{I}_k)$ را، برای $۴ \leq k \leq ۱۰$، نشان می‌دهد. این دنباله $A۱۶۸۳۸۰$ در دایرة المعارف آنلاین دنبالهٔ اعداد صحیح است [۱۴]. اگرچه توصیف اولیه شاید تعجب‌آور باشد: این دنبالهٔ اعداد اتمی فلزات قلیایی خاکی جدول تناوبی است. برای تأکید شکل ۴ را ببینید. مقادیر $\nu(۱۲۳, \widehat{I}_k)$ مربوط به اعداد اتمی در ستون دوم است که به عنوان گروه $AII - ۲$ برچسب گذاری شده است. به‌عبارت دیگر، دنباله شبه چندجمله‌ای ۲، ۴، ۱۲، ۲۰، ۳۸، ۵۶، ۸۸، ⋯ نه تنها مقادیر $\nu(۱۲۳, \widehat{I}_k)$، بلکه اعداد اتمی هلیوم، بریلیوم، منیزیم، کلسیم و موارد دیگر را نیز به دست می‌دهد. این غیر منتظره است! اگرچه الگوهای جایگشتی در زمینه‌های متنوع ظاهر می‌شوند، ارتباط با شیمی فیزیک جدید و کاملاً متفاوت از سایر ظاهرهای انتزاعی‌تر الگوها است. در ادامهٔ این مقاله یک اثبات دوگانه ارائه می‌دهیم که مسأله دسته‌بندی الگوی‌مان را به زبان شیمی فیزیک پیوند میدهد.

جدول ۱. مقادیر $\nu(۱۲۳, \widehat{I}_k)$ برای $۴ \leq k \leq ۱۰$

Table 1: Values of $\nu(123, \widehat{I}_k)$ for $4 \leq k \leq 10$

k	4	5	6	7	8	9	10
$\nu(123, \widehat{I}_k)$	2	4	12	20	38	56	88

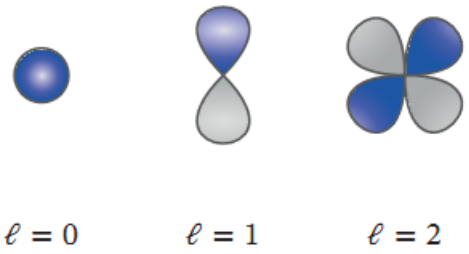
۵. شیمی فیزیک

در جدول تناوبی، عدد اتمی یک عنصر تعداد پروتون‌ها در یک اتم از آن عنصر است. در حالی‌که یون‌های مختلف وجود دارند، عدد اتمی تعداد الکترون در یک اتم خنثی را نیز می‌دهد. در مدل شرودینگر، الکترون‌ها در فضا در اطراف هسته اتم حرکت می‌کنند و از معادله موج شرودینگر برای پیش‌بینی اوربیتال‌های احتمالی الکترون استفاده می‌شود، یعنی نواحی که احتمال بیش‌تری برای یافتن الکترون‌ها وجود دارد. در فضای سه‌بعدی، برای توصیف اندازه، شکل و جهت اوربیتال، سه متغیر نیاز داریم. این‌ها عدد کوانتومی اصلی (n) (این عدد که همیشه عددی صحیح و مثبت است، بیانگر لایه‌ای است که الکترون در آن قرار دارد (مترجمان))، عدد کوانتومی زاویه‌ای (ℓ) (عدد کوانتومی زاویه ای، شکل اوربیتال را توصیف می‌کند که چند خط بعد به آن پرداخته خواهد شد (مترجمان)) و عدد کوانتومی مغناطیسی (m) (این عدد نشان‌دهنده سطح انرژی موجود در هر لایه الکترونی است (مترجمان)) هستند. جزئیات بیش‌تر را می‌توان در هر کتاب شیمی استاندارد مانند [۱۳] یافت.

عدد کوانتومی اصلی n با اندازه یک اوربیتال الکترونی مطابقت دارد. n به عنوان یک عدد صحیح مثبت داده می‌شود و مقادیر بزرگتر n مربوط به اوربیتال‌های بزرگتر است. گفته می‌شود تمام اوربیتال‌هایی که عدد کوانتومی اصلی یکسانی دارند در یک پوسته اتم قرار دارند.

عدد کوانتومی زاویه‌ای (ℓ)، شکل یک اوربیتال را می‌دهد. در حالی‌که ممکن است چندین الکترون در یک پوسته باشند، عدد کوانتومی زاویه‌ای اوربیتال‌های یک پوسته را به زیرپوسته‌ها تقسیم می‌کند. مقادیر بزرگتر n، فضای بیش‌تری را برای اشکال مختلف زیرپوسته‌ها فراهم می‌کند. با توجه به n، ℓ یک عدد صحیح است با شرط $۰ \leq \ell \leq n - ۱$. اشکال اوربیتال‌ها برای مقادیر کوچک ℓ در شکل ۵ نشان داده شده است. برای تعیین جفت‌های (n, ℓ) که زیرپوسته‌ها را در یک اتم خاص توصیف می‌کنند، رنگ جدول تناوبی ارائه شده در شکل ۴ را در نظر بگیرید. هر رنگ با یک مقدار ℓ مطابقت دارد. از آن‌جا که $\ell \leq n - ۱$، اولین عناصر با مقدار ℓ خاص، دارای عدد اصلی $n = \ell + ۱$ هستند. ردیف‌های بعدی عناصر با مقدار ℓ خاص n به اندازه‌ی ۱ افزایش می‌یابد. این یک نگاشت مستقیم از یک عنصر به یک جفت (n, ℓ) می‌دهد. هر جفت

(n,ℓ) که مربوط به‌عنصری با عدد اتمی کوچکتر باشد نیز در عنصر اصلی امکان پذیر است. برای مثال کلسیم (عدد اتمی ۲۰) به‌صورت $\ell = 0$ سایه زده می‌شود. این ردیف چهارم اوربیتال‌های $\ell = 0$ است. بنابراین کلسیم دارای اوربیتال‌هایی با $(n,\ell) = (4,0)$ است. با این‌حال، با نگاه کردن به‌عناصری با اعداد اتمی کوچکتر، می‌بینیم که کلسیم دارای اوربیتال‌هایی با $(n,\ell) \in \{(1,0),(2,0),(2,1),(3,0),(3,1)\}$ است. توجه کنید که $(n,\ell) = (3,2)$ ابتدا در اسکاندیم (عدد اتمی ۲۱) رخ می‌دهد، بنابراین کلسیم زیر پوسته (لایه فرعی) $(n,\ell) = (3,2)$ ندارد.



شکل ۵. اشکال مداری الکترونی ساده

Figure 5: Simple electron orbital shap

اگرچه تنها یک راه برای جهت‌دهی یک مدار $\ell = 0$ (کروی) به دور هسته اتم وجود دارد، زیرپوسته‌ها با $\ell \geq 1$ را می‌توان به روش‌های مختلف جهت گیری کرد. عدد کوانتومی مغناطیسی m جهت اوربیتال را در فضا توصیف می‌کند. با توجه به n و m، ℓ به‌عنوان یک عدد صحیح گزارش می‌شود به طوری که $-\ell \leq m \leq \ell$. برای مثال، یک اوربیتال قطبی $(\ell = 1)$ سه جهت ممکن دارد، یعنی $m = -1$، $m = 0$ و $m = 1$، که می‌تواند به‌عنوان جهت‌گیری این شکل، مداری در امتداد محور x، محور y یا محور z در فضا در نظر گرفته شود.

در نهایت یک عدد کوانتومی چهارم وجود دارد که مستقل از سه عدد دیگر است که به آن عدد کوانتومی اسپین (s) می‌گویند. برای هر ترکیب معتبری از (n,ℓ,m) دو اسپین ممکن برای یک الکترون وجود دارد.

به‌طور خلاصه در مدل شرودینگر از اتم، جفت الکترون‌ها با چند عدد صحیح (n,ℓ,m) در تناظر یک‌به‌یک هستند به‌طوری‌که $n \geq 1$، $0 \leq \ell \leq n-1$ و $m \leq \ell$. با این‌حال دانستن بالاترین مقدار n که در یک اتم خاص ظاهر می‌شود به این معنی نیست که همه چندتایی های (n,ℓ,m) به‌دنبال این نابرابری‌ها ظاهر می‌شوند. مشاهده کنید که در جدول تناوبی همیشه دو پوسته با اوربیتال‌های شکل ℓ قبل از معرفی اوربیتال‌هایی با شکل $\ell + 1$ وجود دارد.

۶. تناظر یک به یک

$\widehat{I_k} = J_1 \oplus J_2 \oplus \cdots$ را در نظر بگیرید. می‌خواهیم کپی‌های ۱۲۳ در $\widehat{I_k}$ را به چندتایی‌های معتبر (n,ℓ,m) از اعداد کوانتومی برای الکترون‌های فلزات قلیایی خاکی، پیوند دهیم.

ابتدا به عدد اسپین (چرخشی) (s) می‌پردازیم. همان‌طور که برای هر چندتایی (n,ℓ,m) معتبر، دو عدد اسپین وجود دارد، توجه داشته باشید که کپی‌های ۱۲۳ در $\widehat{I_k}$ به‌صورت جفت می‌آیند. به‌ویژه اگر $\pi_a\pi_b\pi_c$ یک الگوی ۱۲۳ در $\pi = \widehat{I_k}$ تشکیل دهد، آنگاه π_a، π_b و π_c باید از لایه‌های مختلف π باشد. فرض کنیم π'_b رقم دیگر در همان لایه‌ی π_b باشد. پس $\pi_a\pi'_b\pi_c$ دومین الگوی ۱۲۳ در $\widehat{I_k}$ است. دو کپی از ۱۲۳ که از لایه‌ی یکسان $\widehat{I_k}$ برای رقم دوم استفاده می‌کنند، مربوط به جفت الکترون‌هایی است که اعداد کوانتومی اصلی (n)، زاویه‌ای (ℓ) و مغناطیسی (m) یکسان دارند اما اعداد اسپینی متفاوتی دارند.

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

اکنون برای اعداد کوانتومی باقی‌مانده، m مقدار "۱" را در الگوی ۱۲۳ رمزگذاری می‌کند، ℓ لایه‌ی "۲" را رمزگذاری می‌کند و n مقدار "۳" را رمزگذاری می‌کند. برای دقیق‌تر بودن، لایه J_1 اولیه از $\widehat{I}_k$ را ۰ فراخوانی کنید و لایه‌های باقی‌مانده را که با لایه‌ی ۱ شروع می‌شود، برشمارید. یک کپی $\pi_a\pi_b\pi_c$ از ۱۲۳ در $\pi = \widehat{I}_k$ به روش زیر به چندین عدد صحیح نگاشته می‌شود: m لایه‌ای از $\widehat{I}_k$ است که π_a در آن یافت می‌شود. پس

$$m = \begin{cases} -\hat{m} & \pi_a \text{ کمترین داده لایه } \hat{m} \text{ است.} \\ \hat{m} & \pi_a \text{ بزرگترین داده لایه } \hat{m} \text{ است.} \end{cases}$$

$\ell+1$ لایه‌ای از $\widehat{I}_k$ است که π_b در آن یافت می‌شود. در نهایت با توجه به ℓ و π_c، $n = \pi_c - \ell - 3$ را محاسبه می‌کنیم. به‌طور شهودی، مقادیر بزرگتر n مربوط به شکاف بزرگتر بین لایه‌بندی π_b و π_c در $\widehat{I}_k$ است، اما با یک آفست (تعادل) مناسب برای اطمینان از مثبت بودن n.

به‌عنوان مثال، کپی‌های ۱۲۳ در $\widehat{I}_7 = 1325476 = J_1 \oplus J_2 \oplus J_2 \oplus J_2$ را در نظر بگیرید. ۲۰ کپی از ۱۲۳ در $\widehat{I}_7$ وجود دارد و این ۲۰ کپی مربوط به ۲۰ الکترون در یک اتم کلسیم است. همان‌طور که کپی‌های ۱۲۳ به‌صورت جفت می‌آیند، الکترون‌های موجود در کلسیم نیز به‌صورت ۱۰ جفت هستند که مربوط به ۱۰ چندتایی مختلف از اعداد کوانتومی (n,ℓ,m) است. ۲۰ نسخه از ۱۲۳ در $\widehat{I}_7$ به‌صورت جفت با چندتایی‌های (n,ℓ,m) متناظر آن‌ها در جدول ۲ آورده شده است. برای مثال هر دوی ۲۴۶ و ۲۵۶ کپی‌هایی از ۱۲۳ در $\widehat{I}_7$ هستند. هر دو عنصر اولیه‌ی خود را در لایه‌ی ۱ دارند، بنابراین هر دو با $\hat{m} = 1$ مطابقت دارند. از آن‌جایی که ۲، رقم کوچکتر در این لایه است، داریم $m = -1$. می‌بینیم که در هر دو کپی، π_j از لایه‌ی ۲ آمده است، بنابراین $\ell + 1 = 2$ یعنی $\ell = 1$. در نهایت $n = 6 - 1 - 3 = 2$. بنابراین این دو کپی با چندتایی $(2, 1, -1)$ مطابقت دارد. چندتایی‌های مربوط به دیگر (جفت) کپی‌های ۱۲۳ ممکن است به طور مشابه تایید شوند. لایه‌های $\widehat{I}_7$ با رنگ‌های مختلف برای ارجاع آسان در جدول ۲ مشخص شده‌اند.

جدول ۲. کپی‌های ۱۲۳ در $\widehat{I}_7 = 1325476$ که با چندتایی‌های (n,ℓ,m) از اعداد کوانتومی برای ۲۰ الکترون در یک اتم کلسیم مطابقت دارد

Table 2: Copies of 123 in $\widehat{I}_7 = 1325476$, which correspond to tuples (n,ℓ,m) of quantum numbers for the 20 electrons in an atom of calcium

copies	tuple	copies	tuple	copies	tuple
124,134	(1,0,0)	146,156	(2,1,0)	147,157	(3,1,0)
125,135	(2,0,0)	246,256	(2,1,-1)	247,257	(3,1,-1)
126,136	(3,0,0)	346,356	(2,1,1)	347,357	(3,1,1)
127,137	(4,0,0)				

ما همچنان باید نشان دهیم که نگاشت جفت‌های پیشامدهای ۱۲۳ در $\widehat{I}_k$ به چندتایی‌های صحیح، از نابرابری‌هایی تبعیت می‌کند که اعداد کوانتومی معتبر را تعیین می‌کنند.

ابتدا طبق ساختار، لایه‌ی ۰ از $\widehat{I}_k$ حاوی رقم ۱ است، در حالی‌که برای $L \le \frac{k-1}{2}$، لایه‌ی L شامل ارقام $2L$ و $2L+1$ است. وقتی k زوج باشد، لایه‌ی $\frac{k}{2}$ دارای رقم k است.

پیشامد $\pi_a\pi_b\pi_c$ از ۱۲۳ در $\widehat{I_k}$ را در نظر بگیرید. چون π_b از لایه‌ی $\ell+1$ می‌آید، می‌دانیم $\ell \geq 0$ و π_c از لایه $\ell+2$ یا بالاتر می‌آید، که این ایجاب می‌کند $\pi_c \geq 2(\ell+2)$. چون $n = \pi_c - \ell - 3$، داریم $n \geq 2(\ell+2) - \ell - 3 = \ell + 1 \geq 1$. همچنین $n \geq \ell + 1$ ایجاب می‌کند $\ell \leq n - 1$. در نهایت چون $|m|$ نشان‌دهنده‌ی لایه‌ی π_a و $\ell+1$ نشان دهنده‌ی لایه‌ی π_b است، همان‌طور که می‌خواستیم داریم $|m| + \ell \leq \ell + 1$ یا $|m| \leq \ell$. این‌ها دقیقاً همان محدودیت‌هایی است که قبلاً در مورد اعداد کوانتومی صحبت شد! توجه داشته باشید که یک مقدار جدید ℓ برای هر مقدار زوج k معرفی می‌شود، زیرا $\widehat{I_{2i}}$ یک لایه بیش‌تر از $\widehat{I_{2i-1}}$ دارد. این دقیقاً با فرکانس معرفی اشکال زیرپوسته جدید در جدول تناوبی مطابقت دارد.

۷. نتیجه

ارتباط بین دسته‌بندی الگویی و شیمی فیزیک حتی برای پژوهشگران قدیمیِ الگوهای جایگشت قابل توجه است. به‌طور مشابه، دنبالهٔ شبه چندجمله‌ای به‌دست آمده برای $\nu(123, \widehat{I_k})$ هیچ تفسیر قبلی در تاریخچه به‌جز دنباله‌ای از اعداد اتمی نداشت. در صورت وجود، چه تفسیر شیمی گونه‌ای برای $\nu(123, \widehat{I_k})$ وجود دارد، هرگاه $k > 10$؟ چه ساختارهای شیمیایی یا فیزیکی دیگری را می‌توان از نظر دسته‌بندی الگو یا اجتناب از الگو توصیف کرد؟ آیا ساختارهای ترکیبیاتی دیگری وجود دارد که راه‌های جایگزینی برای تولید دنباله‌های اعداد اتمی گروه‌های خاصی از عناصر شیمیایی ارائه دهد؟ تنوع کاربردهای الگوهای جایگشت در دهه‌های اخیر به شدت افزایش یافته است و اکنون می‌توان اوربیتال‌های الکترونی مدل سازی را به فهرست افزود.

مراجع

[1] M. H. Albert, M. D. Atkinson, C. C. Handley, D. A. Holton, and W. Stromquist, On packing densities of permutations, *Electron. J. Combin.* 9 (2002), no. 1.

[2] D. André, Developpments de secx et de tanx, *C. R. Acad. Sci. Paris* 88 (1879), 965–967.

[3] D. André, Mèmoire sur les permutations altern´ees, *J. Math.* 7 (1881), 167–184.

[4] R. W. Barton, Packing densities of patterns, *Electron. J. Combin.* 11 (2004), no. 1, Research Paper 80, 16.

[5] C. B. Presutti and W. Stromquist, *Packing rates of measures and a conjecture for the packing density of 2413, Permutation patterns*, London Math. Soc. Lecture Note Ser., vol. 376, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010, pp. 287–316.

[6] M. Bóna, Exact enumeration of 1342-avoiding permutations: a close link with labeled trees and planar maps, *J. Combin. Theory Ser. A* 80 (1997), no. 2, 257–272.

[7] M. Bóna, *Combinatorics of permutations*, Discrete Mathematics and its Applications (Boca Raton), Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2004. With a foreword by Richard Stanley.

[8] A. Burstein, P. Hästö, and T. Mansour, Packing patterns into words, *Electron. J. Combin.* 9 (2002/03), no. 2, Research paper 20, 13. Permutation patterns (Otago, 2003). MR2028289

[9] P. Erdös and G. Szekeres, A combinatorial problem in geometry, *Compositio Math.* 2 (1935), 463–470. MR1556929

[10] I. M. Gessel, Symmetric functions and P-recursiveness, *J. Combin. Theory Ser.* A 53 (1990), no. 2, 257–285, DOI 10.1016/0097-3165(90)90060-A. MR1041448

http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501

[11] P. A. Höstö, The packing density of other layered permutations, *Electron. J. Combin.* 9 (2002/03), no. 2, Research paper 1, 16. Permutation patterns (Otago, 2003). MR2028271

[12] D. Knuth, *The Art of Computer Programming*: Volume 1, Addison-Wesley, 1968.

[13] G. Miessler and D. Tarr, *Inorganic Chemistry*, 2nd edition, Prentice Hall, 1998.

[14] OEIS Foundation Inc., The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, 2019, oeis.org/A168380.

[15] A. L. Price, *Packing densities of layered patterns*, ProQuest LLC, Ann Arbor, MI, 1997. Thesis (Ph.D.)–University of Pennsylvania. MR2695616

[16] R. P. Stanley, *Catalan numbers, Cambridge University Press*, New York, 2015. MR3467982

[17] W. Stromquist, Packing layered posets into posets, preprint, 1993. Available at walterstromquist.com /publications.html.

[18] D. Warren, Optimal packing behavior of some 2-block patterns, *Ann. Comb.* 8 (2004), no. 3, 355–367, DOI 10.1007/s00026-004-0225-3. MR2161643

[19] D. Warren, *Optimizing the packing behavior of layered permutation patterns*, ProQuest LLC, Ann Arbor, MI, 2005. Thesis (Ph.D.)–University of Florida. MR2707381

[20] D. Warren, Packing densities of more 2-block patterns, *Adv. in Appl. Math.* 36 (2006), no. 2, 202–211, DOI 10.1016/j.aam.2005.06.004. MR2199989

سعید علیخانی
دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه یزد، یزد.
alikhani@yazd.ac.ir

سعید علیخانی استاد دانشکده علوم ریاضی دانشگاه یزد است. تحقیقاتش در حوزه نظریه گراف و ترکیبیات جبری می‌باشد. معرفی چندجمله‌ای احاطه‌گر گراف به عنوان یک چندجمله‌ای جدید وابسته به گراف‌ها، در رساله دکتری ایشان از فعالیت‌های اصلی و تاثیرگذاری بوده است که مورد توجه بسیاری از ریاضیدانان قرار گرفت. تاکنون ۵ پژوهشگر پسادکتری (از بنیاد نخبگان، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور و داخلی دانشگاه) و ۱۰ دانشجوی دکتری تحت نظارت و راهنمایی ایشان دانش آموخته شده‌اند.

مریم صفازاده
دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه یزد، یزد.
msafazadeh۹۲@gmail.com

مریم صفازاده دانشجوی دکتری ریاضی گرایش جبر و ترکیبیات دانشگاه یزد و تحت راهنمایی آقای دکتر سعید علیخانی است. ایشان به مباحث شمارشی تعداد انواع مجموعه‌های احاطه‌گر گراف علاقمند است.