

**SISTEM KONSTRUKSI ISOMER SENYAWA ALKANA MENGGUNAKAN
*K-CAYLEY TREE ADAPTIF***

***THE CONSTRUCTION OF THE ALKANE ISOMERS COMPOUNDS BY
USING K-CAYLEY TREE ADAPTIVE***

SRI ENDAH SURYA SOFIANI



**PROGRAM PASCASARJANA
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2013**

**SISTEM KONSTRUKSI ISOMER SENYAWA ALKANA MENGGUNAKAN
K-CAYLEY TREE ADAPTIF**

Tesis

Sebagai salah satu syarat untuk mencapai Gelar Master

**Program Studi
Teknik Informatika
Teknik Elektro**

Disusun dan diajukan oleh

SRI ENDAH SURYA SOFIANI

Kepada

**PROGRAM PASCASARJANA
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2013**

TESIS
SISTEM KONSTRUKSI ISOMER SENYAWA ALKANA MENGGUNAKAN
K-CAYLEY TREE ADAPTIF

Disusun dan diajukan oleh

Sri Endah Surya Sofiani

Nomor Pokok P2700211023

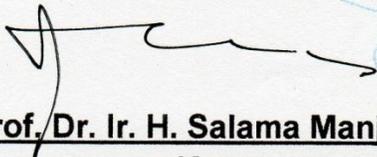
Telah dipertahankan di depan Panitia Ujian Tesis

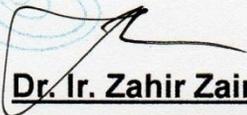
Pada tanggal 29 Juli 2013

dan dinyatakan telah memenuhi syarat

Menyetujui

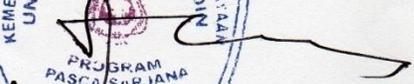
Komisi Penasihat,


Prof. Dr. Ir. H. Salama Manjang, MT
Ketua


Dr. Ir. Zahir Zainuddin, M.Sc
Sekretaris

Ketua Program Studi
Teknik Elektro




Prof. Dr. Ir. H. Salama Manjang, MT

Direktur Program Pascasarjana
Universitas Hasanuddin




Prof. Dr. Ir. Mursalim, M.Sc

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN TESIS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini

Nama : **Sri Endah Surya Sofiani**

N I M : **P2700211023**

Menyatakan bahwa tesis dengan judul "**SISTEM KONSTRUKSI ISOMER SENYAWA ALKANA MENGGUNAKAN *K-CAYLEY TREE ADAPTIF***" adalah benar-benar karya dan hasil pemikiran saya sendiri, jika pernyataan ini dikemudian hari terbukti tidak benar maka saya bersedia dikenakan sanksi.

Makassar, 2013

Sri Endah Surya Sofiani

PRAKATA

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT, dengan selesainya tesis ini. Ide penulis memfokuskan kepada topic permasalahan ini timbul dari hasil pengamatan penulis terhadap sulitnya menentukan isomer senyawa alkana secara konvensional yaitu dengan menggambar terlebih dahulu senyawa-senyawa alkana yang dapat dibentuk kemudian menghitung jumlahnya.

Melalui penelitian ini penulis bermaksud menyumbangkan suatu system yang dapat memberikan informasi jumlah isomer dari senyawa alkana dengan visualisasinya.

Banyak kendala yang dihadapi penulis dalam penyusunan tesis ini. Namun berkat bantuan dari berbagai pihak Alhamdulillah tesis ini dapat diselesaikan. Pada kesempatan ini penulis dengan tulus menyampaikan terimakasih kepada:

1. Allah maha pemilik ilmu yang telah mengabulkan cita-cita penulis.
2. Prof. Dr. Ir. H. Salama Manjang sebagai Ketua Komisi Penasihat dan Ketua Program Teknik Studi Elektro.
3. Dr. Ir. Zahir Zainuddin sebagai Anggota Komisi Penasihat yang selalu memberikan semangat serta sabar dalam memberikan bimbingan dan arahan dalam penyelesaian penulisan tesis ini.
4. Dr. Ir. H. Andani, Achmad, MT, Dr. Ing. Faizal Arya Samman, ST., MT sebagai penguji yang sudah memberikan berbagai masukan agar tesis ini menjadi lebih baik.
5. Ayah, ibu serta anakku Nada Bilqisa Ivanya dan Alma Fairura Ivanya yang menjadi kekuatan kepada penulis untuk terus belajar.

6. Rekan-rekan pascamelek'11, terutama Sugiarto Cokrowibowo yang telah banyak membantu dalam penyelesaian penulisan tesis ini.

Akhirnya penulis berharap semoga tesis ini dapat meberikan manfaat dan mendapatkan ridha dari Allah SWT.

Makassar, 2013

ABSTRAK

SRI ENDAH SURYA SOFIANI. *Konstruksi Isomer Senyawa Alkana Menggunakan K-Cayley Tree Adaptif* (dibimbing oleh Salama Manjang dan Zahir Zainuddin).

Penelitian ini bertujuan membuat sebuah aplikasi yang dapat menentukan jumlah isomer senyawa alkana dan menampilkan visualisasinya dengan menggunakan metode *k-Cayley tree adaptif* untuk memperoleh informasi yang tepat.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini ada tiga, yaitu, merumuskan masalah, studi literatur, dan membuat sebuah aplikasi dengan menggunakan bahasa pemrograman *Java* dan *eclipse* sebagai *integrated development environment (IDE)*.

Penelitian ini telah menghasilkan aplikasi yang dapat menentukan jumlah isomer senyawa alkana serta dapat menampilkan visualisasinya secara tepat. Setelah diuji melalui *blackbox* diketahui bahwa aplikasi sistem konstruksi isomer senyawa alkana dengan menggunakan metode *k-Cayley tree adaptif* dapat digunakan untuk menentukan jumlah isomer senyawa alkana serta dapat menampilkan visualisasinya secara tepat.

Kata kunci: *k-Cayley*, *draw and count*, isomer, alkana



ABSTRACT

SRI ENDAH SURYA SOFIANI. *The Construction of the Alkane Isomers Compounds by Using K-Cayley Tree Adaptive* (supervised by **Salama Manjang and Zahir Zainuddin**).

This research aimed to create an application which could simplify the determination of the amount of the alkane isomers and to present its visualization using the method of K-Clayley Tree Adaptive in order to obtain the accurate information.

The three methods used in the research were the problem formulation, the literature review, and the creation of the application using the Java Programming language with the eclipse as IDE (integrated development environment).

The research result was the application which could determine the amount of alkane isomers compound and display its visualization accurately. After the *black-box* test was conducted, it was concluded that the Application of the Construction System of the Alkane Isomers Compound using the Method of K-Cayley Tree Adaptive could be used to determine the amount of the alkane isomers compound and display its visualization accurately.

Keywords: *k-Cayley Tree, draw and count, isomer, alkane.*



DAFTAR ISI

PRAKATA	iii
PERNYATAAN KEASLIAN TESIS.....	v
ABSTRAK	vi
ABSTRAC	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
BAB I. PENDAHULUAN	
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah.....	2
C. Tujuan Penelitian	3
D. Manfaat Penelitian.....	4
E. Batasan Masalah.....	4
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	
A. Alkana.....	6
B. Graf.....	8
C. Pohon.....	11
D. K-Cayley Tree.....	12
E. Road Map Penelitian.....	24
F. Kerangka Pemikiran	26
BAB III. METODE PENELITIAN	

	A. Lokasi dan Waktu Penelitian.....	27
	B. Jenis Penelitian.....	27
	C. Perangkat Penelitian.....	27
	D. Prosedur Penelitian.....	28
	E. Rancangan Sistem.....	29
	F. Metode Pengujian.....	31
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	
	A. Isomer Senyawa Alkana... ..	32
	B. Pengembangan Algoritma K-Cayley Tree Adaptif untuk mengkonstruksi Senyawa Alkana.....	32
	C. Analisis dan Desain Perangkat Lunak.....	47
	D. Pengujian Sistem	54
BAB IV	KESIMPUAN DAN SARAN	
	A. Kesimpulan.....	60
	B. Saran.....	61
	DAFTAR PUSTAKA	62

DAFTAR GAMBAR

Nomor	halaman
2.1. Graf Berarah	9
2.2. Graf Tak Berarah	9
2.3. Pohon	11
2.4. K-Cayley Tree	12
2.5. 3-Cayley Tree	12
2.6. n-pentana	13
2.7. Kerangka Pemikiran	26
2.8. Prosedur Penelitian.....	28
3.2. Rancangan Sistem	30
4.1. Unsur Karbon Sebagai Node Berderajat Empat.....	33
4.2. Rantai Karbon Centered.....	38
4.3. Rantai Karbon Bicenteres.....	38
4.4. Encode Struktur n-Alkana.....	42
4.5. Encode Struktur Pohon Centered.....	43
4.6. Flowchart Algoritma k-Cayley Tree Adaptif.....	46
4.7. Use case Diagram k-Cayley Tree Adaptif.....	47
4.8. Struktur Data Carbon.....	50
4.9. Diagram class carbon.....	51
4.10. Diagram Class PolynomialZet.....	51
4.11. Diagram class isomer alkana dan class canvas.....	52
4.12. Desain user interface.....	54
4.13. Isomer-1 C ₆ H ₁₄	55

4.14	Isomer-2 C ₆ H ₁₄	56
4.15	Isomer-3 C ₆ H ₁₄	56
4.16	Isomer-4 C ₆ H ₁₄	57
4.17	Isomer-5 C ₆ H ₁₄	57

DAFTAR TABEL

Nomor	halaman
4.1. Banyaknya Graf Isomorfik yang Ditentukan Melalui Konsep Cayley Tree.....	37
4.2. Perhitungan Waktu.....	58

DAFTAR LAMPIRAN

Nomor

1. Hasil Pengujian
2. Source Code

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Hidrokarbon adalah sebuah senyawa yang terdiri dari unsur C dan H. Seluruh hidrokarbon memiliki rantai C dan atom-atom H yang berikatan dengan rantai tersebut. Salah satu keistimewaan atom karbon adalah dapat membentuk ikatan antara karbon satu dengan karbon lainnya dalam jumlah yang sangat besar. Hidrokarbon sebagai salah satu senyawa organik merupakan senyawa kimia yang dapat dibagi atas hidrokarbon asiklik dan siklik.

Dalam kehidupan sehari-hari kita mendapatkan senyawa kimia dalam dua golongan yaitu senyawa organik dan senyawa anorganik. Senyawa organik dibangun oleh atom utamanya hidrogen dan karbon, sehingga senyawa ini juga dikenal dengan istilah senyawa hidrokarbon. Senyawa hidrokarbon banyak terdapat di alam dan juga pada makhluk hidup, dimulai dari bahan bakar sampai dengan molekul yang berasal atau ditemukan dalam makhluk hidup seperti karbohidrat, protein, lemak, asam amino dan lain-lain.

Alkana adalah sebuah hidrokarbon asiklik dengan rumus umum C_nH_{2n+2} . Alkana adalah senyawa jenuh, dan tidak mengandung ikatan rangkap dua atau rangkap tiga seperti pada senyawa alkena dan alkuna.

Isomer adalah senyawa yang mempunyai rumus molekul sama tetapi memiliki struktur berbeda. Senyawa alkana memiliki isomer rangka yang jumlahnya tergantung dari banyaknya atom karbon yang membentuk suatu rantai karbon. Semakin banyak jumlah atom karbon yang berikatan maka semakin banyak pula jumlah isomernya.

Setiap Isomer dari suatu senyawa alkana memiliki sifat fisik yaitu titik didih yang berbeda. Titik didih dari bentuk isomer suatu senyawa alkana yang berantai panjang akan memiliki titik didih lebih tinggi dibandingkan dengan bentuk isomer suatu senyawa alkana yang bercabang. Dengan demikian, mengetahui jumlah dan visualisasi berbagai senyawa alkana dapat mempermudah menentukan jenis isomer yang tepat dari suatu senyawa alkana untuk keperluan tertentu.

Menghitung jumlah isomer senyawa alkana yang terbentuk dari atom biasanya dihitung dengan menggunakan metode *draw and count*, yaitu dengan menggambar secara manual semua struktur senyawa alkana yang saling berisomer kemudian menghitungnya. Cara tersebut mempunyai beberapa kelemahan yaitu membutuhkan waktu yang lama dan tingkat ketelitian yang rendah. Semakin banyak jumlah atom karbon suatu senyawa alkana semakin banyak pula jumlah isomernya. Kesalahan yang paling sering dilakukan adalah mengulang-ulang gambar struktur isomer yang sebenarnya sudah dibuat.

Untuk menghindari kesalahan dalam menentukan isomer senyawa alkana baik jumlah dan visualisasinya perlu dibangun sebuah sistem. Dimana sistem akan menghitung jumlah isomer dan menampilkan visualisasi dari senyawa alkana yang ditentukan secara tepat.

B. Rumusan Masalah

Agar tidak terjadi kesalahan dalam penentuan isomer senyawa alkana baik jumlah maupun visualisasinya maka pada penelitian ini yang menjadi rumusan masalah yaitu:

1. Bagaimana membangun aplikasi untuk menentukan jumlah isomer senyawa alkana dengan tepat
2. Bagaimana menampilkan visualisasi berbagai bentuk isomer dari suatu senyawa alkana secara tepat.

C. Tujuan Penelitian

Untuk menghindari kesalahan dalam penentuan isomer senyawa alkana yang biasa dilakukan dengan menggambar secara manual kemudian menghitungnya (*draw and count*), maka perlu dibangun sebuah aplikasi yang dapat memberikan informasi mengenai jumlah isomer yaitu:

1. Dengan menerapkan *k-Cayley Tree* untuk menentukan jumlah isomer senyawa alkana

2. Dengan menerapkan *k-Cayley Tree Adaptif* untuk menampilkan visualisasi dari berbagai struktur isomer senyawa alkana

D. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan bermanfaat untuk:

1. Dapat memberikan informasi mengenai jumlah isomer senyawa alkana secara tepat.
2. Dapat memberikan informasi mengenai visualisasi isomer senyawa alkana secara tepat.
3. Dengan mengetahui cara menentukan jumlah isomer senyawa alkana dengan *k-Cayley Tree Adaptif* maka diharapkan dapat menambah referensi pengetahuan teori graf dan aplikasinya di bidang kimia.
4. memberikan kontribusi bagi pengembangan Teori Graf, khususnya di bidang Ilmu Kimia.
5. dapat dijadikan sebagai salah satu referensi informasi bagi pihak yang berkepentingan.

E. Batasan Masalah

Salah satu senyawa kimia yang banyak digunakan dalam kehidupan sehari-hari adalah senyawa hidrokarbon, yaitu senyawa yang terdiri dari atom karbon (C) dan

atom hydrogen (H). Hidrokarbon dibagi atas siklik dan asiklik. Senyawa hidrokarbon asiklik memiliki struktur pohon yang dibagi atas tiga kelompok yaitu senyawa alkana yang memiliki rumus kimia C_nH_{2n+2} dimana ikatannya tunggal semua, senyawa alkena yang memiliki rumus kimia C_nH_{2n} dimana ikatannya mengandung ikatan rangkap dua, dan senyawa alkuna yang memiliki rumus kimia C_nH_{2n-2} dimana ikatannya mengandung ikatan rangkap tiga.

Agar dalam penelitian ini dapat mencapai sasaran dan tujuan yang diharapkan, maka permasalahan yang ada dibatasi hanya menentukan jumlah isomer senyawa alkana saja.

BAB II

KAJIAN PUSTAKA

A. Alkana

Alkana (juga dikenal sebagai parafin atau hidrokarbon jenuh) adalah senyawa kimia yang hanya terdiri dari unsur-unsur karbon (C) dan hidrogen (H) (hidrokarbon), dimana atom-atom dihubungkan bersama-sama secara eksklusif oleh ikatan tunggal. Setiap atom karbon mempunyai 4 ikatan (baik ikatan C-H atau ikatanyan C-C), dan setiap atom hidrogen mesti berikatan dengan atom karbon (ikatan H-C) [1].

Sebuah kumpulan dari atom karbon yang terangkai disebut juga dengan rumus kerangka. Rumus umum alkana adalah C_nH_{2n+2} dimana jumlah atom karbon digunakan untuk mengukur berapa besar ukuran alkana tersebut [1].

Isomer adalah senyawa yang mempunyai rumus molekul sama tetapi memiliki struktur berbeda. Unsur karbon mempunyai empat elektron valensi dan hidrogen mempunyai satu elektron valensi. Jika memodelkan sebuah senyawa hidrokarbon sebagai sebuah graf, maka atom karbon dan Hidrogen kita simbolkan sebagai simpul dan ikatan antara karbon dengan hidrogen sebagai rusuk. Elektron valensi dari masing-masing atom melambangkan derajat dari masing-masing simpul. Oleh karena atom karbon mempunyai empat elektron valensi, maka simpul yang melambangkan atom karbon mempunyai empat derajat simpul, begitu juga

dengan atom hidrogen, atom hidrogen mempunyai satu elektron valensi, maka simpul yang melambangkan atom hidrogen hanya mempunyai satu derajat simpul. Perlu ditekankan bahwa, banyaknya derajat simpul untuk masing-masing simpul harus dipenuhi ketika menggambarkan senyawa (hidrokarbon) dalam bentuk graf [2][3][5].

Isomer paling sederhana dari sebuah alkana adalah ketika atom karbonnya terpasang pada rantai tunggal tanpa ada cabang. Isomer ini disebut dengan *n*-isomer (*n* untuk "normal", penulisannya kadang-kadang tidak dibutuhkan). Meskipun begitu, rantai karbon dapat juga bercabang di banyak letak. Kemungkinan jumlah isomer akan meningkat tajam ketika jumlah atom karbonnya semakin banyak.

Isomer alkana dimulai pada senyawa dengan jumlah atom C sebanyak 4 buah.

Contoh:

1) Isomer pada C_4H_{10}

$CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$: n-butana

$CH_3-CH-CH_3$: 2-metil propana atau isobutana

.|
CH₃

2) Isomer pada C_5H_{12}

$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$: n-pentana

$\text{CH}_3\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_3$: 2 metil butana



$\text{CH}_3\text{-C-CH}_3$: 2,2-dimetil propana

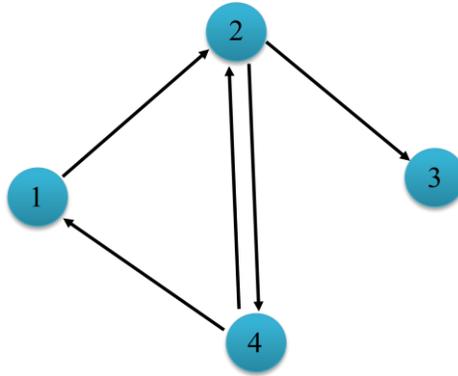


B. Graf

Graf $G(V,E)$ adalah himpunan dua objek simpul V yang dihubungkan dengan rusuk-rusuk E . Graf direpresentasikan dengan titik yang disebut simpul (*vertex*) dan garis penghubung antara dua simpul yang disebut rusuk (*edge*). Graf dapat memiliki simpul tanpa rusuk, tapi tidak ada graf yang hanya memiliki rusuk tanpa simpul. Graf ditulis dengan $G=(V,E)$ atau $G(V,E)$, dimana V adalah himpunan simpul dan E adalah himpunan rusuk. $|V|$ menyatakan jumlah simpul pada himpunan V dan $|E|$ menyatakan jumlah rusuk pada himpunan [4] [5].

1. Graf berarah

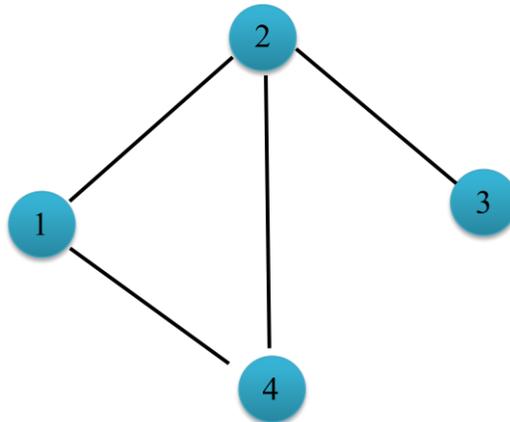
Sebuah rusuk $e \in E$ dari sebuah graf beararah (*directed graph*) direpresentasikan sebagai himpunan pasangan berurutan (u,v) , dimana $u,v \in V$, dalam hal ini u adalah simpul asal dan v adalah simpul tujuan, juga diasumsikan bahwa $u \neq v$. Berikut ini contoh graf berarah dengan $V = \{ 1, 2, 3, 4\}$, $|V| = 4$ dan $E = \{(1,2), (2,3), (2,4), (4,1), (4,2)\}$, $|E|=5$



Gambar 2.1. Graf berarah.

2. Graf tak berarah

Sebuah rusuk $e \in E$ dari sebuah graf tak berarah (*undirected graph*) direpresentasikan sebagai sebuah himpunan $\{u,v\}=\{v,u\}$ dimana $u,v \in V$, juga diasumsikan bahwa $u \neq v$. Berikut ini contoh graf tak berarah dengan $V = \{ 1, 2, 3, 4\}$, $|V| = 4$ dan $E = \{\{1,2\}, \{2,3\}, \{2,4\}, \{4,1\} \}$, $|E|=4$.



Gambar 2.2. Graf tak berarah.

3. Derajat simpul

Derajat (*degree*) dalam suatu graf dibedakan dibedakan menjadi dua yaitu derajat masuk (*indegree*) adalah jumlah rusuk yang menuju ke simpul dan derajat keluar (*outdegree*) adalah jumlah rusuk yang meninggalkan simpul[3][4][5].

4. Istilah-istilah dasar dalam graf

Berikut ini istilah-istilah dasar yang sering digunakan dalam pembahasan graf:

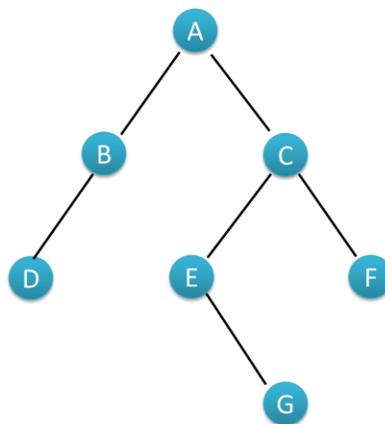
- 1) *Self-loop* atau sering disebut *loop* saja adalah rusuk dimana kedua simpul yang berada di kedua ujungnya adalah sama. Graf sederhana adalah graf yang tidak memuat *self-loop*.
- 2) *Isomorphic* atau sering juga disebut ekivalen. Dua graf disebut *isomorphic* jika keduanya berperilaku identik menurut kriteria-kriteria graf. Kedua graf berkorespondensi satu-satu antara simpul-simpul dan rusuk-rusuknya sehingga hubungan antara simpul-simpul didalamnya terjaga.
- 3) *Walk* atau sering juga disebut *edge-train*, *chain* adalah suatu barisan simpul (v_1, v_2, \dots, v_L) dimana $\{(v_1, v_2), (v_2, v_3), \dots, (v_{L-1}, v_L)\} \subseteq E$. Contoh: $(V_2, V_3, V_6, V_5, V_3, V_7)$.
- 4) *Simple path* atau sering disebut *path* saja adalah *walk* tanpa pengulangan simpul. Contoh: $(V_1, V_4, V_5, V_2, V_3)$.
- 5) *Closed walk* adalah *walk* yang dimulai dan diakhiri dengan simpul yang sama.
- 6) *Open walk* adalah *walk* yang dimulai dan diakhiri dengan simpul-simpul berbeda.
- 7) *Cycle* adalah *Closed walk* tanpa pengulangan simpul kecuali simpul awal dan akhir.

8) *Cyclic*, suatu graf disebut *cyclic* jika mengandung *cycle*. Jika tidak mengandung *cycle* disebut *graph acyclic*. Contoh graf *acyclic* adalah pohon (tree)[3][4][5].

C. Pohon

Misalkan $G(V,E)$ adalah graf tak berarah. Pernyataan berikut adalah ekuivalen:

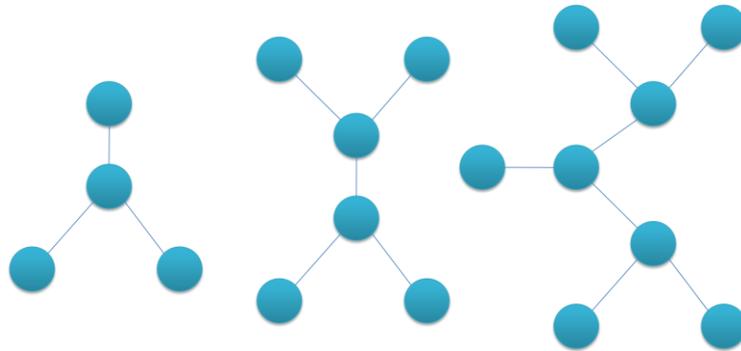
- 1) G adalah pohon
- 2) Setiap dua simpul di G dihubungkan oleh *simple path* unik
- 3) G adalah graf terhubung tetapi jika ada sebuah rusuk yang dihapus dari E akan menyebabkan graf tidak terhubung
- 4) G adalah graf terhubung dan $|E|=|V|-1$
- 5) G adalah graf *acyclic* dan $|E|=|V|-1$
- 6) G adalah graf *acyclic*, tetapi jika ada sebuah rusuk yang ditambahkan ke E maka akan menyebabkan G menjadi graf *cycle*[3][4][5].



Gambar 2.3: Pohon

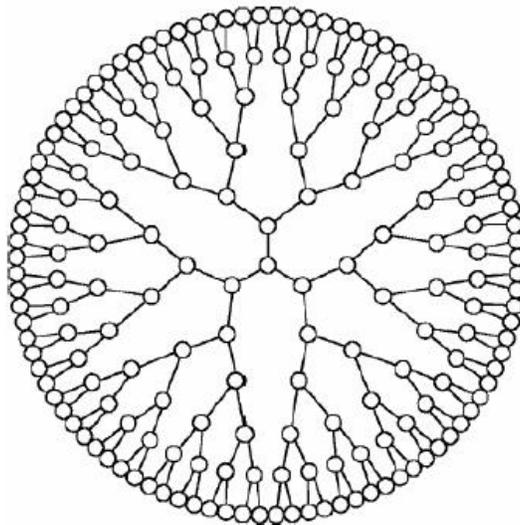
D. k-Cayley Tree

Cayley Tree atau yang disebut dengan *Bethe Lattice*, diperkenalkan oleh Hans Bethe pada tahun 1935. *Cayley Tree* dengan *coordination number* z adalah graf bercabang yang setiap simpulnya terhubung dengan sebanyak z simpul yang lain dan tidak memuat loop. Gambar berikut menunjukkan beberapa contoh 3-*Cayley tree*:



Gambar 2.4: *Cayley Tree*

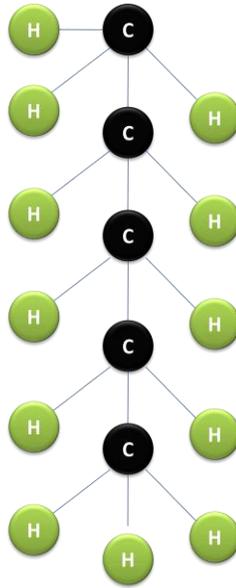
Cayley tree bisa digambarkan sebagai suatu struktur yang terus mengembang dari simpul pusat, dengan semua simpul disusun melingkari simpul pada *level* sebelumnya. Simpul pusat dapat disebut juga sebagai akar, seperti pada gambar berikut:



Gambar 2.5: 3-cayley tree

Setiap simpul pada 3-cayley tree digambarkan terhubung dengan maksimal 3 simpul. Jika k adalah *coordination number*, maka simpul pada level h bisa di hitung dengan:

$N_h = k(k-1)^{h-1}$ untuk $h > 0$. k -Cayley Tree adalah Cayley Tree dengan orde k (setiap simpul terhubung dengan paling banyak k simpul lainnya). Mengingat bahwa alkana adalah senyawa hidrokarbon asiklik yang memiliki struktur mirip pohon, maka perhitungan isomer senyawa alkana dilakukan dengan menggunakan konsep dasar Cayley Tree. Alkana dengan rumus kimia C_nH_{2n+2} di mana setiap simpulnya mempunyai derajat satu atau empat, maka pada pembahasan ini menggunakan konsep 4-Cayley Tree. Gambar 2.6 berikut[2][3][4][5].:



Gambar 2.6 $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$: n-pentana

Dari penjumlahan penerapan deret *cayley centered* dan *bicentered* akan diperoleh:

1. **Centered Tree** $C(z)$

Untuk suatu k -Cayley Tree, misalkan $T_{h,n}$ adalah jumlah $(k-1)$ -ary dengan n adalah simpul dan tinggi pohon maksimum h . Sebagai perjanjian, pohon kosong mempunyai $h=-1$

Misalkan $T_h(z) = \sum_{n \geq 0} T_{h,n} z^n$, maka

$$T_{-1}(z) = 1$$

$$T_0(z) = 1 + z$$

Dan untuk $h > 1$

$$T_{h+1}(z) = 1 + zS_{k-1}(T_h(z))$$

$$T_1(z) = \sum_{n=0}^{10} T_{1,n} z^n$$

$$= T_{1,0} + T_{1,1} z + T_{1,2} z^2 + T_{1,3} z^3 + T_{1,4} z^4 + T_{1,5} z^5 + T_{1,6} z^6 + T_{1,7} z^7 + T_{1,8} z^8 + T_{1,9} z^9 + T_{1,10} z^{10}$$

$$T_2(z) = \sum_{n=0}^{10} T_{2,n} z^n$$

$$= T_{2,0} + T_{2,1} z + T_{2,2} z^2 + T_{2,3} z^3 + T_{2,4} z^4 + T_{2,5} z^5 + T_{2,6} z^6 + T_{2,7} z^7 + T_{2,8} z^8 + T_{2,9} z^9 + T_{2,10} z^{10}$$

$$T_3(z) = \sum_{n=0}^{10} T_{3,n} z^n \text{ maka}$$

$$= T_{3,0} + T_{3,1} z + T_{3,2} z^2 + T_{3,3} z^3 + T_{3,4} z^4 + T_{3,5} z^5 + T_{3,6} z^6 + T_{3,7} z^7 + T_{3,8} z^8 + T_{3,9} z^9 + T_{3,10} z^{10}$$

seterusnya sampai h

Keterangan:

$T_{1,0}(z)$ menyatakan banyak jumlah pohon berakar $(k-1)$ -ary dengan 0 adalah simpul dan tinggi pohon maksimum 1.

$T_{1,1}(z)$ menyatakan banyak jumlah pohon berakar $(k-1)$ -ary dengan 1

adalah simpul dan tinggi pohon maksimum 1.

$T_{3,1}(z)$ menyatakan banyak jumlah pohon berakar $(k-1)$ -ary dengan 1

adalah simpul dan tinggi pohon maksimum 3.

Dan seterusnya....

$$T_{h+1}(z) = 1 + zS_{k-1}(T_h(z))$$

$S_m(f(z))$ adalah hasil dari substitusi $f(z)$ ke *cycle index* untuk grup simetri

berorder $m=3$ dan $m=4$.

$$S_3(f(z)) = \frac{(f(z)^3 + 3f(z)f(z^2) + 2f(z^3))}{3!}$$

$$S_4(f(z)) = \frac{(f(z)^4 + 6f(z^2)f(z)^2 + 8f(z^3)f(z) + 3f(z^2)^2 + 6f(z^4))}{4!}$$

Misalkan $C_{2h,n}$ adalah jumlah *center* dari k -Cayley trees dengan n

adalah simpul dan $2h$ adalah diameter pohon.

$$\text{Ambil } C_{2h}(z) = \sum_{n \geq 0} C_{2h,n} z^n$$

Dengan menghapus simpul *center* dan sisi yang berdekatan dengannya, akan didapatkan sejumlah pohon yang berkorespondensi dengan k -tuple pohon berakar $(k-1)$ -ary dengan tinggi maksimum $h-1$. Paling tidak terdapat dua pohon yang tingginya tepat $h-1$. Karena itu, diperoleh persamaan sebagai berikut

$$C_{2h} = (1 + zS_k(T_{h-1}(z))) - (1 + zS_k(T_{h-2}(z))) - (T_{h-1}(z) - T_{h-2}(z))(T_{h-1}(z) - 1)$$

Tiga ekspresi dalam persamaan di atas masing-masing menghitung k -tuple pohon dengan tinggi maksimum $h-1$, k -tuple pohon dengan tinggi maksimum $h-2$, dan pohon dengan tepat satu sub pohon yang tingginya

$h-1$.

Selanjutnya, misalkan C_n adalah jumlah k -cayley trees dengan n buah simpul, dan

$$C(z) = \sum_{n \geq 0} C_n z^n, \text{ maka}$$

$$C(z) = \sum_{h \geq 0} C_{2h}(z)$$

Jika diuraikan, maka akan diperoleh *center* suatu pohon.

$$C(z) = C_0(z) + C_2(z) + C_4(z) + C_6(z) + \dots$$

Karena

$$C_{2h} = (1 + zS_k(T_{h-1}(z))) - (1 + zS_k(T_{h-2}(z))) - (T_{h-1}(z) - T_{h-2}(z))(T_{h-1}(z) - 1)$$

Dan sudah tentukan bahwa $k = 4$ maka,

$$C_0(z) = (1 + zS_4(T_{-1}(z))) - (1 + zS_4(T_{-2}(z))) - (T_{-1}(z) - T_{-2}(z))(T_{-1}(z) - 1)$$

$$C_2(z) = (1 + zS_4(T_0(z))) - (1 + zS_4(T_{-1}(z))) - (T_0(z) - T_{-1}(z))(T_0(z) - 1)$$

$$C_4(z) = (1 + zS_4(T_1(z))) - (1 + zS_4(T_0(z))) - (T_1(z) - T_0(z))(T_1(z) - 1)$$

$$C_6(z) = (1 + zS_4(T_2(z))) - (1 + zS_4(T_1(z))) - (T_2(z) - T_1(z))(T_2(z) - 1)$$

$$C_8(z) = (1 + zS_4(T_3(z))) - (1 + zS_4(T_2(z))) - (T_3(z) - T_2(z))(T_3(z) - 1)$$

$$C_{10}(z) = (1 + zS_4(T_4(z))) - (1 + zS_4(T_3(z))) - (T_4(z) - T_3(z))(T_4(z) - 1)$$

Dan seterusnya....

$$1. S_3(T_0(z))$$

Maka untuk $f(z) = T_0(z) = 1 + z$, maka

$$S_3(T_0(z)) = \frac{((1+z)^3 + 3(1+z)(1+z^2) + 2(1+z^3))}{3!}$$

$$= \frac{((1 + 3z + 3z^2 + z^3) + 3(1 + z + z^2 + z^3) + 2(1 + z^3))}{3!}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1 + 3z + 3z^2 + z^3 + 3 + 3z + 3z^2 + 3z^3 + 2 + 2z^3}{6} \\
&= \frac{6 + 6z + 6z^2 + 6z^3}{6} \\
&= 1 + z + z^2 + z^3
\end{aligned}$$

2. $S_3(T_1(z))$

Selanjutnya akan dihitung $T_1(z)$ dengan rumus

$$T_{h+1}(z) = 1 + zS_{k-1}(T_h(z))$$

yaitu,

$$T_1(z) = 1 + zS_3(T_0(z))$$

$$T_1(z) = 1 + zS_3(1 + z)$$

$$T_1(z) = 1 + zS_3(f(z)).$$

dan diperoleh,

$$T_1(z) = 1 + z(1 + z + z^2 + z^3)$$

$$T_1(z) = 1 + z + z^2 + z^3 + z^4$$

Diperoleh

$$S_3(T_1(z)) = \frac{((T_1(z))^3 + 3(T_1(z))(T_1(z^2)) + 2(T_1(z^3)))}{3!}$$

$$= 1 + z + 2z^2 + 3z^3 + 4z^4 + 4z^5 + 5z^6 + 4z^7 + 4z^8 + 3z^9 + 2z^{10} + z^{11} + z^{12}$$

3. $S_3(T_2(z))$

$$T_2(z) = 1 + zS_3(T_1(z))$$

$$T_2(z) = 1 + z(1 + z + 2z^2 + 3z^3 + 4z^4 + 4z^5 + 5z^6 + 4z^7 + 4z^8 + 3z^9 + 2z^{10} + z^{11} + z^{12})$$

$$T_2(z) = 1 + z + z^2 + 2z^3 + 3z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12}$$

$$S^3(T_2(z)) = \frac{((T_2(z))_3 + 3(T_2(z))(T_2(z_2)) + 2(T_2(z_3)))}{3!}$$

$$= 1 + z + 300z^{14} + 128z^{30} + 70z^9 + 432z^{16} + 20z^6 + 31z^7 + 624z^{21} + 37z^{33} + 99z^{10} + 7z^4 + 551z^{18} + 601z^{22} + 12z^5 + 614z^{20} + 514z^{24} + 312z^{27} + 369z^{15} + 378z^{26} + 47z^8 + 4z^3 + 594z^{19} + 498z^{17} + 238z^{28} + 137z^{11} + 184z^{12} + 6z^{36} + z^{39} + 2z^2 + 570z^{23} + 453z^{25} + 181z^{29} + 89z^{31} + 56z^{32} + 20z^{34} + 12z^{35} + 3z^{37} + z^{38} + 239z^{13}$$

Dan seterusnya,

4. $S_4(T_0(z))$

Maka untuk $f(z) = T_0(z) = 1 + z$, maka

$$S^4(T_0(z)) = \frac{((1+z)^4 + 6(1+z^2)(1+z)^2 + 8(1+z^3)(1+z) + 3(1+z^2)^2 + 6(1+z^4))}{4!}$$

$$= \frac{((1+4z+6z^2+4z^3+z^4) + 6(1+z^2)(1+2z+z^2) + 8(1+z^3+z+z^4) + 3(1+2z^2+z^4) + 6(1+z^4))}{4!}$$

$$= \frac{(1+4z+6z^2+4z^3+z^4) + (6+6z^2+12z+12z^3+6z^2+6z^4) + (8+8z^3+8z+8z^4) + (3+6z^2+3z^4) + (6+6z^4)}{4!}$$

$$= \frac{(1+6+8+3+6) + (4+12+8)z + (6+6+6+6)z^2 + (4+12+8)z^3 + (1+6+8+3+6)z^4}{24}$$

$$= 1 + z + z^2 + z^3 + z^4$$

5. $S_4(T_1(z))$

Selanjutnya akan dihitung $T_1(z)$ dengan rumus

$$T_{h+1}(z) = 1 + zS_{k-1}(T_h(z))$$

$$T_1(z) = 1 + z + z^2 + z^3 + z^4$$

Dengan rekursi diperoleh

$$S_4(T_1(z)) = ((T_1(z))^4 + 6(T_1(z^2))(T_1(z))^2 + 8(T_1(z^3))(T_1(z)) + 3(T_1(z^2))^2 + 6(T_1(z^4)))$$

$$\begin{aligned}
& \frac{4!}{1} \\
& = 1 + z + 5z^{12} + 7z^9 + z^{16} + 7z^6 + 5z^{12} + 2z^2 + 5z^5 + 5z^4 + 8z^8 + 7z^{10} + 3z^{13} \\
& + 5z^{11} + 2z^{14} + z^{15} + 7z^7 + 3z^3
\end{aligned}$$

Dan seterusnya,

$$C_o(z) = (1 + zS_4(T_{-1}(z))) - (1 + zS_4(T_{-2}(z))) - (T_{-1}(z) - T_{-2}(z))(T_{-1}(z) - 1)$$

$$C_o(z) = (1 + zS_4(1)) - (1 + zS_4(0)) - (1 - 0)(1 - 1)$$

$$C_o(z) = z$$

Selanjutnya $C_2(z)$

$$C_2(z) = (1 + zS_4(T_0(z))) - (1 + zS_4(T_{-1}(z))) - (T_0(z) - T_{-1}(z))(T_0(z) - 1)$$

$$C_2(z) = (1 + zS_4(1+z)) - (1 + zS_4(0)) - ((1+z) - (0))((1+z) - 1)$$

$$C_2(z) = (1 + z(1+z+z^2+z^3+z^4)) - (1 + zS_4(0)) - ((1+z) - (0))((1+z) - 1)$$

$$C_2(z) = (1 + z + z^2 + z^3 + z^4 + z^5) - (1 + 0) - (1+z)(z)$$

$$C_2(z) = 1 + z + z^2 + z^3 + z^4 + z^5 - 1 - z - z^2$$

$$C_2(z) = z^3 + z^4 + z^5$$

Selanjutnya $C_4(z)$

$$C_4(z) = (1 + zS_4(T_1(z))) - (1 + zS_4(T_0(z))) - (T_1(z) - T_0(z))(T_1(z) - 1)$$

$$\begin{aligned}
C_4(z) &= (1 + zS_4(T_1(z))) - (1 + z(1 + z + z^2 + z^3 + z^4)) - \\
& \quad \left((1 + z + z^2 + z^3 + z^4) - (1 + z) \right) (1 + z + z^2 + z^3 + z^4 - 1) \\
&= (1 + z(1 + z + 2z^2 + 3z^3 + 5z^4 + 5z^5 + 7z^6 + 7z^7 + 8z^8 + 7z^9 + 7z^{10} + \\
& \quad 5z^{11} + 5z^{12} + 3z^{13} + 2z^{14} + z^{15} + z^{16})) - (1 + z + z^2 + z^3 + z^4 + z^5) - \\
& \quad (z^2 + z^3 + z^4)(1 + z + z^2 + z^3 + z^4 - 1)
\end{aligned}$$

$$= z^5 + 2z^6 + 5z^7 + 6z^8 + 8z^9 + 7z^{10} + 7z^{11} + 5z^{12} + 5z^{13} + 3z^{14} + 2z^{15} + z^{16} + z^{17}$$

Selanjutnya C_6

$$C_6(z) = (1 + zS_4(T_2(z))) - (1 + zS_4(T_1(z))) - (T_2(z) - T_1(z))(T_2(z) - 1)$$

$$C_6(z) = z^{53} + 1581z^{38} + 5205z^{29} + 642z^{41} + 121z^{45} + 43z^{47} + 1306z^{18} + 436z^{42} + 70z^{46} + 5184z^{28} + 297z^{43} + 313z^{14} + 700z^{16} + z^{52} + 885z^{40} + 485z^{15} + 4031z^{33} + 4051z^{24} + 22z^{48} + 1211z^{39} + 5053z^{30} + 3598z^{23} + 3092z^{22} + 26z^{10} + 4823z^{31} + 2129z^{20} + 59z^{11} + 4814z^{26} + 4451z^{32} + 3z^{51} + 3523z^{34} + 109z^{12} + 4487z^{25} + 2031z^{37} + 2611z^{21} + 3027z^{35} + z^7 + 982z^{17} + 5073z^{27} + 2498z^{36} + 3z^8 + 1703z^{19} + 6z^{50} + 196z^{13} + 11z^9 + 189z^{44} + 13z^{49}$$

Dan seterusnya,

$$C(z) = \sum_{h \geq 0} C_{2h}(z) = C_0(z) + C_2(z) + C_4(z) + C_6(z) + \dots$$

Untuk memperoleh nilai *Centered* maka akan dilakukan penjumlahan

terhadap $C(z)$ yang telah dihitung, pada contoh perhitungan di atas akan

dilakukan operasi penjumlahan terhadap

$$C_0(z), C_2(z), C_4(z), C_6(z), C_8(z).$$

Yaitu

$$C(z) = C_0(z) + C_2(z) + C_4(z) + C_6(z) + C_8(z)$$

$$= z + z^3 + z^4 + 2z^5 + 2z^6 + 6z^7 + 9z^8 + 20z^9 + 37z^{10} + \dots$$

2. *Bicentered Tree* $B(z)$

Misalkan $B_{2h+1,n}$ adalah jumlah pohon *bicenter* dari *k-Cayley trees*

dengan n adalah jumlah simpul dan $2h+1$ adalah diameter pohon.

Ambil $B_{2h+1}(z) = \sum_{n \geq 0} B_{2h+1,n} z^n$,

B_n adalah jumlah *bicenter* dari k -Cayley trees yang memiliki n simpul, dan

$$B(z) = \sum_{n \geq 0} B_n z^n.$$

Karena sebuah pohon *bicenter* berkorespondensi dengan pasangan pohon berakar $(k-1)$ -ary dengan tinggi tepat h diperoleh

$$B_{2h-1}(z) = S_2(T_h(z) - T_{h-1}(z))$$

Maka diperoleh *Bicenter* suatu pohon adalah

$$B(z) = \sum_{h \geq 0} B_{2h+1}(z)$$

Jika diuraikan diperoleh sebagai berikut

$$B(z) = B_1(z) + B_3(z) + B_5(z) + B_7(z) + B_9(z) + \dots$$

$$B_1(z) = S_2(T_0(z) - T_{-1}(z))$$

$$B_3(z) = S_2(T_1(z) - T_0(z))$$

$$B_5(z) = S_2(T_2(z) - T_1(z))$$

$$B_7(z) = S_2(T_3(z) - T_2(z))$$

$$B_9(z) = S_2(T_4(z) - T_3(z))$$

dan seterusnya...

Untuk menghitung *Bicentere* maka digunakan *cycle index* untuk grup simetri berorder $m=2$

$$S_2 f(z) = \frac{f(z)^2 + f(z^2)}{2!}$$

Seperti perhitungan sebelumnya, pada *center* telah diperoleh

$$T_{-1}(z) = 1$$

$$T_0(z) = 1 + z$$

$$T_1(z) = 1 + z + z^2 + z^3 + z^4$$

$$T_2(z) = 1 + z + z^2 + 2z^3 + 3z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12} + z^{13}$$

$$\begin{aligned} T_3(z) = & 1 + z + 239z^{14} + 181z^{30} + 47z^9 + 369z^{16} + 12z^6 + 20^7 \\ & + 614z^{21} + 56z^{33} + 70z^{10} + 4z^4 + 498z^{18} + 624z^{22} + 7z^5 \\ & + 594z^{20} + 570z^{24} + 378z^{27} + 300z^{15} + 453z^{26} + 31z^8 \\ & + 2z^3 + 551z^{19} + 432z^{17} + 312z^{28} + 99z^{11} + 137z^{12} \\ & + 12z^{36} + z^{39} + z^2 + 601z^{23} + 514z^{25} + 238z^{29} + 128z^{31} \\ & + 89z^{32} + 37z^{34} + 20z^{35} + 6z^{37} + 3z^{38} + 184z^{13} + z^{40} \end{aligned}$$

Dan seterusnya...

1. Maka akan dihitung untuk $B_1(z) = S_2(T_0(z) - T_{-1}(z))$

$$(T_0(z) - T_{-1}(z)) = 1 + z - 1 = z$$

Karena $(T_0(z) - T_{-1}(z)) = f(z) = z$, maka

$$\begin{aligned} B_1(z) &= \frac{(z)^2 + (z^2)}{2!} \\ &= z^2 \end{aligned}$$

2. $B_3(z) = S_2(T_1(z) - T_0(z))$

$$(T_1(z) - T_0(z)) = (1 + z + z^2 + z^3 + z^4) - (1 + z) = z^2 + z^3 + z^4$$

Karena $(T_1(z) - T_0(z)) = f(z) = z^2 + z^3 + z^4$, maka

$$B_3(z) = \frac{(z^2 + z^3 + z^4)^2 + (z^4 + z^6 + z^8)}{2!}$$

$$= z^4 + z^5 + 2z^6 + z^7 + z^8$$

3. $B_5(z) = S_2(T_2(z) - T_1(z))$

$$(T_2(z) - T_1(z)) = (1 + z + z^2 + 2z^3 + 3z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12} + z^{13}) - (1 + z + z^2 + z^3 + z^4)$$

$$= z^3 + 2z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12} + z^{13}$$

Karena $(T_2(z) - T_1(z)) = f(z) =$

$$z^3 + 2z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12} + z^{13}, \text{ maka}$$

$$B_5(z) = \frac{1}{2!} \left((z^3 + 2z^4 + 4z^5 + 4z^6 + 5z^7 + 4z^8 + 4z^9 + 3z^{10} + 2z^{11} + z^{12} + z^{13})^2 + (z^6 + 2z^8 + 4z^{10} + 4z^{12} + 5z^{14} + 4z^{16} + 4z^{18} + 3z^{20} + 2z^{22} + z^{24} + z^{16}) \right)$$

$$= 12z^9 + 29z^{19} + 23z^{10} + 3z^{24} + 53z^{16} + 14z^{21} + 5z^{23} + 40z^{18}$$

$$+ 30z^{11} + 55z^{14} + z^6 + z^{25} + z^{26} + 2z^7 + 7z^8 + 23z^{20}$$

$$+ 10z^{22} + 47z^{13} + 42z^{12} + 53z^{15} + 45z^{17}$$

Dan seterusnya,

$$B(z) = \sum_{h \geq 0} B_{2h+1}(z) = B_1(z) + B_3(z) + B_5(z) + B_7(z) + B_9(z) + \dots$$

Untuk memperoleh nilai *Bicentered* maka akan dilakukan penjumlahan terhadap

$B(z)$ yang telah dihitung, pada contoh perhitungan di atas akan dilakukan

operasi penjumlahan terhadap $B_1(z)$, $B_3(z)$, $B_5(z)$, $B_7(z)$, . Yaitu

$$B(z) = C_1(z) + C_3(z) + C_5(z) + C_7(z)$$

$$= z^2 + z^4 + z^5 + 3z^6 + 3z^7 + 9z^8 + 15z^9 + 38z^{10} + 73z^{11} + \dots$$

E. Roadmap Penelitian

1. Penelitian yang Pernah Dilakukan Sebelumnya

Penelitian menentukan isomer senyawa alkana yang pernah dilakukan sebelumnya dapat dijelaskan sebagai berikut:

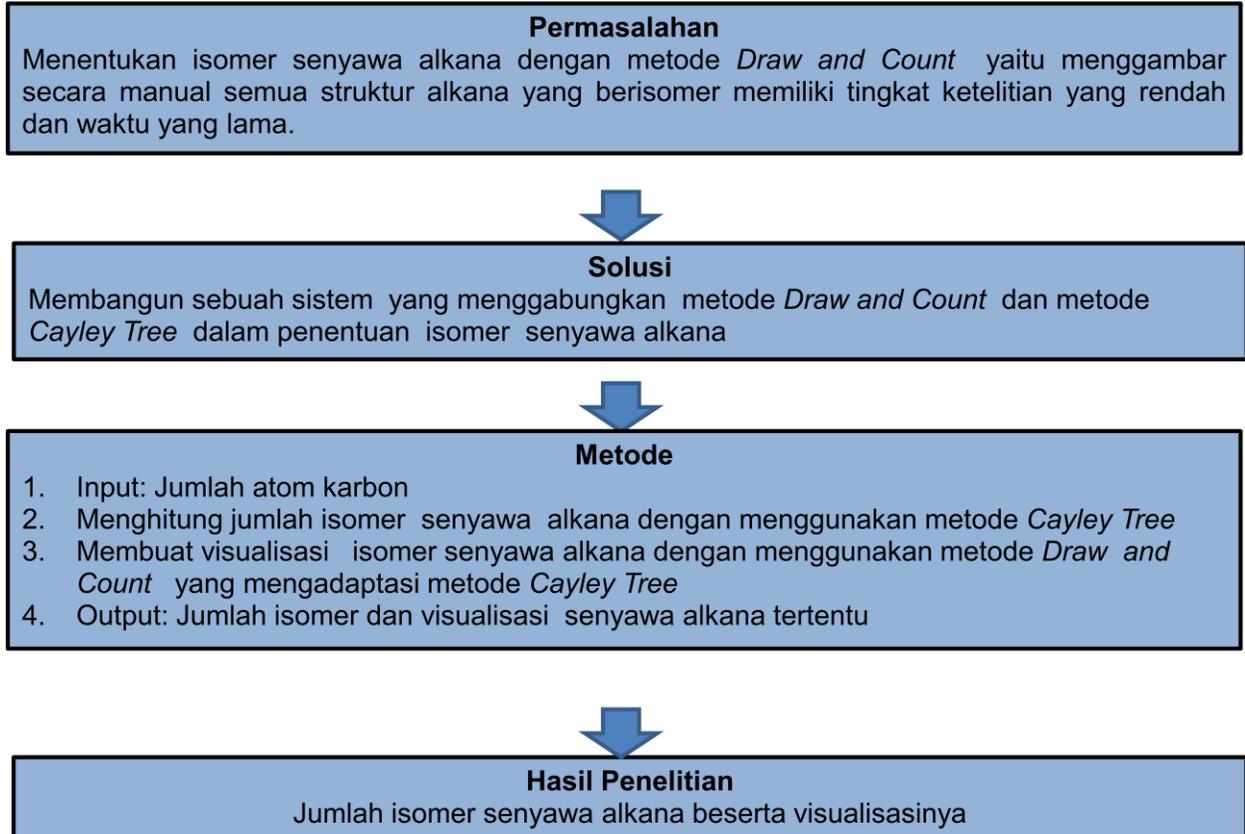
1. Secara *konvensional*, menentukan isomer senyawa alkana dilakukan dengan metode *Draw and Count*, yaitu mencari isomer dengan cara menggambar suatu rumus senyawa alkana dengan rumus rangka yang berbeda kemudian menghitung jumlah dari rumus rangka yang dihasilkan.
2. Arthur Cayley, pada tahun 1875 mengembangkan konsep perhitungan jumlah isomer senyawa alkana menggunakan *Cayley Tree* melalui pohon *centered* dan *bicentered* yang menjadi dasar untuk pengembangan konsep-konsep berikutnya. Konsep yang dikembangkan Cayley ini mengandung kesalahan perhitungan dalam menentukan jumlah isomer senyawa alkana yang memiliki jumlah atom karbon lebih besar dari sebelas ($C > 11$).
3. E.M. Rains dan N.J.A. Sloane pada tahun 1999 membuat sejarah koreksi terhadap perhitungan Cayley sehingga dapat menghitung jumlah isomer senyawa alkana dengan jumlah atom karbon yang lebih banyak secara lebih tepat.
4. Nely Indra Meifiani pada tahun 2008, melakukan penelitian dengan judul "Aplikasi *Cayley Tree* dalam Menentukan Banyak Isomer Senyawa Alkana" . Penelitian ini membahas bagaimana menentukan banyak isomer senyawa alkana dengan menggunakan metode *4-Cayley Tree*. Penelitian ini hanya

membahas sampai penentuan jumlah isomer senyawa alkana tapi tidak memberikan informasi tentang visualisasi maupun rumus rangka dari senyawa alkana.

2. Rencana Pengembangan Penelitian

Rencana pengembangan penelitian yang akan dilakukan adalah menggabungkan metode *Draw and Count* dan *Cayley Tree*. Output dari penelitian ini adalah jumlah isomer dari suatu senyawa alkana beserta visualisasinya. Visualisasi isomer senyawa alkana diperoleh melalui konsep *Draw and Count* yang mengadaptasi konsep *Cayley Tree*.

F. Kerangka Pemikiran



Gambar 2.7 Kerangka Pemikiran