

Penerapan *All-Pairs Shortest Path* dalam Memprediksi Titik Didih Senyawa Parafin Menggunakan Indeks Wiener

William Nixon - 13521123¹

Program Studi Teknik Informatika

Sekolah Teknik Elektro dan Informatika

Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha 10 Bandung 40132, Indonesia

¹13521123@std.stei.itb.ac.id

Abstrak— Parafin merupakan senyawa hidrokarbon organik yang biasa dikenal sebagai lilin/wax. Umumnya, titik didih senyawa organik bergantung pada berbagai faktor seperti gugus fungsi, jumlah atom, dan struktur yang dimilikinya. Titik didih senyawa parafin dapat diprediksi dengan cukup akurat dengan menggunakan indeks Wiener. Nilai indeks Wiener dapat dikalkulasi menggunakan nilai lintasan terpendek antara semua pasangan simpul (*All-Pairs Shortest Path*) dari representasi graf suatu molekul.

Keywords— Parafin, *All-Pairs Shortest Path*, Titik Didih, Indeks Topologi, Kimia Topologi

I. PENDAHULUAN

Senyawa parafin adalah kelompok senyawa kimia yang terdiri dari rantai hidrokarbon alkana yang panjang dan tidak bercabang. Senyawa parafin sering digunakan sebagai bahan bakar, pelumas, dan bahan kimia dasar untuk produksi polimer seperti plastik.

Mengenalinya titik didih suatu senyawa parafin dapat membantu dalam berbagai hal, seperti membedakan senyawa parafin dari senyawa lain yang memiliki titik didih yang berbeda, menentukan kemurnian suatu sampel parafin dengan membandingkan titik didihnya dengan standar titik didih yang telah diketahui, menentukan titik leleh suatu senyawa parafin dengan menggunakan metode titik didih, dan menentukan komposisi suatu campuran parafin dengan menggunakan metode titik didih.

Pada tahun 1947, Dr. Harry Wiener yaitu seorang ahli kimia berkebangsaan Austria memperkenalkan sebuah konsep yang bernama indeks Wiener untuk menghitung titik didih senyawa parafin. Indeks ini merupakan indeks topologi kimia pertama yang berhubungan dengan banyak cabang suatu molekul. Keberhasilan indeks Wiener di dalam memprediksi beberapa sifat fisik senyawa organik seperti titik didih, viskositas, dan tensi permukaan mendorong lebih banyak indeks topologi berbasis jarak pada graf molekul untuk dikembangkan.

Indeks Wiener dihitung dengan menggabungkan jumlah rute terpendek antar senyawa karbon yang ditemukan pada struktur molekul senyawa tersebut dengan jumlah atom dalam struktur molekul senyawa tersebut. Indeks Wiener yang lebih tinggi

menunjukkan struktur molekul yang lebih kompleks, sedangkan indeks Wiener yang lebih rendah menunjukkan struktur molekul yang lebih sederhana. Konsep rute terpendek ini sering juga disebut sebagai *All-Pairs Shortest Path* (APSP) di dalam suatu graf.

II. LANDASAN TEORI

A. Definisi Graf

Graf adalah gabungan dari titik-titik yang disebut vertex (simpul) yang dihubungkan oleh beberapa garis yang disebut edge (sisi). Graf digunakan untuk merepresentasikan objek-objek diskrit dan hubungan antara objek-objek tersebut.

Graf merupakan himpunan simpul (vertices) yang dihubungkan oleh himpunan sisi (edges). Graf dinyatakan melalui persamaan $G = (V, E)$ dengan G adalah graf, V merupakan himpunan tidak kosong dari simpul-simpul, dan E merupakan himpunan sisi yang menghubungkan sepasang simpul pada graf tersebut.

B. Jenis-jenis Graf

Berdasarkan ada tidaknya gelang atau sisi ganda, graf digolongkan menjadi dua jenis, yaitu :

1. Graf Sederhana

Graf yang tidak mengandung sisi gelang maupun sisi ganda.

2. Graf Tidak Sederhana

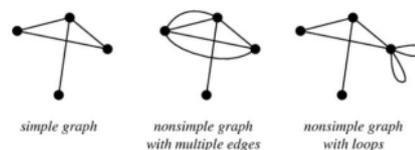
Graf yang mengandung sisi ganda atau gelang. Graf tak-sederhana sendiri dibedakan lagi menjadi:

a) Graf Ganda

Graf yang mengandung sisi ganda dan tidak mengandung sisi gelang.

b) Graf Semu

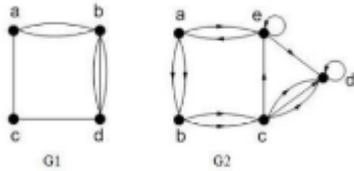
Graf yang mengandung sisi gelang dan dapat mengandung sisi ganda.



Gambar 2.1. Ilustrasi Graf Sederhana dan Tidak Sederhana
Sumber: <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Graf-2020-Bagian2.pdf>

Berdasarkan orientasi pada sisi, graf juga dibedakan menjadi dua jenis, yaitu :

1. Graf Tidak Berarah
Graf yang sisinya tidak mempunyai orientasi arah.
2. Graf Berarah
Graf yang setiap sisinya diberikan orientasi arah.

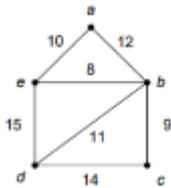


Gambar 2.2. Ilustrasi Graf Berarah dan Tidak Berarah

Sumber: <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Graf-2020-Bagian2.pdf>

Berdasarkan nilai/bobot yang dimiliki sisinya, graf dibedakan menjadi dua yaitu :

1. Graf Tidak Berbobot
Graf yang sisinya tidak mengandung nilai.
2. Graf Berbobot
Graf yang sisinya mengandung nilai/bobot. Setiap bobotnya merepresentasikan hubungan antarsimpul pada graf.



Gambar 2.3. Ilustrasi Graf Berbobot

Sumber: <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Graf-2020-Bagian2.pdf>

C. Terminologi Graf

Terdapat terminologi atau istilah-istilah dalam teori graf, beberapa diantaranya yaitu :

1. Adjacency (Ketetanggaan)
Dua buah simpul dikatakan bertetangga jika keduanya terhubung langsung oleh sebuah sisi.
2. Incidency (Bersisian)
Sebuah simpul A dan sisi E disebut bersisian jika salah satu ujung E adalah A.
3. Incidency (Bersisian)
Sebuah simpul A dan sisi E disebut bersisian jika salah satu ujung E adalah A.
4. Isolated Vertex (Simpul Terpencil)
Sebuah simpul disebut terpencil jika tidak ada satu sisi pun yang bersisian dengannya.
5. Null Graph (Graf Kosong)
Graf yang hanya berisi kumpulan simpul, tanpa ada satupun sisi.
6. Degree (Derajat)
Derajat dari sebuah simpul adalah banyaknya sisi yang bersisian dengan simpul tersebut.
7. Path (Lintasan)
Path adalah jalur dari sebuah simpul awal ke sebuah simpul tujuan.
8. Cycle or Circuit (Siklus atau Sirkuit)

Sebuah siklus adalah jalur dari sebuah simpul awal ke sebuah simpul tujuan.

9. Connected (Keterhubungan)
Simpul A dan B dikatakan terhubung jika ada lintasan dari A ke B.
10. Subgraph (Upagraf)
A disebut upagraf dari graf G jika setiap vertex di A juga ada di G, dan semua edge di A juga ada di G.

D. Algoritma BFS dan DFS

Pada teori graf, terdapat dua algoritma pencarian yang biasa digunakan untuk menelusuri semua simpul pada graf. Algoritma tersebut biasa disebut BFS (*Breadth First Search*) dan DFS (*Depth First Search*).

Algoritma BFS adalah algoritma yang mencari solusi masalah dengan cara mengeksplorasi semua simpul yang terhubung dengan simpul awal secara berurutan, mulai dari simpul yang paling dekat dengan simpul awal hingga simpul yang paling jauh dari simpul awal. Pada umumnya, BFS dilakukan dengan memanfaatkan struktur data *Queue*. Algoritma ini sering digunakan untuk mencari rute terpendek antara dua titik pada suatu jaringan.

Algoritma DFS adalah algoritma yang mencari solusi masalah dengan cara mengeksplorasi semua simpul yang terhubung dengan simpul awal secara mendalam, mulai dari simpul awal ke simpul yang paling jauh dari simpul awal, kemudian kembali ke simpul awal dan mengeksplorasi simpul yang belum dikunjungi yang terhubung dengan simpul awal. Umumnya, algoritma ini memanfaatkan struktur data *Stack*. Algoritma ini sering digunakan untuk menjalankan simulasi yang membutuhkan leaf simpul dicapai dengan cepat.

Kompleksitas waktu dari BFS dan DFS serupa, yaitu $O(V + E)$ apabila digunakan list ketetanggaan, dan $O(V * V)$ apabila digunakan matriks ketetanggaan, dengan V sebagai simpul dan E sebagai sisi.

E. All-Pairs Shortest Path dalam Graf Tak Berbobot

All-Pairs Shortest Path (APSP) merupakan istilah untuk jarak terpendek antara semua pasangan vertices (titik) dalam suatu graf. Umumnya, informasi tentang APSP disimpan dalam sebuah matriks yang disebut sebagai *distance matrix*. Distance matrix dalam teori graf adalah suatu matriks yang

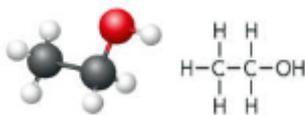
Distance matrix terdiri dari baris dan kolom yang masing-masing merepresentasikan satu simpul pada grafik tersebut. Setiap elemen pada matriks tersebut menyimpan informasi jarak antara pasang simpul yang dipilih, sehingga jika simpul A dan simpul B adalah dua simpul yang ada pada grafik, maka elemen pada baris A dan kolom B akan menyimpan informasi jarak antara simpul A dan simpul B.

Terdapat beberapa algoritma untuk menyelesaikan persoalan ini, misalnya algoritma Floyd-Warshall ataupun Dijkstra. Akan tetapi pada sebuah graf tak berbobot, persoalan ini dapat diselesaikan dengan menggunakan algoritma BFS/DFS yang dipanggil berkali-kali pada setiap simpul pada graf.

Setiap kali simpul baru dikunjungi, jarak dari simpul awal ke simpul baru tersebut akan diperbarui jika jarak yang lebih pendek ditemukan, dan hasilnya akan disimpan pada matriks jarak yang telah dibuat sebelumnya. Setelah semua simpul telah dikunjungi, matriks jalur terpendek tersebut akan mengandung jalur terpendek antar semua pasang simpul yang ada pada grafik tersebut.

F. Graf Molekuler

Graf molekuler adalah suatu representasi visual dari struktur molekul suatu senyawa kimia. Graf molekuler menggambarkan struktur molekul senyawa tersebut dengan menggunakan simpul atau titik untuk mewakili atom, dan garis atau edge untuk mewakili ikatan kimia antara atom-atom tersebut. Graf molekuler dapat digunakan untuk menggambarkan struktur molekul senyawa secara lebih jelas dan untuk mempermudah analisis struktur molekul senyawa tersebut.



Gambar 2.4. Dua Representasi Graf Etanol

Sumber: <https://www.istockphoto.com/id/ilustrasi/ethanol-molecule>

Pada graf molekul di atas, simpul C (hitam), H (putih), dan O (merah) mewakili atom karbon, hidrogen, dan oksigen. Garis yang menghubungkan simpul C dan H mewakili ikatan kovalen, sedangkan garis yang menghubungkan simpul C dan O mewakili ikatan kovalen polar. Dengan menggunakan graf molekuler, struktur molekul etanol dapat dianalisis lebih jelas dan dapat diketahui bahwa etanol terdiri dari dua atom karbon, satu atom oksigen, dan lima atom hidrogen.

G. Senyawa Parafin

Senyawa parafin adalah kelompok senyawa kimia organik yang terdiri dari rantai hidrokarbon alkana yang panjang dan tidak bercabang. Parafin merupakan nama umum untuk senyawa organik hidrokarbon alkana dengan rumus umum C_nH_{2n+2} . Senyawa parafin bersifat tidak berwarna, tidak berbau, dan mudah terbakar. Senyawa parafin sering digunakan sebagai bahan bakar, pelumas, dan bahan kimia dasar untuk produksi polimer seperti plastik.

H. Indeks Wiener dan Angka Polaritas

Indeks Wiener (w) dihitung dengan menggabungkan jumlah rute terpendek antar setiap pasangan atom karbon unik yang ditemukan pada struktur molekul senyawa tersebut dengan jumlah atom dalam struktur molekul senyawa tersebut.

Angka polaritas (P) adalah angka yang menggambarkan tingkat polaritas suatu senyawa kimia. Polaritas suatu senyawa adalah kemampuan senyawa tersebut untuk memperoleh muatan negatif pada satu sisi dan muatan positif pada sisi yang lain. Semakin tinggi angka polaritas suatu senyawa, maka senyawa tersebut semakin polar atau memiliki kemampuan untuk memperoleh muatan negatif dan positif yang lebih besar.

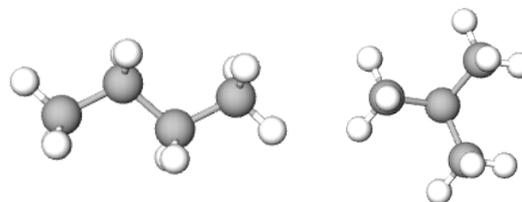
Indeks Wiener dan angka polaritas suatu senyawa yang telah diperoleh matriks jarak terpendeknya dapat diperoleh

dengan menggunakan rumus berikut:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (d)_{ij}$$

$$p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n ((d)_{ij} = 3)$$

Di mana d merupakan *graph distance matrix* atau *all-pairs shortest path matrix* dari n buah simpul dan d_{ij} menandakan jarak dari simpul i ke simpul j . W merupakan nilai indeks Wiener dan p merupakan angka polaritas.



Gambar 2.5. Graf Molekul n-butana (kiri) dan isobutana (kanan)
Sumber: Pustaka Penulis

Ilustrasi di atas menunjukkan struktur molekul dari senyawa n-butana (C_4H_{10}) dan isomernya isobutana (C_4H_{10}). Berikut merupakan *distance matrix* dari kedua senyawa tersebut.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Gambar 2.6. Matriks Jarak dari Graf n-butana (kiri) dan isobutana (kanan)

Sumber: Pustaka Penulis

Berdasarkan matriks jarak tersebut, maka dapat diperoleh bahwa indeks wiener dari senyawa tersebut ialah:

$$W \text{ n-butana} = 0.5 * (0 + 1 + 2 + 3 + 1 + 0 + 1 + 2 + 2 + 1 + 0 + 1 + 3 + 2 + 1 + 0) = 10$$

$$W \text{ isobutana} = 0.5 * (0 + 1 + 2 + 2 + 1 + 0 + 1 + 1 + 2 + 1 + 0 + 2 + 2 + 1 + 2 + 0) = 9$$

Walaupun kedua senyawa memiliki rumus molekul yang sama, akan tetapi mereka merupakan isomer yang secara struktur berbeda. Sebagai akibatnya, sifat kimia dan indeks Wiener mereka juga berbeda. Indeks polaritas dari masing-masing senyawa dapat diperoleh dengan menjumlahkan elemen matriks yang memiliki panjang lintasan 3.

$$P \text{ n-butana} = 0.5 * (1 + 1) = 1$$

$$P \text{ isobutana} = 0.5 * 0 = 0$$

Indeks polaritas n-butana bernilai 1 karena terdapat sepasang karbon yang memiliki panjang lintasan tiga. Indeks polaritas isobutana bernilai 0 karena tidak memiliki pasangan karbon yang memiliki panjang lintasan tiga.

III. PEMBAHASAN

A. Perumusan Rumus Titik Didih

Hasil publikasi Henry Wiener [7] menunjukkan bahwa titik didih dari senyawa paraffin dapat diprediksi dengan baik dengan persamaan linear sebagai berikut:

$$T_b = aW + bP + c$$

Dimana a, b, dan c merupakan konstanta di dalam suatu grup isomer, W merupakan indeks Wiener senyawa, dan P merupakan angka polaritas dari senyawa. Nilai konstanta a, b, dan c dapat ditentukan secara eksperimental.

Nilai titik didih n-alkana telah diketahui dengan baik. Persamaan di atas dapat dihubungkan dengan titik didih senyawa isomer standar n-alkana sebagai acuan agar meningkatkan kualitas prediksi. Adapun nilai indeks Wiener, polaritas, dan juga titik didih dari senyawa n-alkana yang telah dikenal dengan baik yaitu:

$$T_{bAcuan} = 745.4 \log(n + 4.4) - 689.4$$

$$W_{acuan} = \frac{1}{6}(n-1)(n)(n+1)$$

$$P_{acuan} = n - 3$$

Di mana n merupakan banyak atom karbon di dalam senyawa, T_{bAcuan} , W_{acuan} , dan P_{acuan} merupakan temperatur, indeks Wiener, dan nilai Polaritas dari senyawa n-alkana, ΔT_b merupakan selisih titik didih senyawa isomer dari pada senyawa paraffin standar n-alkana.

Melalui eksperimen dengan menguji berbagai senyawa paraffin, nilai konstanta pada persamaan linier titik didih tersebut dapat ditentukan. Adapun hasil akhir dari persamaan titik didih paraffin yang diperoleh dari percobaan Wiener yaitu sebagai berikut:

$$\Delta T_b = \frac{98}{n^2} * (W_{acuan} - W) + 5.5 * (P_{acuan} - P)$$

$$T_b = \Delta T_b + T_{bAcuan}$$

Di mana W dan P merupakan indeks Wiener dan nilai polaritas senyawa paraffin yang akan diuji dan T_b yaitu titik didih dari senyawa tersebut.

B. Implementasi Kode

Penulis mengimplementasikan sebuah program di dalam bahasa pemrograman Python. Program ini dapat menghitung indeks Wiener, nilai polaritas, serta prediksi titik didih suatu senyawa paraffin dengan berbagai rumus yang tertulis sebelumnya. Proses berjalannya program dibagi menjadi 3 tahapan, yaitu tahap pembentukan graf, tahap menentukan *All-Pairs Shortest Path* dan matriks jarak, serta tahap pengolahan dan penampilan hasil.

1. Tahap Pembentukan Graf

Tahap pembentukan graf dimulai ketika pengguna menjalankan program. Di dalam program, setiap atom karbon dianggap sebagai sebuah simpul dan setiap ikatan

dianggap sebagai sebuah sisi. Graf direpresentasikan dengan menggunakan senarai ketetanggaan. Tahapan ini dilakukan dengan memanggil fungsi `setupGraph`.

```
def setupGraph():
    global visited, dist_matrix, carbon
    print("Mengandung berapa atom molekul parafinmu? (n >= 4)")
    carbon = input()

    print("Berikut merupakan atom yang available.")
    for i in range(1, int(carbon) + 1):
        print("C{}".format(str(i)), end=" ")

    print("")
    dist_matrix = [[0 for x in range(int(carbon))] for y in range(int(carbon))]

    print("Silakan masukan banyak ikatan antar atom alkana Cn H2n+2")
    edges = input()
    print("Terimakasih! Silakan masukan ikatan-ikatan tersebut (e.g: C1 C2, C2 C3, dst)")

    for _ in range(int(edges)):
        carbon1, carbon2 = input().upper().split()
        addEdge(carbon1, carbon2)
        addEdge(carbon2, carbon1)
```

```
Mengandung berapa atom karbon molekul parafinmu? (n >= 4)
4
Berikut merupakan atom karbon yang dapat digunakan.
C1 C2 C3 C4
Silakan masukan banyak ikatan antar atom alkana Cn H2n+2
3
Terimakasih! Silakan masukan ikatan-ikatan tersebut (e.g: C1 C2, C2 C3, dst)
C1 C2
C2 C3
C3 C4
```

Gambar 3.1, 3.2. Fungsi `setupGraph` dan Proses Input Senyawa n-butana

Sumber: Pustaka Penulis

Di fungsi `setupGraph`, pengguna akan memberikan jumlah atom karbon dari molekul paraffin yang dimiliki disusul dengan banyak ikatan pada senyawa tersebut. Selanjutnya, pengguna akan memasukkan dua nomor atom karbon yang memiliki ikatan satu sama lain. Pada gambar di atas, n-butana ($C_1-C_2-C_3-C_4$) memiliki 4 atom karbon dan 3 ikatan. Ikatan tersebut berada pada atom C_1-C_2 , C_2-C_3 , dan C_3-C_4 .

2. Tahap Menentukan Distance Matrix

Tahap kedua bertanggung jawab untuk mengisi distance matrix guna memperoleh indeks Wiener dan nilai polaritas dari molekul. Hal ini dilakukan dengan cara menjalankan DFS pada setiap simpul atom karbon, sampai semua simpul selesai dikunjungi.

A. Fungsi DFS

Fungsi DFS melakukan pencarian dari simpul sumber, yang kemudian akan mengunjungi semua simpul pada graf secara rekursif. Terdapat parameter path pada fungsi yang menandakan jarak yang saat ini telah ditempuh relatif terhadap simpul sumber. Fungsi pembantu `addToMatrix` dipakai untuk menambahkan jarak pada matriks jarak.

```
def dfs(srcNode, currNode, path):
    if currNode in visited:
        return
    else:
        visited[currNode] = True
        children = graph[currNode]
        for child in children:
            if child not in visited:
                addToMatrix(srcNode, child, path + 1)
                dfs(srcNode, child, path + 1)
```

Gambar 3.3. Fungsi DFS (*Depth First Search*)

Sumber: Pustaka Penulis

3. Tahap Mengolah dan Menampilkan Hasil

Setelah distance matrix diperoleh, maka titik didih dari senyawa dapat diperoleh dengan mengikuti beberapa rumus baku yang telah diperoleh di bagian A. Adapun fungsi pembantu yang dipakai untuk mengkalkulasi nilai-nilai tersebut yaitu:

1. getWienerIndexAndPolarityFromMatrix

Fungsi ini bertanggung jawab untuk mengkalkulasi indeks Wiener dan angka polaritas dari sebuah matriks jarak global (dist_matrix) yang telah terinisialisasi.

```
def getWienerIndexAndPolarityFromMatrix():
    global dist_matrix
    wiener_idx = 0
    polarity_number = 0
    for baris in dist_matrix:
        for elemen in baris:
            wiener_idx += elemen
            if elemen == 3:
                polarity_number += 1
    return (wiener_idx / 2, polarity_number / 2)
```

Gambar 3.4. Fungsi getWienerIndexAndPolarityFromMatrix
Sumber: Pustaka Penulis

2. getNormalParaffin

Fungsi ini menerima banyak karbon dari senyawa n-alkana, dan mengembalikan indeks Wiener, angka polaritas, serta titik didihnya.

```
def getNormalParaffin(numCarbon):
    weight = 1 / 6 * (numCarbon - 1) * numCarbon * (numCarbon + 1)
    polarity = numCarbon - 3
    temp = (745.42 * math.log(numCarbon + 4.4, 10)) - 689.4
    return temp, weight, polarity
```

Gambar 3.3. Fungsi getNormalParaffin
Sumber: Pustaka Penulis

3. getDeltaBoiling

Fungsi ini menerima banyak atom karbon dari senyawa parafin uji, selisih indeks Wiener senyawa dan angka polaritasnya. Fungsi mengembalikan nilai perbedaan titik didih senyawa relatif terhadap senyawa n-alkana.

```
def getDeltaBoiling(numCarbon, deltaWiener, deltaPol):
    return 98 / (numCarbon * numCarbon) * deltaWiener + (5.5 * deltaPol)
```

Gambar 3.4. Fungsi getDeltaBoilingPoint
Sumber: Pustaka Penulis

C. Eksekusi Program

1. Contoh Keluaran

Keluaran program saat diberi data senyawa 2-metil-oktana adalah sebagai berikut:

```
P5 C:\Users\ASUS\Desktop\wiener> python -u "c:\Users\ASUS\Desktop\wiener\main.py"
Mengandung berapa atom molekul parafinmu? (n >= 4)
9
Berikut merupakan atom yang available.
C1 C2 C3 C4 C5 C6 C7 C8 C9
Silakan masukan banyak ikatan antar atom alkana Cn H2n+2
8
Terimakasih! Silakan masukan ikatan-ikatan tersebut (e.g: C1 C2, C2 C3, dst)
```

```
Terimakasih! Silakan masukan ikatan-ikatan tersebut (e.g: C1 C2, C2 C3, dst)
c1 c2
c2 c3
c3 c4
c4 c5
c5 c6
c3 c7
c3 c8
c4 c9
Distance matrix molekul:
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 3, 3, 4]
[1, 0, 1, 2, 3, 4, 2, 2, 3]
[2, 1, 0, 1, 2, 3, 1, 1, 2]
[3, 2, 1, 0, 1, 2, 2, 2, 1]
[4, 3, 2, 1, 0, 1, 3, 3, 2]
[5, 4, 3, 2, 1, 0, 4, 4, 3]
[3, 2, 1, 2, 3, 4, 0, 2, 3]
[3, 2, 1, 2, 3, 4, 2, 0, 3]
[4, 3, 2, 1, 2, 3, 3, 3, 0]
Wiener indeks molekul adalah: 88.0
Polarity number molekul adalah: 11.0
Temperatur titik didih referensi senyawa normal: 150.76645879709474
Delta temperatur: 11.21604938271605
Titik didih parafin anda adalah: 139.6 derajat Celcius
```

Gambar 3.5. Contoh Hasil Eksekusi Program pada Senyawa Paraffin 2-metil-oktana
Sumber: Pustaka Penulis

Program menampilkan matriks jarak yang mengandung nilai *All-Pairs Shortest Path* dari 2-metil-oktana, disusul dengan indeks Wiener yaitu 88, angka polaritas yaitu 11, titik didih alkana referensi n-nonana, dan titik didih hasil prediksi dari 2-metil oktana, yaitu 139.6 derajat Celcius.

2. Analisis Keakuratan

Program akan dijalankan dan diberikan beberapa masukan berupa senyawa paraffin. Untuk mengkaji keakuratannya, nilai hasil prediksi dari senyawa-senyawa ini akan dibandingkan dengan nilai titik didih referensi [8].

Senyawa Parafin	Graf Molekuler	Indeks Wiener	T _{pred} (°C)	T _{ref} (°C)	Galat (°C)
Isobutana (C ₄ H ₁₀)		9	-12.0	-11.7	0.3
2-metil-pentana (C ₆ H ₁₄)		32	60.6	60	0.6
3-ethylheksana (C ₈ H ₁₈)		72	118.3	119	0.7
3-3-4-trimetil heksana (C ₉ H ₂₀)		88	139.6	139.6	0
2-metil-oktana (C ₉ H ₂₀)		114	143.5	143.3	0.2
3-metil-dodekana (C ₁₃ H ₂₈)		346	230.4	229.3	1.1

Tabel 3.1. Tabel Hasil Prediksi Titik Uji Program terhadap Berbagai Senyawa Parafin

Tabel di atas menunjukkan graf molekul, nilai wiener, titik didih prediksi, titik didih referensi, serta selisih/galat dari nilai prediksi dan nilai referensi. Dari beberapa senyawa uji di atas, rata-rata kesalahan yang diperoleh dari hasil prediksi dan nilai referensi adalah 0.43°C . Kesalahan cukup baik dan masih dalam batas toleransi, mengingat bahwa titik didih suatu senyawa dapat mengalami fluktuasi karena berbagai faktor seperti tekanan, kelembapan, dan juga ketinggian dilakukannya pengukuran.

Dapat diamati juga tren bahwa nilai indeks Wiener turut bertambah ketika senyawa semakin besar. Semakin rendah indeks Wiener, maka berarti molekul tersebut semakin rapat. Molekul yang rapat memiliki gaya antarmolekul yang lebih rendah, sehingga menurunkan titik didih.

3. Aplikasi Lain (Memprediksi Rumus Senyawa)

Program yang telah diimplementasikan memiliki potensi untuk memprediksi rumus parafin alkana berdasarkan titik didihnya. Untuk melakukan hal ini, maka dapat dicoba semua kemungkinan titik didih senyawa dengan nomor karbon di selang tertentu. Jika titik didih tersebut masuk di dalam ambang toleransi prediksi, maka senyawa tersebut berkemungkinan untuk memiliki gugus fungsi yang sama.

Sebagai contoh, diketahui bahwa titik didih referensi dari senyawa parafin Hentrikontana ($\text{C}_{31}\text{H}_{64}$) adalah 458°C . Hentrikontana adalah senyawa penyusun utama lilin yang kita kenal. Program yang telah dimodifikasi dapat mengidentifikasi rumus senyawa yang berpotensi memiliki titik didih pada selang temperatur yang telah diberikan.

```
PS C:\Users\ASUS\Desktop\wiener> python -u "c:\Users\ASUS\Desktop\wiener.py"
Berapa titik didih dari zat alkanamu?
458
Senyawa ini mungkin memiliki 30 atom karbon dan memiliki rumus C30H62
Senyawa ini mungkin memiliki 31 atom karbon dan memiliki rumus C31H64
```

Gambar 3.6. Prediksi Rumus Molekul dari Senyawa Hentrikontana berdasarkan Titik Didih
Sumber: Pustaka Penulis

Berikut merupakan beberapa contoh lain eksekusi program. Pada program diberikan temperatur titik didih beberapa senyawa yang telah diperoleh di bagian 2, yaitu 2-metil-pentana (C_6H_{14}) yaitu $\sim 62^{\circ}\text{C}$ dan 2-metil-oktana (C_9H_{20}) yaitu $\sim 143^{\circ}\text{C}$. Program berhasil mengidentifikasi rumus senyawa dari kedua input uji.

```
PS C:\Users\ASUS\Desktop\wiener> python -u "c:\Users\ASUS\Desktop\wiener.py"
Berapa titik didih dari zat alkanamu?
62
Senyawa ini mungkin memiliki 6 atom karbon dan memiliki rumus C6H14

PS C:\Users\ASUS\Desktop\wiener> python -u "c:\Users\ASUS\Desktop\wiener.py"
Berapa titik didih dari zat alkanamu?
143
Senyawa ini mungkin memiliki 9 atom karbon dan memiliki rumus C9H20
```

Gambar 3.7. 3.8. Prediksi Rumus Molekul dari Senyawa 2-metil-pentana dan 2-metil-oktana berdasarkan Titik Didih
Sumber: Pustaka Penulis

IV. KESIMPULAN DAN SARAN

Makalah ini mengulas penerapan teori graf di dalam bidang kimia topologi. Menggunakan *All-Pairs Shortest Path*, dapat diperoleh nilai indeks Wiener dari suatu senyawa parafin. Titik didih parafin lalu dapat dimodelkan sebagai persamaan linear yang bergantung pada indeks tersebut. Konstanta persamaan linear ditentukan secara eksperimental. Persamaan yang diperoleh dari hasil percobaan Henry Wiener cukup baik di dalam memprediksi variasi titik didih dari berbagai senyawa.

Indeks Wiener hanyalah salah satu dari sekian banyak indeks yang ada di bidang kimia topologi. Ulasan lebih lanjut tentang penerapan konsep graf di indeks topologi jenis lain dapat dilakukan. Indeks lain tersebut misalnya Hyper-Wiener index di bidang biokimia dan *Hardware security*, Estrada index di bidang pelipatan protein atau Szeged index di bidang biokimia dan teori informasi.

V. LAMPIRAN

Kode program, data uji, serta input dari program yang digunakan untuk makalah ini dapat diakses di link berikut:
https://github.com/williamnixon20/wiener_index/tree/main

VI. UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur penulis panjatkan pada hadirat Tuhan YME. Atas rahmat dan kemudahan yang diberikan kepada penulis, sehingga makalah yang berjudul "Penerapan Konsep *All-Pairs Shortest Path* dalam Memprediksi Titik Didih Senyawa Parafin Menggunakan Indeks Wiener" dapat diselesaikan. Penulis juga ingin berterima kasih kepada seluruh dosen pengampu mata kuliah IF2120 Matematika Diskrit, terutama Dr. Fariska Zakhralativa Ruskanda, S.T., M.T. selaku pengajar K02 atas satu semester ini. Tak lupa, penulis juga ingin berterimakasih kepada keluarga dan juga teman-teman yang selalu memberi dukungan selama satu semester ini. Semoga makalah ini dapat bermanfaat bagi para pembaca.

REFERENSI

- [1] Egloff, G., Sherman, J. and Dull, R.B., 1940. Boiling point relationships among aliphatic hydrocarbons. *The Journal of Physical Chemistry*, 44(6), pp.730-745.
- [2] Gutman, I. and Estrada, E., 1996. Topological indices based on the line graph of the molecular graph. *Journal of chemical information and computer sciences*, 36(3), pp.541-543.
- [3] Munir, Rinaldi. 2022. Graf (Bagian 1). Diakses 10 Desember pukul 19.34 dari <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Graf-2020-Bagian1.pdf>
- [4] Munir, Rinaldi. 2022. Graf (Bagian 2). Diakses 10 Desember 2022 pukul 20.45 dari <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Graf-2020-Bagian2.pdf>
- [5] Munir, Rinaldi. 2022. Pohon (Bagian 1). Diakses 10 Desember 2022 pukul 22.41 dari <https://informatika.stei.itb.ac.id/~rinaldi.munir/Matdis/2020-2021/Pohon-2020-Bag1.pdf>
- [6] Rouvray, D.H., 2002. The rich legacy of half a century of the Wiener index. In *Topology in Chemistry*. Woodhead Publishing.
- [7] Wiener, H., 1947. Structural determination of paraffin boiling points. *Journal of the American chemical society*.
- [8] <https://gestis-database.dguv.de/data/>, GESTIS Substance Database. Diakses 12 Desember 2022 pukul 16:55

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa makalah yang saya tulis ini adalah tulisan saya sendiri, bukan saduran, atau terjemahan dari makalah orang lain, dan bukan plagiasi.

Bandung, 12 Desember 2020

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized, cursive 'W' followed by a horizontal line extending to the right.

William Nixon 13521123