

جامعة الحدود الشمالية www.nbu.edu.sa & jnbas.nbu.edu.sa

طباعــة ـ ردمـد: 7022-1658 إلكتروني ـ ردمد: 7014-1658



- الجلد (7)
- السمندد (2) نو فمبر 2022م ربيع الثاني 1444هـ

# J N B A S

# مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) هيئة التحرير

#### رئيس التحرير

الدكتور/ عبدالله بن فرحان المدهري جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

#### نائب رئيس هيئة التحرير

الدكتور/ صالح بن محمد التويجري جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

#### مدير هيئة التحرير

الأستاذ الدكتور/ أسامة حسانين سيد حسانين جامعة الحدود الشمالية ـ المملكة العربية السعودية

#### أعضاء هيئة التحرير

الأستاذ الدكتور/ محمد سليمان شريف جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الأستاذ الدكتور/ محمد شعبان زكي محمد جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الأستاذ الدكتور/ صفوت عبدالحليم محمود جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الأستاذ الدكتور/ محمد حمدي هلال جامعة الحدود الشمالية ـ المملكة العربية السعودية

الدكتور/ شبهاب بن أحمد الذايدي جامعة الحدود الشمالية ـ المملكة العربية السعودية

الدكتور/ ناصر بن سالم القحطاني جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الدكتور/ محمد عبدالغفار عاشور جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الدكتور/ يحيى الفاهم سعيد

جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

#### © 2022م (1444هـ) جامعة الحدود الشمالية

جميع حقوق النشر محفوظة ولا يسمح بإعادة نشر أي جزء من المجلة أو نسخه بأي شكل وبأي وسيلة سواء كانت إلكترونية أو آلية بما في ذلك التصوير والتسجيل أو الإدخال في أي نظام حفظ معلومات أو استعادتها دون الحصول على موافقة مكتوبة من مجلة الشمال.

#### الهيئة الاستشارية الدولية

الأستاذ الدكتور/ سلطان توفيق العدوان رئيس اتحاد الجامعات العربية - الأردن

الأستاذ الدكتور/ عبدالعزيز بن جمال الدين الساعاتي جامعة الملك فيصل ـ المملكة العربية السعودية

الأستاذ الدكتور/ مدثر عزالدين التنقاري جامعة الخرطوم ـ السودان

الأستاذ الدكتور/ محمد موسى الشمراني جامعة الملك عبدالعزيز ـ المملكة العربية السعودية

الأستاذ الدكتور/ أحمد عبدالله الخازم جامعة الملك سعود ـ المملكة العربية السعودية

الأستاذة الدكتورة/ أنيتا أوومن جامعة الحدود الشمالية - المملكة العربية السعودية

الدكتور/ ثانكافيلو موتهوكومار جامعة بهارثيار - الهند

> الدكتور/طاهر محمود خان جامعة موناش ـ ماليزيا

#### التدقيق اللغوي

الدكتور/ محمد حمد الخرشية (مدقق اللغة الإنجليزية)

سكرتير التحرير

الأستاذ/ محمد عبدالحكم





## مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS)

دورية علمية محكمة

تصدر عن مركز النشر العلمي والتأليف والترجمة جامعة الحدود الشمالية

المجلد السَّابع ــ العدد الثاني نوفمبر 2022م ــ ربيع الثاني 1444هـ

الموقع والبريد الإلكتروني

http://jnbas.nbu.edu.sa s.journal@nbu.edu.sa & s.journal.nbu@gmail.com

طباعة ـ ردمد: 7022-1658 / إلكتروني ـ ردمد: 7014-1658

## مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS)

#### التعريف بالمجلة

تعنى المجلة بنشر البحوث والدراسات العلمية الأصيلة في مجال العلوم الأساسية والتطبيقية، باللغتين العربية والإنجليزية، كما تهتم بنشر جميع ما له علاقة بعرض الكتب ومراجعتها أو ترجمتها، وملخصات الرسائل العلمية، وتقارير المؤتمرات والندوات العلمية، وتصدر مرتين في السنة (مايو ـ نوفمبر).

#### الرؤية

الريادة في نشر البحوث العلمية المحكمة، وتصنيف المجلة ضمن أشهر الدوريات العلمية العالمية.

#### الرسالة

نشر البحوث العلمية المحكمة في مجال العلوم الأساسية والتطبيقية وفق معايير عالمية متميزة.

#### أهداف المجلة

- أن تكون المجلة مرجعًا علميًا للباحثين في العلوم الأساسية والتطبيقية.
- ﴾ تلبية حاجة الباحثين إلى نشر بحوثهم العلمية، وإبراز مجهوداتهم البحثية على المستويات المحلية والإقليمية والعالمية.
  - 3) المشاركة في بناء مجتمع المعرفة بنشر البحوث الرصينة التي تؤدي إلى تنمية المجتمع.
    - 4) تغطية أعمال المؤتمرات العلمية المحكمة.

#### شروط قبول البحث

- 1) الأصالة والابتكار وسلامة المنهج والاتجاه.
- الالتزام بالمناهج والأدوات والوسائل العلمية المتبعة في مجاله.
  - 3) الدقة في التوثيق والمصادر والمراجع والتخريج.
    - 4) سلامة اللغة.
- 5) أن يكون البحث غير منشور أو مقدم للنشر في أي مكان آخر.
- 6) أن يكون البحث المستل من الرسائل العلمية غير منشور أو مقدم للنشر، وأن يشير الباحث إلى أنه مستل.

#### الاشتراك والتبادل

مركز النشر العلمي والتأليف والترجمة جامعة الحدود الشمالية ص.ب. 1321، عرعر، 91431 الملكة العربية السعودية.

#### للمر اسلة

رئيس التحرير مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) جامعة الحدود الشمالية ص.ب 1321، عرعر 91431 المملكة العربية السعودية. هاتف: \$966146615499 فاكس: \$966146614439 للكسرة المساحدة فاكس: \$966146614439 للمساحدة المساحدة فاكس: \$966146614439 للمساحدة المساحدة فاكس: \$966146614439 للمساحدة المساحدة فاكس: \$966146614439 للمساحدة المساحدة فاكس المساحدة ال

البريد الإلكتروني: s.journal.nbu@gmail.com & s.journal@nbu.edu.sa الموقع الإلكتروني: http://jnbas.nbu.edu.sa



### شروط النشر

#### أولاً: ضوابط النص المقدم للنشر

- 1) ألا تزيد صفحاته عن (35) صفحة من القطع العادي (A4).
- أن يحتوي على عنوان البحث وملخصه باللغتين العربية والإنجليزية في صفحة واحدة، بحيث لا يزيد عن (250) كلمة للملخص، وأن يتضمن البحث كلمات مفتاحية دالة على التخصص الدقيق للبحث باللغتين، بحيث لا يتجاوز عددها (6) كلمات، توضع بعد نهاية كل ملخص.
  - 3) أن يذكر اسم المؤلف وجهة عمله بعد عنوان البحث مباشرة باللغتين العربية والإنجليزية.
- 4) أن تقدم البحوث العربية مطبوعة بخط (Simplified Arabic)، بحجم (14) للنصوص في المتن، وبالخط نفسه بحجم (12) للهوامش.
- أن تقدم البحوث الإنجليزية مطبوعة بخط (Times New Roman) بحجم (12) للنصوص في المتن، وبالخط نفسه بحجم
   (9) للهوامش.
- 6) كتابة البحث على وجه واحد من الصفحة، مع ترك مسافة سطر واحد بين السطور، وتكون الحواشي 2.5 سم على الجوانب الأربعة للصفحة، بما يعادل 1.00 إنش (بوصة).
  - 7) التزام الترتيب الموضوعي الآتي:

المقدمة: تكون دالة على موضوع البحث، والهدف منه، ومنسجمة مع ما يُرِدُ في البحث من معلومات وأفكار وحقائق علمية، كما تشير باختصار إلى مشكلة البحث، وأهمية الدراسات السابقة.

العرض: يتضمن التفاصيل الأساسية لمنهجية البحث، والأدوات والطرق التي تخدم الهدف، وترتب المعلومات حسب أولوبتها.

النتائج والمناقشية: يجب أن تكون واضحة موجزة، مع بيان دلالاتها دون تكرار.

الخاتمة: تتضمن تلخيصًا موجزًا للموضوع، وما توصل إليه الباحث من نتائج، مع ذكر التوصيات والمقترحات.

- ان تدرج الرسوم البيانية والأشكال التوضيحية في النص، وترقم ترقيما متسلسلا، وتكتب أسماؤها والملاحظات التوضيحية أسفلها.
- 9) أن تدرج الجداول في النص، وترقم ترقيماً متسلسلاً، وتكتب أسماؤها أعلاها، وأما الملاحظات التوضيحية فتكتب أسفل الجدول.
- (10) ألا توضع الهوامش أسفل الصفحة إلا عند الضرورة فقط، ويشار إليها برقم أو نجمة، ويكون الخط فيها بحجم (12) للعربي و (9) للإنجليزي.
  - 11) لا تنشر المجلة أدوات البحث والقياس، وتقوم بحذفها عند طباعة المجلة.
- (12) أن يُراعى في منهج توثيق المصادر والمراجع داخل النص نظام (APA)، وهـو نظام يعتمد ذكر الاسم والتاريخ (name/year) داخل المتن، ولا يقبل نظام ترقيم المراجع داخل النص مع وضع الحاشية أسفل الصفحة، وتوضع المصادر والمراجع داخل المتن بين قوسين حسب الأمثلة الآتية: يذكر اسم عائلة المؤلف متبوعا بفاصلة، فسنة النشر، مثلا: (مجاهد، 1988م). وفي حالة الاقتباس المباشر يضاف رقم الصفحة مباشرة بعد تاريخ النشر مثلا: (خيري، 1985م، ص:33). أما إذا كان للمصدر مؤلفان فيذكران مع اتباع الخطوات السابقة مثلا: (الفالح وعياش، 1424هـ). وفي حالة وجود أكثر من مؤلفين فتذكر أسماء عوائلهم أول مرة، مثلا: (مجاهد والعودات والشيخ، 1408هـ)، وإذا تكرر الاقتباس من المصدر نفسه فيشار إلى اسم عائلة المؤلف الأول فقط، ويكتب بعده وأخرون مثل: (مجاهد وآخرون، 1408هـ)، على أن تكتب معلومات النشر كاملة في قائمة المصادر والمراجع.
  - 13) تخرج الأحاديث والآثار على النحو الآتي:

(صحيح البخاري، ج:1، ص: 5، رقم الحديث 511).

- 14) توضع قائمة المصادر والمراجع في نهاية البحث مرتبة ترتيباً هجائياً حسب اسم العائلة، ووفق نظام جمعية علم النفس الأمريكية (APA) الإصدار السادس، وبحجم (12) للعربي و(9) للإنجليزي، وترتب البيانات الببليوغرافية على النحو الآتي:
  - الاقتباس من كتاب لمؤلف واحد:

الخوجلي، أحمد. (2004م). مبادئ فيزياء الجوامد. الخرطوم، السودان: عزة للنشر والتوزيع.

- الاقتباس من كتاب لأكثر من مؤلف:
- نيوباي، تيموثي؛ ستيبتش، دونالد؛ راس، جيمس. (1434هـ/2013م). *التقنية التعليمية للتعليم والتعلم*. الرياض، الملكة العربية السعودية: دار جامعة الملك سعود للنشر.
  - الاقتياس من دورية:
- النافع، عبداللطيف حمود. (1427هـ). أثر قيادة السيارات خارج الطرق المعبدة في الغطاء النباتي بالمنتزهات البرية: دارسة في حماية البيئة، في وسط الملكة العربية السعودية. المجلة السعودية في علوم الحياة، 14 (1)، 53-77.
  - الاقتباس من رسالة ماحستبر أو دكتوراه:
- القاضي، إيمان عبدالله. (1429هـ). *النباتات الطبيعية للبيئة الساحلية بين رأسي تنورة والملوح بالمنطقة الشرقية:* دراسة في الجغرافيا النباتية وحماية البيئة. رسالة دكتواره غير منشورة، كلية الأداب للبنات، الدمام المملكة العربية السعودية: جامعة الملك فيصل.
  - الاقتباس من الشبكة العنكبوتية (الإنترنت):
    - الاقتباس من كتاب:
- - الأقتباس من مقالة في دورية:
- 25) يلتزم الباحث بترجمة (أو رومنة) أسماء المصادر والمراجع العربية إلى اللغة الإنجليزية في قائمة المصادر والمراجع. وعلى سبيل المثال:
- الجبر، سليمان. (1991م). تقويم طرق تدريس الجغرافيا ومدى اختلافها باختلاف خبرات المدرسين وجنسياتهم وتخصصاتهم في المرحلة المتوسطة بالمملكة العربية السعودية. مجلة جامعة الملك سعود- العلوم التربوية، 3(1)، 170-143
- Al-Gabr, S. (1991). The Evaluation of Geography Instruction and the Variety of its Teaching Concerning the Experience, Nationality, and the Field of Study in Intermediate Schools in Saudi Arabia (in Arabic). Journal of King Saud University- Educational Sciences, 3(1), 143-170.
  - 16) تستخدم الأرقام العربية الأصلية (0، 1، 2، 3، ...) في البحث.
  - 17) تؤول جميع حقوق النشر للمجلة في حال إرسال البحث للتحكيم وقبوله للنشر.

#### ثانياً: الأشياء المطلوب تسليمها

- 1) نسخة إلكترونية من البحث بصيغتي (WORD) و (PDF)، وترسلان على البريد الإلكتروني الآتي: s.journal@nbu.edu.sa & s.journal.nbu@gmail.com
- 2) السيرة الذاتية للباحث، متضمنة اسمه باللغتين العربية والإنجليزية، وعنوان البريد الإلكتروني الحالي، ورتبته العلمية.
  - 3) تعبئة النماذج الآتية:
  - أ نموذج طلب نشر بحث في المجلة.
  - ب نموذج تعهد بأن البحث غير منشور أو مقدم للنشر في مكان آخر.

#### ثالثاً: تنبيهات عامة

- 1) أصول البحث التي تصل إلى المجلة لا تردّ سواء أُنُشرَتْ أم لم تنشر.
  - 2) الآراء الواردة في البحوث المنشورة تعبر عن وجهة نظر أصحابها.

## مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (1658-7014) مجلة الشمال العلوم الأساسية والتطبيقية (1658-7014)

نوفمبر 2022م - ربيع الثاني 1444هـ

المجلد السابع - العدد الثاني

## المحتويات الأبحاث العربية

● دراســة مقارنــة مظهريــة وتشــريحية لثمــار ثلاثــة أصنــاف مــن نخيــل التمــر

70	phoenix dactylifera L. في منطقتي وادي وساحل حضرموت – اليمن محروس عبدالله باحويرث، ياسر سعيد باهرمز، جعفر عمر باعمر
	الأبحاث الإنجليزية
	● تحليـل استقرار فـون نيومـان لطريقـة الحجـم المنتهيـة لحـل معادلـة كوشـي
	الكسيرية
81	ريم العدوان
	<ul> <li>• توليف مركبات جديدة من معقدات رباعي القصدير وتحليلها باستعمال ثنائي</li> </ul>
	كبريت الكربمات
91	علي العكرمي
	<ul> <li>● البروتينات غير التركيبية دورها في تخليق الحمض النووي الريبي وإمكانية</li> </ul>
	العدوى وتطوير اللقاحات لفيروس كورونا
102	احمد خزيم الزهراني
	<ul> <li>● اختبارات الاستقلالية للمتغيرات الفئوية: دراسة محاكاة باستخدام مونت</li> </ul>
	كارلو
114	عبدالعزيز بن أحمد العنزي

## الأبحاث باللغة العربية

#### مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) (ربيع الثاني 1444هـ/ نوفمبر 2022م) المجلد (7)، العدد (2)



المملكة العربية السعودية جامعة الحدود الشمالية (NBU) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) طباعة ردمد: 7012-1658 الكثروني – ردمد: 7014-1658

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa DIAMI ALPA SPANIE STANDARD ST

دراسة مقارنة مظهرية وتشريحية لثمار ثلاثة أصناف من نخيل التمر .phoenix dactylifera L في منطقتي وادي و ساحل حضرموت – اليمن

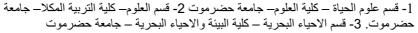
محروس عبدالله باحويرث 1 ياسر سعيد باهرمز (\*)2 جعفر عمر باعمر 3 (قدم للنشر في 1444/2/5هـ)

ملخص البحث: أجريت هذه الدراسة على ثلاثة أصناف من نخيل التمر (جزاز، سقطري وبرحي) نامية في بيئات مختلفة في الموسم الزراعي 2020م في منطقتي وادي و ساحل حضرموت وذلك بهدف مقارنة بعض الصفات المظهرية والتشريحية للثمار فيما بينها، وحللت النتائج باستخدام تصميم القطاعات كاملة العشوائية وأظهرت النتائج المتحصل عليها أن لعامل البيئة تأثيراً في طول الثمرة وعرضها ووزنها وحجمها، وسمك طبقة الكيوتكل وسمك الغلاف الوسطي حيث تفوقت أصناف منطقة وادي حضرموت معنويا في سمك طبقة الكيوتكل, بينما تفوقت أصناف منطقة ساحل حضرموت معنويا في طول الثمرة وعرضها ووزنها وحجمها وسمك الغلاف الوسطي، كما كان لعامل الصنف تأثيراً واضحاً حيث تفوق صنف الجزاز معنويا في طول الثمرة وي طول الثمرة ووزنها وحجمها وسمك الغلاف الوسطي.

كلمات مفتاحية: تشريح ثمرة نخيل التمر، طول الثمرة، وزن الثمرة، سمك طبقة الكيوتكل، سمك الغلاف الوسطى.

. INBAS © 1658-7022 م) نشر بواسطة جامعة الحدود الشمالية .جميع الحقوق محفوظة.

#### للمراسلة:



<sup>\*</sup> الباحث المراسل. البريد الالكتروني: bahrmez@gmail.com



DOI:10.12816/0061186

e-mail: bahrmez@gmail.com

Journal of the North for Basic and Applied Sciences, Vol. (7), Issue (2), (November 2022/ Rabi' II 1444 H) 70-80



## KINGDOM OF SAUDI ARABIA Northern Border University (NBU)

Journal of the North for Basic & Applied Sciences (JNBAS)

p - ISSN: 1658 -7022 / e-ISSN: 1658 - 7014

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa



# A comparative morphological and anatomical studies of the fruits of three date palm cultivars (phoenix dactylifera L.) in valley and coast of Hadhramout Regions – Yemen

Mahrous Abdullah Bahwerth 1 Yasser Saeed Bahramz (\*)2 Jaafar Omar BaOmar 3

(Received 21/4/2022; accepted 1/9/2022)

Abstract: This comparative study was conducted on three cultivars of date palms (Jazzaz, Socotrai and Barhi) grown in different environments in the agricultural season 2020 AD in the regions of the Valley and the coast of Hadhramout including the morphological and anatomical characteristics of the fruits. The results were analyzed using a randomized complete sector design. The present study revealed the environmental effect on the length, width, weight, volume, cuticle thickness and Mesocarp thickness. The date palm cultivars in Hadhramout Valley region were significantly superior in cuticle thickness, while those of the Hadhramout coast region were significantly superior in the length, width, weight, volume and Mesocarp thickness, The cultivar type had also a clear effect, as the al-Jazzaz cultivar significantly outperformed the fruit length, weight, volume and Mesocarp thickness.

**Keywords:** anatomy of the date palm fruit, length of the fruit, weight of the fruit, cuticle thickness, Mesocarp thickness.

1658-7022© JNBAS. (1444 H/2022). Published by Northern Border University (NBU). All Rights Reserved.



#### Corresponding Author:

- 1. Department of Life Sciences, College of Science, University Hadhramout.
- 2. Department of Science, College of Education Mukalla, University Hadhramout.
- 3. Department of Marine Biology, College of Environment and Marine Biology, University Hadhramout.

\*corresponding author. Email: bahrmez@gmail.com

e-mail: bahrmez@gmail.com

#### 1. المقدمة:

يعد نخيل التمر .*Phoenix dactylifera* L احدى اشجار الفاكهة التي تنتمي إلى العائلة النخيلية Arecaceae، وتضم حوالي 240 جنس و4000 نوع (إبراهيم، 2008 ; Henderson, 1999). وتتميز بصفات متعددة فريدة، وقد ذكر ها الله جل وعلا في كتابه في أكثر من موضع منها، قال تعالى ( فَأَجَآءَهَا ٱلْمَخَاصُ إِلَىٰ جِذَّع ٱلنَّخْلَةِ قَالَتْ يُلَيِّنَنِي مِتُّ قَبْلَ هَٰذَا وَكُنتُ نَسِّيا مَّنسِيًّا (23) فَنَادَلُهَا مِن تَحْتِهَا أَلَّا تَحْزَنِي قَدْ جَعَلَ رَبُّكِ تَحْتَكِ سَرِيًّا (24) وَهُزِّيَ إِلَيْكِ بِجِذْع ٱلنَّخْلَةِ تُسَلِّقِطُ عَلَيْكِ رُطُبًا جَنِيًّا ﴿25) فَكُلِي وَٱشْرَبِي وَقَرِّي عَيْنَأَ فَإِمَّا تَرَبِنَّ مِنَ ٱلْبَشَرِ أَحَدًا فَقُولِيَ إِنِّي نَذَرْتُ لِلرَّحْمَٰنِ صَوْمًا فَلَنَ أَكَلِّمَ ٱلْيَوْمَ إنسِيًّا (26) .(سورة مريم 23 – 26)، فضلا عن ذكرها في الاحاديث النبوية، فعن السيدة عائشة رضى الله عنها قالت: قال رسول الله صلى الله عليه وسلم: (يا عائشة بيت لا تمر فيه جياع أهله) (رواه الإمام مسلم وأبو داود والترمذي).

وتنتشر زراعة النخيل في المناطق المدارية وشبة المدارية، وهي أشجار مستديمة الخضرة وحيدة الفلقة، وحيدة الجنس ثنائية المسكن Kavand, Ebadi, Shuraki, Abdossi & 2015) ,Mostafevy). وبينت دراسة المنظمة العربية للتنمية الزراعية (2003) أن زراعة أشجار النخيل تحتاج إلى ظروف مناخية عالية الحرارة وتلك الظروف تتوافر ما بين خطي عرض 15-35 شمال خط الاستواء وهذا ما تمتاز به معظم الدول العربية. وقد انتشرت زراعة النخيل في مناطق مختلفة من اليمن منها وادي حضرموت، وادي حجر، وتهامة، وجزيرة سقطرى وغيرها من الوديان والمناطق الاخرى سواء الداخلية أو الساحلية (الكثيري، 2000). وتقدر المساحة المزروعة بالنخيل في اليمن حوالي 13.85 ألف هكتار في عام 2017 و بلغ إنتاج التمور حوالي 48.17 ألف طن (المنظمة العربية للتنمية الزراعية، 2018).

أوضح التميمي ومحمد والقطراني (2014) أن هناك تأثير معنوي للموقع الزراعي في الصفات الفيزيائية والفسيولوجية والتشريحية لثمار صنف البرحي، كما لوحظ أن هناك تأثيراً معنوياً لمرحلة نمو الثمرة حيث أخذت الصفات الفيزيائية والتشريحية بالزيادة المعنوية 2. العرض بتقدم مراحل النمو المختلفة (حبابوك، جمري وخلال). وبين حومد (2017) أن هناك تأثير معنوي للموقع الزراعي في طول وقطر وحجم ثمرة نخيل التمر في مرحلة الخلال لصنف اسرشي. وأظهرت دراسة الإبريسم (2017) وجود فروق معنوية في وزن وحجم ثمرة نخيل التمر صنف البرحي باختلاف مواقع زراعته.

> وأظهرت نتائج دراسة عبدالواحد (2012) أن لمواقع الزراعة تأثير معنوي في الصفات الفيزيائية والكيميائية لثمار نخيل التمر. وكما أشار الابريسم (2011) تفوق صنف خضراوي (بغداد) في صفة وزن وحجم الثمرة المزروع في منطقتي البصرة وبغداد. وأشار العيسى (2006) في دراسته لثلاثة أصناف من نخيل التمر (الخلاص، شيشي، ازيز) النامية في الأحساء والقطيف في المملكة

العربية السعودية أن هناك اختلافات في حجم الثمرة ووزنها وطولها وقطرها للأصناف الثلاثة المدروسة، وبين كل صنف مزروع في الأحساء مقارنة بمثيله المزروع في القطيف.

ثمرة نخيل التمر لبية وهي عبارة عن مبيض ناضج تحتوي على نواة واحدة محاطة بغلاف غشائي رقيق هو غلاف الثمرة الداخلي Endocarp، أما غلاف الثمرة الوسطي Mesocarp فيتكون من الغلاف الوسطي الخارجي والغلاف الوسطي الداخلي تفصل بينهما حلقة من خلايا تانينية سمكها 2-5 صف، بينما الغلاف الخارجي Exocarp يتركب من البشرة (سمكها صف واحد من الخلايا) وتكون مغطاة بطبقة من مادة شمعية تسمى الكيوتكل cuticle ويليها طبقة تحت البشرة Hypodermal طبقة تحت البشرة .(Hassan, Baz & Hassan 2010

تستخدم الصفات التشريحية للثمار للتمييز بين الأصناف المختلفة Sakr, Abu Zeid, Hassan, Baz & للنخيل، ففي دراسة (2010) Hassan وجدوا أن هناك تباين في معدلات سمك طبقات الثمرة (الكيوتكل، الغلاف الوسطى، الغلاف الخارجي) في ثمانية أصناف من نخيل التمر (زعلول، برحى، أمهات، بنت عيشة، السماني، حياني، عمري وكوبوشي). وذكرت سويد (2012) أن هناك تباين في المقاطع النسيجية لثمار الأصناف المدروسة في أغلب الصفات التشريحية حيث تفوق الصنف الليلوي معنوياً على الصنف الخضراوي في معدل سمك البشرة، وتفوقا معنوياً على الصنف البريم في معدل سمك الغلاف الخارجي، ولم يختلف صنف الخضر اوي معنوياً على الصنفين بريم والليلوي في هذه الصفة. بينما اختلفت الأصناف المدر وسة معنوياً في معدل سمك الغلاف الوسطى، ولم تختلف معنوياً في معدل سمك طبقة الكيوتكل.

وتهدف هذه الدراسة لمقارنة بعض الصفات المظهرية والتشريحية لثمار لثلاثة أصناف من نخيل التمر في منطقتي وادي وساحل حضرموت وهي صنفي الجزاز والسقطري (وهما صنفان محليان) وصنف البرحي و هو صنف مستورد.

#### أولاً: الوصف الجغرافي لمناطق الدراسة أ. وادي حضرموت (مديرية القطن)

تقع مديرية القطن في وسط وادي حضر موت بين بين خطي طول (50' 47° - 34' 48°) شرقاً، وبين دائرتي عرض (36' 15° - 14' 16°) شمالاً، وترتفع عن سطح البحر بـ 1040 متر. (وزارة التخطيط و التعاون الدولي 2015).

ساحل حضرموت (مديريتي غيل باوزير والمكلا) تقع مديرية غيل باوزير ضمن نطاق الشريط الساحلي لمحافظة حضر موت بين خطى طول (46

و48) وخطي عرض (14.51 و 14.44), وترتفع عن سطح البحر من 80-300 م، وتبعد عن المكلا بنحو 50 كم. (حبيشان وباحميش وبن يحيى 2000). وتقع مديرية مدينة المكلا في الجزء الجنوبي بين دائرتي عرض (14.20- 14.45) شمالاً وخطي طول (48.50) شرقاً وترتفع عن سطح البحر بـ 5- 300 م. (بن شملان 2020). ويوضح جدولي 1 و 2 مناخ وترب منطقتي الدراسة:

#### ثانياً: مواقع الدراسة

تم النزول الميداني إلى مناطق الدراسة و هي:

مزرعة الجوهي بمنطقة حذية التابعة لمديرية القطن في وادي حضرموت.

2- مزرعة حوش ورشة المؤسسة المحلية للمياه والصرف الصحي بالحرشيات التابعة لمديرية المكلا.

3- مزرعة عوشان بمنطقة حباير التابعة لمديرية غيل باوزير.

#### جدول(1): عوامل المناخ بمنطقتي وادي وساحل حضرموت لسنة 2020م

متوسط كمية الامطار (ملم)	متوسط سرعة الرياح (متر/ثانية)	درجات الحرارة الصغرى (المئوية)	درجات الحرارة العظمى (المنوية)	الرطوبة النسبية (%)	المنطقة
62.6	3.6	18.7	34.1	34.3	وادي حضر موت
28.5	3.3	22.3	31.3	58.2	ساحل حضر موت

(وكالة ناسا 2021).

#### جدول (2): الصفات الفيزيائية والكيمائية لترب مزارع الدراسة بمنطقتي وادي وساحل حضرموت

	الايونات الذائبة مليمكافئ/ لتر								EC	العمق		رقم
Cl-	SO <sub>4</sub> -	НСО3	C03	<b>K</b> <sup>+</sup>	Na <sup>+</sup>	Mg <sup>+</sup>	Ca <sup>+</sup>	РН	ملیسیمانز/سم	(سنم)	المزرعة	العينة
16.7	65.0	10.0	2.0	6.6	22.6	35.0	25.0	6.1	9.0	30	الجوهي	1
11.1	15.0	2.6	0.8	2.3	8.7	9.4	7.6	6.6	2.8	30	الحرشيات	2
60.4	200.0	25.0	0.0	15.3	43.4	195.0	25.0	6.6	29.0	30	عوشان	3
							ä	مكونات التربأ	العناصر الجاهزة ملغم / كجم تربة			
OM %	CaCO <sub>3</sub> %		CO <sub>3</sub> %	القوام	الطين	السلت	الرمل	Total N%	K	Pl	الرقم	
0.62	25.0		25.0	Sandy Loam	17.6	10	72.4	0.056	60	42.0	1	
1.66	20.0		20.0		Sandy Loam	15.6	26	58.4	0.084	20	50.0	2
1.72				22.5	Sandy Loam	11.6	20	68.4	0.084	150	44.0	3

#### ثالثاً: طرق ومنهجية البحث

شملت الدراسة مقارنة للصفات المظهرية والتشريحية لثمار ثلاثة أصناف من نخيل التمر في الموسم الزراعي 2020م وهي صنفي المجزاز والسقطري (وهما صنفان محليان) وصنف البرحي وهو صنف مستورد، وتم اختيار 4 نخلات من كل صنف من وادي وساحل حضرموت تتراوح اعمارها بين 10-15 سنة، علماً أن جميع المزارع تستخدم طريقة الري بالتنقيط. وتم دراسة الاتي: أولاً: دراسة الصفات المظهرية للثمار

لدراسة الصفات المظهرية تم أخذ 10 ثمار لكل مكرر بطريقة عشوائية وأخذت عليها القراءات الاتية:

#### طول الثمرة (ملم) (Fruit length (mm

تم قياس طول الثمرة باستخدام القدمة القنوية الالكترونية (Vernier) (ملم) ثم تم إيجاد متوسط الطول

بقسمة مجموع طول الثمار على العدد الكلي للثمار (الحوشان 2002).

متوسط طول الثمار = مجموع طول الثمار (ملم) /العدد الكلي للثمار وتعتبر الثمرة قصيرة إذا كان طولها أقل من 20 ملم، ومتوسطة الطول إذا كان طولها من 20 - 30 ملم، وطويلة إذا زاد طولها عن 50 ملم. (العكيدي 2010).

#### قطر (عرض) الثمرة (ملم)(Fruit width (mm

تم قياس قطر الثمرة باستخدام القدمة القنوية الالكترونية (ملم) وحسب متوسط القطر بقسمة مجموع قطر الثمار على العدد الكلي للثمار (الحوشان 2002).

متوسط قطر الثمار = مجموع قطر الثمار (ملم) / العدد الكلي الثمار وتعتبر الثمرة صغيرة القطر إذا كان قطرها أقل من 20 ملم، ومتوسطة إذا كان قطرها من 20 ملم، وكبيرة القطر إذا زاد قطرها عن 30 ملم. (العكيدي 2010)

#### حجم الثمرة (سم 3) (Fruit volume (cm<sup>3</sup>)

تم قياس حجم الثمرة باستعمال اسطوانة مدرجة واستخراج حجمها عن طريق حساب كمية الماء المزاح. ثم تم إيجاد متوسط الحجم بقسمة مجموع حجم الثمار على العدد الكلي للثمار.

متوسط حجم الثمار = مجموع حجم الثمار (سم3) / العدد الكلي للثمار

#### وزن الثمرة (جم) (Fruit weight (gm)

تم قياس وزن الثمار باستخدام الميزان الحساس، ثم حساب متوسط وزن الثمرة الواحدة بوحدة الجرام وذلك بقسمة مجموع وزن الثمار على العدد الكلي للثمار. متوسط وزن الثمرة (جم) ) العدد الكلي للثمار وتعتبر الثمرة خفيفة الوزن إذا كان

وزنها أقل من 7 جم، ومتوسطة الوزن إذا كان وزنها من7-11 جم، وثقيلة الوزن إذا زاد وزنها عن 11 جم. (إبراهيم 2008؛ المرزوقي، بن صالح، عثمان، الحارثي 1998)

#### ثانياً: الصفات التشريحية للثمار سمك طبقة الكيوتكل والغلاف الخارجي (ميكرون) (µm) Cuticle and Exocarp thickness

جلبت 4 ثمار من كل صنف في وادي وساحل حضر موت قيد الدر اسة إلى مختبرات كلية البيئة بجامعة حضرموت بعد أن أجرى عليها عملية التثبيت في محلول .F.A.A (مكون من 90 مل كحول أثيلي تركيز 70% و5 مل حمض الخليك الثلجي و5 مل فور مالين) لمدة 24 ساعة، وبعد ذلك غسلت العينات بماء مقطر ثم وضعت في محلول الحفظ (كحول إثيلي تركيز 70% لحين الاستخدام) ثم بعد ذلك مررت بسلسلة تصاعدية من الكحول الإثيلي 70% 80% 90% 95% 100% لمدة 20 دقيقة في كل تركيز ثم نقلت إلى خليط من الكحول والزايلين بنسب 1:3 و 1:1 و 3:1 لمدة نصف ساعة في كل خليط ثم نقلت إلى زايلين نقى نص ساعة بعدها نقلت إلى خليط منصهر من الزايلين والشمع بنسبة 1:3 و 1:1 و 3:1 لمدة نص ساعة لكل خليط في فرن بدرجة حرارة 60 مْ ثم تركت في شمع البرافين 100% لمدة 24 ساعة عند نفس درجة الحرارة، بعدها صب شمع البرافين في قوالب وضعت فيها العينات وقطعت بواسطة الميكروتوم بسمك 20 ميكرون. صبغت العينات بصبغة الهيماتوكسالين ثم وضعت في صبغة الإيوزين بعدها حملت بإضافة قطرات من P.D.X. ووضع عليها غطاء الشريحة. وتم قياس سمك طبقة الكيوتكل والغلاف الخارجي للثمرة عند قوة تكبير X10 باستخدام برنامج Digimizer.

#### سمك الغلاف الوسطي (ملم) (Mesocarp thickness (mm

تم قياس سمك الغلاف الوسطي للثمرة باستخدام القدمة القنوية الالكترونية بوحدة (ملم).

#### التحليل الاحصائى للنتائج

تم استخدام تصميم القطاعات كاملة العشوائية بعاملين (عامل الموقع وعامل الصنف) وحللت النتائج إحصائياً عن طريق برنامج Genstat 5، وتم اختبار المعنوية بين متوسطات المعاملات باستخدام اختبار أقل فرق معنوي عند مستوى احتمال 5%.

#### 3. النتائج والمناقشة

أولاً: الصفات المظهرية للثمار

#### طول الثمرة (ملم)(Fruit length (mm

نلاحظ من الجدول (3) أن طول الثمرة اختلف معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ طول الثمرة 35.10 ملم (متوسطة) في منطقة ساحل حضرموت بينما كانت 27.29 ملم (متوسطة) في منطقة الوادي. وكذلك اختلفت الأصناف في طول الثمرة حيث أعطى الصنف جزاز أعلى طول بلغ 34.35 ملم وبفروق معنوية عن الصنف برحي.

ويظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في طول الثمرة، حيث كان أعلى طول للثمرة عند التداخل بين صنف جزاز ومنطقة ساحل حضرموت حيث بلغ 39.03 ملم. وأقل

طول الثمرة عند التداخل بين صنف البرحي ومنطقة وادي حضرموت حيث بلغ 23.31 ملم.

وتتفق هذه النتائج مع دراسة (Abdul-sahib 2020؛ الابريسم Abdul-sahib 2020؛ الابريسم Abd-elhamed, Rasmia, Zayed 2017؛ sahib Al-2016؛ أحمد 2017؛ حومد 2017؛ جروني 2016؛ المحسنة Al-Hajji, Al-Husseini, Al-Hajji, Al-Wusaibi, Ben Abdallah, Al-Husseini, Al-Hajji, Al-Salman 2014؛ التميمي وآخرون 2014؛ عبد، المطه، العيداني 2014؛ عبد، محمد، مهودر 2012، المعالمة (2012؛ عبد، محمد، مهودر 2012؛ البوعبيدي Abdelrahim 2012؛ المعالم وآخرون 1988؛ المعالم (2018؛ المعالم (2018)؛ ال

جدول (3): تأثير المنطقة والأصناف على طول وعرض ثمرة نخيل التمر في منطقتي وادي وساحل حضرموت

	عرض الثمرة (ملم)			الصفة		
المتوسط	الساحل	الوادي	المتوسط	الساحل	الوادي	المنطقة الصنف
21.93	25.58	18.28	34.35	39.03	29.67	جزاز
19.80	22.68	16.92	32.78	36.68	28.88	سىقطري
21.03	23.99	18.06	26.45	29.59	23.31	برحي
	24.08	17.75		35.10	27.29	المتوسط
ت= 2.11	ص= 1.49	م= 1.22	ت= 3.33	ص=2.35	م= 1.92	0.05=L.S.D

L.S.D = أقل فرق معنوى. م= موقع، ص= صنف، ت= تداخل.

#### قطر (عرض) الثمرة (ملم)(Fruit width (mm

نلاحظ من الجدول (3) أن عرض الثمرة اختلف معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ عرض الثمرة 24.08 ملم (متوسط) في منطقة ساحل حضرموت بينما كانت 17.75ملم (صغير) في منطقة الوادي. بينما لم تختلف الأصناف معنوياً في عرض الثمرة، حيث أعطى الصنف جزاز أعلى عرض للثمرة بلغ 21.93 ملم وأعطى صنف السقطري أقل عرض للثمرة بلغ 19.80ملم.

وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في عرض الثمرة، حيث

كان أعلى عرض للثمرة عند التداخل بين صنف جزاز ومنطقة ساحل حضر موت حيث بلغ 25.58 ملم.

وأقل عرض للثمرة عند التداخل بين صنف سقطري ومنطقة وادي حضرموت حيث بلغ 16.92 ملم.

وتتقق هذه النتائج مع دراسة (Abdul-2020؛ حومد 2017؛ حومد 2017؛ حومد Abd-elhamed et al 2017؛ sahib Sulieman 'Al-wusaibi et al 2014؛ 2016؛ Soliman 2006؛ Soliman 2006؛ البوعبيدي 1987؛ المرزوقي وآخرون 1988؛ بن شحنة وآخرون 1987).

#### وزن الثمرة (جم)(Fruit weight (gm

نلاحظ من الجدول (4) أن وزن الثمرة أختلف معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ وزن الثمرة 11.33 جم

(ثقيل) في منطقة ساحل حضر موت بينما كان 7.83 جم (خفيف) في منطقة الوادي. وكذلك اختلفت الأصناف في وزن الثمرة، حيث أعطى الصنف جزاز أعلى وزن للثمرة بلغ 11.33 جم وبفروق معنوية عن الصنفين سقطري وبرحى. وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل

بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في وزن الثمرة، حيث كان أعلى وزن الثمرة عند التداخل بين صنف جزاز ومنطقة ساحل حضرموت حيث بلغ 14 جم. وأقل وزن للثمرة عند التداخل بين صنف برحي ومنطقة وادي حضرموت حيث بلغ 7.23 جم.

جدول (4): تأثير المنطقة والأصناف على وزن وحجم ثمرة نخيل التمر في منطقتي وادي وساحل حضرموت

	نجم الثمرة (سم <sup>3</sup> )	`		الصفة		
المتوسط	الساحل	الوادي	المتوسط	الساحل	الوادي	المنطقة الصنف
11.02	13.90	8.13	11.33	14.00	8.67	جزاز
8.89	10.47	7.30	9.23	10.87	7.60	سقطري
7.74	8.88	6.60	8.18	9.12	7.23	برحي
	11.08	7.34		11.33	7.83	المتوسط
ت= 2.78	ص= 1.97	م= 1.61	ت= 2.94	ص= 2.08	م= 1.70	0.05=L.S.D

L.S.D = أقل فرق معنوي. م= موقع، ص= صنف، ت= تداخل.

وتتفق نتائج هذه الدراسة مع دراسة (Abdul-sahib and 2020) بالمراسة مع دراسة (Abdul-sahib ؛ Abd-elhamed et al 2017 ؛ Abdul-sahib ؛ 2013 بالابريسم 2017 ؛ أحمد 2017 عبد وآخرون 2012 ؛ Sulieman et al 2012 ؛ 2012 عبد وآخرون 2012 ؛ Sakr et al 2010 ؛ 2011 الابريسم 2006 ؛ العيسي 2006 ؛ العيسي 1987 ؛ ويعزى الابريسم المناسق في وزن الثمرة إلى اختلاف خصائص النرب ومواقع الزراعة. وكما يعود الاختلاف في وزن الثمرة من صنف لأخر إلى عوامل وراثية (مطر 1991).

#### حجم الثمرة (سم<sup>3</sup>) (Fruit volume (cm<sup>3</sup>

نلاحظ من الجدول (4) أن حجم الثمرة اختلف معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ حجم الثمرة  $11.08\, \text{mm}^{5}$  في منطقة ساحل حضر موت بينما كان 7.34  $\text{mm}^{5}$  في منطقة الوادي. وكذلك أختلفت الأصناف في حجم الثمرة، حيث أعطى الصنف جزاز أعلى حجم للثمرة بلغ  $11.02\, \text{mm}^{5}$  ويفروق معنوية عن الصنفين سقطري وبرحي.

وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في حجم الثمرة، حيث كان أعلى حجم للثمرة عند التداخل بين صنف جزاز ومنطقة ساحل حضرموت حيث بلغ 13.90 سم<sup>3</sup>.

وأقل حجم للثمرة عند التداخل بين صنف برحي ومنطقة وادي حضرموت حيث بلغ 6.60 سم $^{3}$ .

وتتفق نتائج هذه الدراسة مع دراسة ( 2012؛ الابريسم 2017؛ حومد 2017؛ عبد وآخرون 2012؛ عبد وآخرون 2012؛ عبد وآخرون 2013؛ الابريسم 2011؛ العيسي 2006؛ 2016، الابريسم 2016؛ الميسي 2006؛ وقد يكون سبب انخفاض حجم الثمار في وادي حضرموت بسبب انخفاض المحتوى المائي للثمار في منطقة وادي حضرموت، نتيجة لدرجات الحرارة العالية.

#### ثانياً: الصفات التشريحية للثمار

#### سمك طبقة الكيوتكل (ميكرون) Cuticle thickness

نلاحظ من الجدول (5) أن سمك طبقة الكيوتكل اختلفت معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ سمك طبقة الكيوتكل 4.76 ميكرون في منطقة وادي حضر موت بينما كان 3.77 ميكرون في منطقة الساحل. بينما لم تختلف الأصناف معنوياً في سمك طبقة الكيوتكل حيث أعطى الصنف جزاز أعلى سمك بلغ 4.48 ميكرون وأعطى الصنف سقطري أقل سمك بلغ 3.96 ميكرون. وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف لم يكن معنوياً في سمك طبقة الكيوتكل، حيث كان أعلى سمك الطبقة الكيوتكل عند التداخل بين صنف الجزاز ومنطقة وادي حضر موت

حيث بلغ 5.06 ميكرون. وأقل سمك لطبقة الكيوتكل عند التداخل بين صنف السقطري ومنطقة ساحل حضر موت حيث بلغ 3.56 ميكرون. وتتفق نتائج هذه الدراسة مع نتائج دراسة (سويد 2012؛ Sakar (2012). (et al 2010).

#### سمك الغلاف الخارجي (µm) Exocarp thickness

#### (میکرون)

نلاحظ من الجدول (5) أن سمك الغلاف الخارجي لم يختلف معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ سمك الغلاف الخارجي 42.87 ميكرون في منطقة ساحل حضرموت بينما كان 41.03 ميكرون في منطقة الوادي. ولم تختلف الأصناف معنوياً في سمك الغلاف الخارجي حيث أعطى الصنف سقطري أعلى سمك بلغ 46.15 ميكرون وأعطى الصنف برحي أقل سمك بلغ ميكرون.

وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في سمك الغلاف الخارجي، حيث كان أعلى سمك الغلاف الخارجي عند التداخل بين صنف السقطري ومنطقة ساحل حضر موت حيث بلغ 50.20 ميكرون. وأقل سمك للغلاف الخارجي عند التداخل بين صنف البرحي ومنطقة وادي حضر موت حيث بلغ

37.60 ميكرون. وتتفق نتائج هذه الدراسة مع نتائج دراسة (سويد (Sakar et al 2010 ؛ 2012

#### سمك الغلاف الوسطى (ملم) (Mesocarp thickness (mm

نلاحظ من الجدول (5) أن سمك الغلاف الوسطي اختلفت معنويا في الأصناف المدروسة باختلاف منطقة الدراسة حيث بلغ سمك الغلاف الوسطي 5.45 ملم في منطقة ساحل حضرموت بينما كان 4.44ملم في منطقة الوادي. كما اختلفت الأصناف معنوياً في سمك الغلاف الوسطي حيث أعطى الصنف جزاز أعلى سمك بلغ 5.67 ملم وبفروق معنوية عن الصنفين جزاز وسقطري.

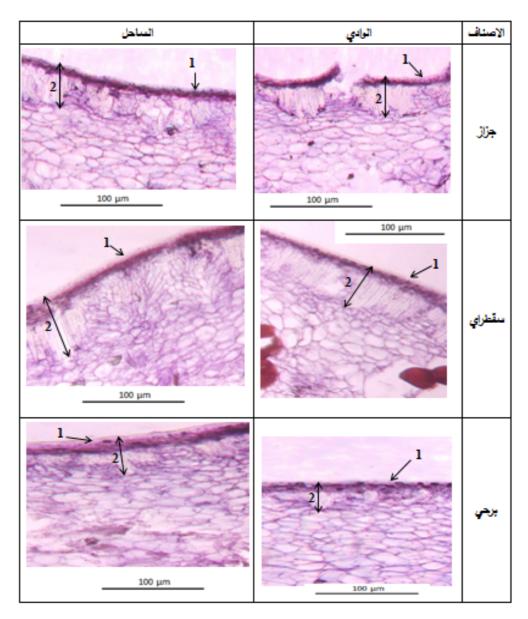
وكما يظهر الجدول نفسه أن تأثير التداخل بين المنطقة والأصناف كان معنوياً في سمك الغلاف الوسطي، حيث كان أعلى سمك الغلاف الوسطي عند التداخل بين صنف الجزاز ومنطقة ساحل حضرموت حيث بلغ 7.00ملم. وأقل سمك للغلاف الوسطي عند التداخل بين صنف الجزاز والبرحي ومنطقة وادي حضرموت حيث بلغ 4.33 ملم.

ونتفق نتائج هذه الدراسة مع نتائج دراسة (سويد 2012 ؛ Sakar et al 2010).

جدول (5): قياس سمك الغلاف الخارجي والوسطى وطبقة الكيوتكل لثمار نخيل التمر في منطقتي وادى وساحل حضرموت

سمك طبقة الكيوتكل (ميكرون)			سمك الغلاف الوسطي (ملم)			(میکرون)	الصفة		
المتوسط	الساحل	الوادي	المتوسط	الساحل	الوادي	المتوسط	الساحل	الوادي	المنطقة الصنف
4.48	3.90	5.06	5.67	7.00	4.33	40.80	40.80	40.80	جزاز
3.96	3.56	4.35	4.67	4.67	4.67	46.15	50.20	42.10	سقطري
4.36	3.86	4.86	4.50	4.67	4.33	38.90	37.60	40.20	برحي
	3.77	4.76		5.45	4.44		42.87	41.03	المتوسط
ت =	ص=غ.م	م= 0.60	ت= 1.40	ص=	م= 0.81	ت=	ص= غ.م	م= غ.م	L.S.D=
1.04	, i.c. 0	3.30 (	10	0.99	**	11.83	,,,,,	1.0 1	0.05

الله فرق معنوي. غ.م= غير معنوي م= موقع، ص= صنف، ت= تداخل L.S.D



1= الكيوتكل 2= الغلاف الخارجي شكل1: سمك طبقة الكيوتكل والغلاف الخارجي لثمار نخيل التمر في منطقتي وادي وساحل حضرموت

# الكيوتكل وسمك الغلاف الوسطي حيث تفوقت منطقة وادي حضرموت معنوياً في سمك طبقة الكيوتكل, بينما تفوقت منطقة ساحل حضرموت معنويا في طول الثمرة وعرضها ووزنها وحجمها وسمك الغلاف الوسطي، كما كان لعامل الصنف تأثيراً واضحاً حيث

أظهرت النتائج المتحصل عليها في هذه الدراسة أن لعامل البيئة تأثيراً في طول الثمرة وعرضها ووزنها وحجمها، وسمك طبقة

4. الخاتمة

تفوق صنف الجزاز معنوياً في طول الثمرة ووزنها وحجمها وسمك الغلاف الوسطى.

#### التوصيات والمقترحات

- إجراء المزيد من الدراسات للمقارنة بين أصناف مختلفة من ثمار نخيل التمر المحلية والمستوردة. نامية في بيئات مختلفة من محافظة حضرموت.
- التوسع في زراعة نخيل التمر المحلي صنف جزاز وخاصة في منطقة ساحل حضر موت نتيجة لما أعطاه هذا الصنف من ثمار ذات مواصفات ممتازة.

#### المراجع

#### :References

إبراهيم، عبدالباسط عودة (2008). *نخلة التمر شجرة الحياة*، جامعة الدول العربية، المركز العربي لدراسات المناطق الجافة واراضي القاحلة – (اكساد). 390 صفحة.

الإبريسم، وسن فوزي فاضل (2017). استجابة يعض الصفات الكيميائية والفيزيائية والانتاجية لمواقع زراعة نخيل التمر صنف البرحي، مجلة جامعة دي قار للبحوث الزراعية، 106، 185-196. الابريسم، وسن فوزي فاضل (2011) دراسة بعض الصفات في نخيل التمر. Phoenix dactylifera Lصفات في منطقتي البصرة وبغداد، مجلة الكوفة للعلوم الزراعية، 130، 20-12.

أحمد، سي مرزاق (2017). التنوع الصنفي لنخيل التمر Phoenix dactylifera L التوصيف، التوزيع وتأقلم مختلف الأصناف في منطقة الزيبان سكرة، رسالة دكتوراه، قسم البيولوجيا والايكولوجيا النباتية، كلية علوم الطبيعة والحياة، جامعة الاخوة منتوري، قسطنطينية، الجزائر. 150 صفحة.

بن شحنة، سعيد؛ قاسم، يعقوب عبدالله؛ الجهري، محسن (1987). التركيب الكيميائي لبعض أصناف التمور في اليمن الديمقراطية، مجلة نخلة التمر، 2(2)،143-154.

بن شملان، باسل عبدالله (2020). تقيم واقع التوزيع المكاتي لمواقع المدارس الحكومية في مدينة المكلا باستخدام نظم المعلومات المجغرافية. رسالة ماجستير غير منشورة، جامعة حضرموت، المكلا، اليمن 280 صفحة.

البو عبيدي، حبيب (1998). دراسة توصيفيه لاهم أصناف التمور التونسية. إصدارات الندوة العلمية لبحوث النخيل، المملكة المغربية – مراكش. ص: 169-163.

التميمي، ابتهال حنظل؛ محمد، خولة حمزة؛ القطراني، ندى عبد الامير (2014). تأثير المواقع الزراعية ومراحل نمو الثمرة في بعض الصفات الفيزيائية والفسيولوجية والتشريحية لثمار نخيل

النمر. Phoenix dactylifera L صنف البرحي. مجلة الفرات للعلوم الزراعية، 81-68،(2)

جروني، عيسى (6201). دراسة مقارنة لتأثير حبوب لقاح نخيل التمريخ على صفات ثمار بعض التمرية على صفات ثمار بعض المرابق الأصناف الانتوية، رسالة دكتوراه، قسم البيولوجيا والايكولوجيا النباتية، كلية علوم الطبيعة والحياة، جامعة الاخوة منتوري، قسطنطينية، الجزائر. 174 صفحة.

حبيشان، محمد علي؛ باحميش، حاج سالم؛ بن سلمان، سعيد محمد؛ بن يحيى، حسن علي (2000). النتائج النهائية للتقييم الريفي السريع بالمشاركة، في ساحل حضرموت والمهرة، هيئة البحوث الزراعية والإرشاد الزراعي، ساحل حضرموت ، اليمن .200 صفحة

الحوشان، فهد صقر (2002). النخلة: زراعتها،أماكن تواجدها، تكاثرها،أمراضها. (ط1)، مكتبة الملك فهد الوطنية، السعودية. 198 صفحة

حومد، أحمد ثامر (2017). تأثير الموقع وموعد التاقيح ومصدر اللقاح في بعض الصفات الطبيعية والكيميائية لخلال

نخلة التمر . Phoenix dactylifera L صنف اشرسي في منطقتي منطقتي منطقتي منطور . 10، 27-88.

سويد، ساجدة ياسين (2012) در اسة تشريحية مقارنة لثمار بعض أصناف نخيل التمر .Phoenix dactylifera L في مرحلة النضج الفسيولوجي. مجلة البصرة لأبحاث نخلة التمر. 2)1(2)، 58-74.

العسيولوجي. مجله البصره لابحات تحله النمر. 11(2)، 84-4/. عبد، عبدالكريم محمد؛ الطه، علي حسين محمد؛ العيداني، طه ياسين مهودر (2013). دراسة مظهرية لسلالات بذرية من نخيل التمر (Phoenix dactylifera L.) النامية في منطقة البصرة باستخدام تحليل المكونات الرئيسية (Analysis في العلوم الزراعية، (29)، 259-

عيد، عبدالكريم محمد؛ محمد، علي حسين؛ مهودر، طه ياسين (2012). دراسة الصفات الفيزيانية والكيميانية لثمار سلالات من نخيل التمر البذرية المزروعة في منطقة البصرة. مجلة ميسان للدراسات الاكاديمية، 11(20)، 76-86.

عبدالواحد، محمود شاكر (2012). تأثير مواقع الزراعة ومراحل النمو في الصفات الفيزيائية والكيميائية لثمار نخيل التمر صنف الكنطار، مجلة جامعة ذي قار، 7(3)،1-11.

العكيدي، حسن خالد (2010). نخلة التمر سيدة الشجر ودرة الثمر... عمان، المملكة الاردنية الهاشمية: أمنه للنشر والتوزيع، الطبعة الثانية. 396 صفحة.

العيسى، عادل محمد (2006). مقارنة فسيولوجية- بينية بين ثلاث أصناف من نخيل التمر في الأحساء والقطيف بالمملكة العربية السعودية، رسالة دكتوراه غير منشورة، كلية العلوم، جامعة الملك سعود، المملكة العربية السعودية، 265 صفحة.

الكثيري، محمد عاشور (2000). واقع انتاج النخيل في اليمن ودور جامعة حضر موت الحالي والمستقبلي في تطوير زراعته. ندوة استخدام التقنيات الحديثة في تطوير انتاجية النخيل في الوطن العربي. الامارات العربية المتحدة، العين. ص: 9-27.

المرزوقي، محمد؛ بن صالح، محمد؛ عثمان، عوض محمد؛ الحارثي، عبدالعزيز (1998). التوصيف الخضري لبعض أصناف

& El-Bellaj, M. (2014). Morphological characterization of Saudi Arabian date palm cultivars based on vegetative and reproductive traits, *Proceedings of the Fifth International Date Palm Conference Abu Dhabi, UAE.* March 16 – 18, PP 57- 64.

Henderson, A. (1999). *Species concept and palm taxonomy in the new world*. Memoires of the New York Botanical Garden, 83, pp 21

Kavand, A., Ebadi, A., Shuraki, Y., Abdossi, V. & mostafevy, M. (2015). Evaluation of stability and uniformity in tissue culture – date palm *(phoenix dactylifera L.)* plants of cv berhee using morphological characteristics. *international journal of biosciences*, 6 (1), 117 – 122.

Sakr, M. M., I. M. Abu Zeid., A. E. Hassan., A-G.I. O. Baz. & W. M. Hassan. (2010). Identification of some date palm (*Phoenix dactylifera L.*) cultivars by fruit characters. *Indian J. Sci. and Techno.* 3(3), 338-343.

Soliman. S.S. (2006). Behaviour Studies of Zaghloul Date Palm Cultivar under Aswan environment. *Journal of Applied Sciences* Research 2 (3), 184-191.

Sulieman, A., Abdelhafis, I. & Abdelrahim, A.(2012). Comparative Study on Five Sudanese Date (Phoenix dactylifera L.) Fruit Cultivars, *Food and Nutrition Sciences*, 3 (9),1245-1251.

نخيل التمر العمانية. *إصدارات الندوة العلمية لبحوث النخيل*. المملكة المغربية ، مراكش. ص: 170-180.

مطر، عبدالامير مهدي (1991). *زراعة النخيل وانتاجه*، جامعة اللهصرة، العراق: مطبعة دار الحكمة . 420 صفحة.

المنظمة العربية للتنمية الزراعية (2003). *دراسة تطوير انتاج وتصنيع وتسويق التمور والاستفادة من مخلفات النخيل في الوطن العربي.* الخرطوم، السودان. ص: 27- 185.

المنظمة العربية للتنمية الزراعية (2018). الكتاب السنوي للإحصاءات الزراعية العربية، الخرطوم، السودان، المجلد 38 ص:

وزارة التخطيط والتعاون الدولي (2015) النشرة الإحصائية لعام 2015 الجمهورية اليمنية: الجهاز المركزي للإحصاء، مكتب سيئون، م/ حضرموت وكالة تاسا عبر الرابط: https://power.larc.nasa.gov تاريخ الدخول 4 / 3 / 2021م.

Abd-El Hamed, K. Rasmia, D & Zayed. E. (2017). Evaluation Physical and Chemical Characteristics of Some Seedlings Date Palm Fruits (Maghal) in the North Delta Egypt. *International Journal of Advances in Agricultural Science and Technology.* 4 (7), 13-32.

Abdul-Sahib, A. M & Abdul-Sahib, I. M. (2020). A comparative study for some physical fruit characteristics, seed chemical composition of two date palm (*Phoenix dactylifera* L.) cultivars, *Basrah Journal of Date Palm Research*, 19 (2), 59-70.

Al-Wusaibai, N. Ben Abdallah, A. Al-Husseini, M. Al-Hajji, H. Al-Salman, H. Kurshed, K. Oihabi, A.

- Wells, H. and King, J. L. (1980). A general "exact test" for N x M contingency tables. *Bulletin of the Southern California Academy of Sciences*, 79(2):65-77.
- Wilcox, R. R. (1996). Statistics for the social sciences. *Academic Press*.
- Williams, D. (1976). Improved likelihood ratio tests for complete contingency tables. *Biometrika*, 63(1):33-37.
  Zeileis, A., Wiel, M. A., Hornik, K. and Hothorn, T. (2008). Implementing a class of permutation tests: the coin package. *Journal of Statistical Software*, 28(8):1-23.

#### References

- Agresti, A. (2002). *Categorical Data Analysis*. Wiley Series in Probability and Statistics.
  - Wiley-Interscience, 2nd edition.
- Amiri, S. and Modarres, R. (2017). Comparison of tests of contingency tables. *Journal of Biopharmaceutical Statistics*, 27(5):784-796.
- Amiri, S. and von Rosen, D. (2011). On the efficiency of bootstrap method into the analysis contingency table. *Computer methods and programs in biomedicine*, 104(2):182-187.
- Berkson, J. (1978). In dispraise of the exact test: Do the marginal totals of the  $2 \times 2$  table contain relevant information respecting the table proportions? *Journal of Statistical Planning and Inference*, 2(1):27-42.
- Davis, C. S. (1993). A new approximation to the distribution of Pearson's chi-square. *Statistica Sinica*, 3(1):189-196.
- Fisher, R. A. (1922). On the interpretation of X<sup>2</sup> from contingency tables, and the calculation of P. *Journal of the Royal Statistical Society*, 85(1):87-94.
- Garside, G. R. and Mack, C. (1976). Actual type 1 error probabilities for various tests in the homogeneity case of the 2 × 2 contingency table. *The American Statistician*, 30(1):18-21.
- Hoey, J. (2012). The two-way likelihood ratio (G) test and comparison to two-way Chi squared test. *arXiv* preprint *arXiv*:1206.4881.
- Lawal, H. B. and Upton, G. J. (1984). On the use of X<sup>2</sup> as a test of independence in contingency tables with small cell expectations. *Australian Journal of Statistics*, 26(1):75-85.
- Liddell, D. (1976). Practical Tests of 2 × 2 Contingency Tables. *Journal of the Royal Statistical Society*: Series D (The Statistician), 25(4):295-304.
- Lin, J.-J., Chang, C.-H., and Pal, N. (2015). A revisit to contingency table and tests of independence: bootstrap is preferred to chi-square approximations as well as Fisher's exact test. *Journal of Biopharmaceutical Statistics*, 25(3):438-458.
- Lipsitz, S. R., Fitzmaurice, G. M., Sinha, D., Hevelone, N., Giovannucci, E. and Hu, J. C.
  - (2015). Testing for independence in contingency tables with complex sample survey data. *Biometrics*, 71(3):832-840.
- McHugh, M. L. (2013). The chi-square test of independence. *Biochemia Medica*, 23(2):143-149.

- Mehta, C. R. and Patel, N. R. (1983). A network algorithm for performing Fisher's exact test in  $r \times c$  contingency tables. *Journal of the American Statistical Association*, 78(382):427-434.
- Papadakis, M., Tsagris, M., Dimitriadis, M., Fafalios, S., Tsamardinos, I., Fasiolo, M., Borboudakis, G., Burkardt, J., Zou, C., Lakiotaki, K., and Chatzipantsiou, C. (2021). Rfast: A Collection of Efficient and Extremely Fast R Functions. *R package version 2.0.3*.
- Pearson, K. (1900). On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 50(302):157-175.
- R Core Team (2020) R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. https://www.r-project.org/
- Rao, J. N. and Scott, A. J. (1981). The analysis of categorical data from complex sample
- surveys: chi-squared tests for goodness of fit and independence in two-way tables. *Journal of the American Statistical Association*, 76(374):221-230.
- Rao, J. N. and Scott, A. J. (1984). On chi-squared tests for multiway contingency tables with cell proportions estimated from survey data. *The Annals of Statistics*, 12(1):46-60.
- Scutari, M. (2010). Learning Bayesian Networks with the bnlearn R Package. *Journal of Statistical Software* 35 (3), 1-22.
- Sulewski, P. (2013). Modykacja testu niezaleznosci. Wiadomosci Statystyczne. *The Polish Statistician*, 10:1-19.
- Tsagris, M. (2017). Conditional Independence test for categorical data using Poisson log-linear model. *Journal of Data Science*, 15(2):347-356.
- Tsamardinos, I. and Borboudakis, G. (2010). Permutation testing improves Bayesian network learning. *In Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*, pages 322-337. Springer.
- Tsamardinos, I., Brown, L. E. and Aliferis, C. F. (2006). The max-min hill-climbing Bayesian network structure learning algorithm. *Machine Learning*, 65(1):31-78.
- Velez, J. I., Marmolejo-Ramos, F. and Correa, J. C. (2016).
  A graphical diagnostic test for two-way contingency tables. *Revista Colombiana de Estadistica*, 39(1):97-108.

	G <sup>2</sup> test	94.85	95.59	96.37	97.06	0.06	0.06	0.07	0.10
	<b>Permutation</b> G <sup>2</sup> test	95.42	96.25	97.01	97.89	3.67	8.36	26.10	68.32
INSURANCE	$X^2$ test	88.60	89.51	90.73	91.35	0.04	0.04	0.05	0.06
	G <sup>2</sup> test	88.52	89.35	90.37	91.14	0.04	0.04	0.05	0.07
	Permutation G <sup>2</sup> test	89.37	90.64	92.02	92.74	3.32	8.09	45.31	282.38

#### 4. Conclusions

We performed Monte Carlo simulation studies aiming to provide evidence as to the suitability of two popular tests for independence of categorical variables. The simulations proved highly useful and facilitated the extraction of very interesting conclusions. We highlight that the following conclusions apply to sample sizes of at most equal to 1,000.

When testing the (unconditional) independence of two variables, the  $G^2$  test never attained the type I error when the variables contain 3 or more values (or levels). When the variables take 3 values, the  $G^2$ test was size correct only for large sample sizes. On the contrary, the  $X^2$  and the permutation  $G^2$  test were size correct in almost all examined cases, regardless of the sample size and of the number of values the categorical variables could take. This is a strong evidence that the rule of thumb regarding the unsuitability of the  $X^2$  test with zero value frequencies and/or expected values being less than 5 does not hold true and should be carefully reexamined. Based on our simulations, we have some ground to say that the rule's validity seems to be rather small or negligible.

When testing conditional independence of two variables, with 1 or 2 conditioning variables, the permutation  $G^2$  test was the only one among the three competitors that performed satisfactorily. It

was the most accurate, in terms of attaining the type I error, in more than 90% of the examined cases, followed by the  $X^2$  which was size correct in only 58% of the cases. The  $G^2$  test was size correct in less than 10% of the examined cases. The value of the  $G^2$  test statistic was always greater than that of the  $X^2$  test, but this difference was diminishing with increasing sample sizes. On the other hand, the  $X^2$  test could not always be computed due to infinite divisions.

On the other hand, when the sample sizes are at the orders of thousands and higher, use of the  $X^2$  and of the  $G^2$  test is strongly suggested as they both perform equally well. They are always size correct and poses similar levels of power. Both of them are also computationally extremely efficient, hence we suggest application of either of them with large sample sizes. Computational efficiency and statistical accuracy are two essential components of a test in the current era of massive and big data.

With regards to network inference the  $X^2$  and of the  $G^2$  test exhibited similar performance in terms of accuracy (correct identification of present/absent edges) and low computational cost. The permutation  $G^2$  test has an increased accuracy, but a considerably higher computational cost. In light of these findings, the conclusion is that the latter it perhaps should be avoided as it requires a significant amount of time, unless the sample size is small (less than 1,000).

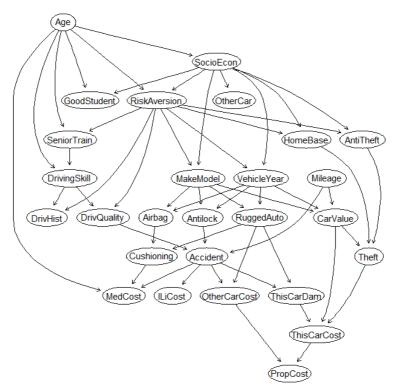


Figure 9: The true Bayesian network of the INSURANCE BN.

The metrices of performance are the accuracy, percentage of correct identification of edges or absence, and the computational cost, in seconds. The metrics were evaluated based upon 100 repetitions. Evidently, the test with the optimal behavior should assist the MMPC algorithm estimate the network with high accuracy at a low

computational cost. Table 4 summarizes the results, where we can see that the  $X^2$  test and the

 $G^2$  test exhibit a similar performance in both axes of comparison. The permutation  $G^2$  test achieves higher accuracy at the cost of a significantly higher computational cost.

Table 4: Proportion of times a testing procedure attained the type I error in the unconditional independence when the data were generated from a discrete uniform distribution and the sample sizes were at most 1,000.

	Sample	size							
		100	200	500	1,000	100	200	500	1,000
BN	Test	Accuracy (%)			Computational cost (seconds)				
ALARM	$X^2$ test	94.99	95.85	96.61	97.28	0.06	0.07	0.07	0.09

Let us now see the performance of the tests in the context of network reconstruction as another axis of comparison among the tests. We will use two famous networks in the Bayesian network (BN) literature, the ALARM and the INSURANCE BNs. The true BNs of the two datasets consist of 37 variables, of which 46 are connected, and of 27 variables of which 52 are connected, respectively. These BNs are available in the R package *bnlearn* (Scutari, 2010). Figures 8 and 9 present these true Bayesian networks.

We simulated data of various sample sizes (n=100, 200, 500, 1,000) from the two given BNs and try to

estimate the skeleton (edges only, not arcs, i.e. directed arrows) of the BNs using the MMPC algorithm proposed by Tsamardinos et al. (2006). The reason for this is that MMPC uses conditional independence tests to estimate the connected variables, whereas MMHC assigns directions to the edges using a greedy search that maximizes some score, without using independence tests. To be consistent with the simulation studies, we made use of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence during the MMPC algorithm.

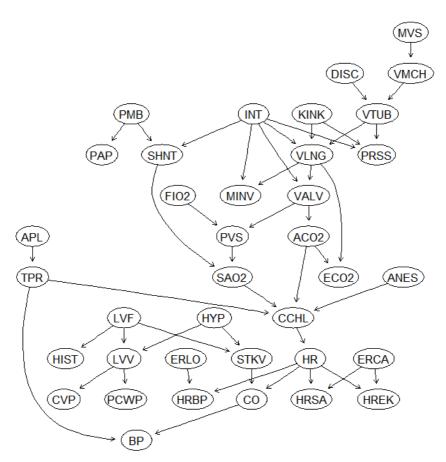


Figure 8: The true Bayesian network of the ALARM BN.

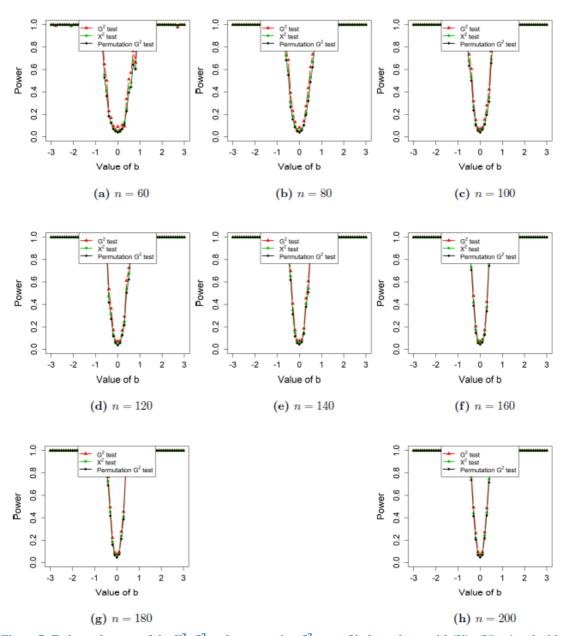


Figure 7: Estimated power of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence with |X| = |Y| = 4 and with no conditioning variable. The data were generated from a binomial distribution.

Figures 6 and 7 visualize the estimated powers for a range of different alternatives when the cardinalities of the variables are equal to 2 and 4. The powers are similar for the other cases and hence omitted for brevity. We observe that the estimated power levels are similar for all three tests. We emphasize that the

power of the  $G^2$  presented in Figure 7 is not comparable to the powers of the  $X^2$  test and the parametric  $G^2$  test because it was not size correct (see Figures 3 - 5 and Table 1).

#### 3.5 Inference in networks

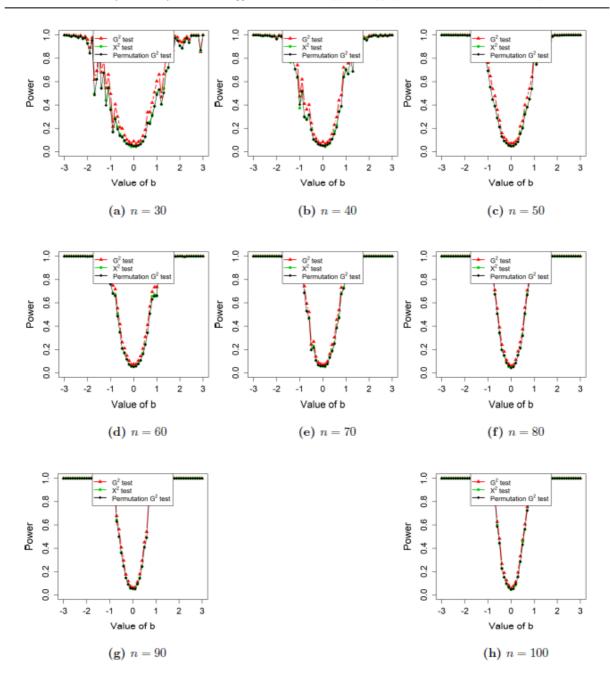


Figure 6: Estimated power of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence with |X| = |Y| = 2 and with no conditioning variable. The data were generated from a binomial distribution.

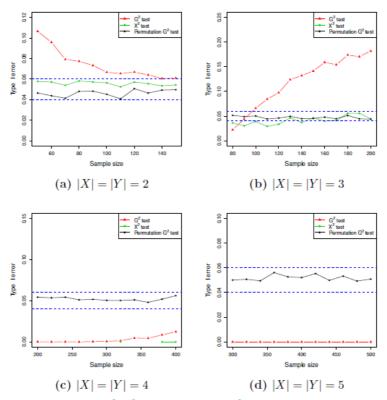


Figure 5: Estimated type I error of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence for different cardinalities with 2 conditioning variables. The data were generated from a binomial distribution.

#### 3.4 Power

Power comparisons of testing procedures are meaningful only for tests that are size correct. For this reason, we should compare only the  $X^2$  test with the permutation  $G^2$  test in the case of unconditional independence. We have compared all three tests though in the unconditional independence case scenario. The specific alternatives we used are described as follows.

1. For a range of values of b, from -3 up to 3, increasing with a step-size equal to 1 do the following steps.

- 2. Generate values  $|X_i|$  from a  $Bin(|X_i|, 0.5)$ , where i = 1, ..., n.
- 3. Compute  $p_i = \frac{e^{-(b)+X_i}}{1+e^{-(b)+X_i}}$ , where -(.) is the sign function that returns the sign of a number.
- 4. Generate values  $|Y_i|$  from  $Bin(|Y_i|, p_i)$  with |Y| = |X|.
- 5. Repeat steps 2-4 1,000 times.
- 6. Compute the power as the proportion of times the  $H_0$  (independence) is rejected.

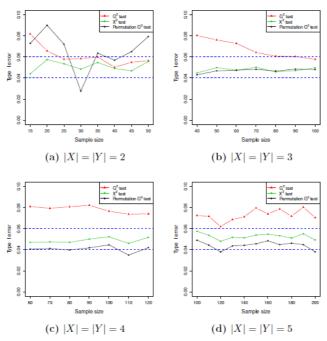


Figure 3: Estimated type I error of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence with no conditioning variable. The data were generated from a binomial distribution.

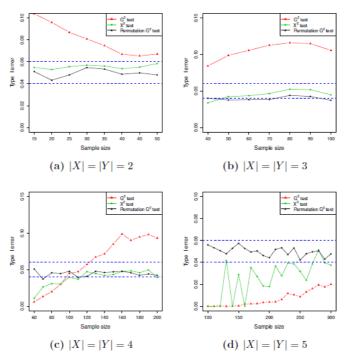


Figure 4: Estimated type I error of the  $X^2$ ,  $G^2$  and permutation  $G^2$  tests of independence for different cardinalities with 1 conditioning variable. The data were generated from a binomial distribution.

Table 3: Proportion of times a testing procedure attained the type I error in the conditional independence when the data were generated from a discrete uniform distribution and the sample sizes were at most 1,000.

Number of conditional variables	Cardinalities	X <sup>2</sup> test	G <sup>2</sup> test	Permutation G <sup>2</sup> test
Z = 0	X  =  Y  = 2	8/8	6/8	6/8
	X  =  Y  = 3	7/7	1/7	7/7
	X  =  Y  = 4	7/7	0/7	6/7
	X  =  Y  = 5	11/11	0/11	9/11
Totals		33/33	7/33	28/33
Z = 1	X  =  Y  = 2	8/8	0/8	8/8
	X  =  Y  = 3	6/7	0/7	3/7
	X  =  Y  = 4	9/15	3/15	14/15
	X  =  Y  = 5	2/21	0/21	21/21
Totals		25/51	3/51	46/51
Z = 2	X  =  Y  = 2	11/11	0/11	11/11
	X  =  Y  = 3	7/13	1/13	13/13
	X  =  Y  = 4	0/3	0/11	11/11
	X  =  Y  = 5	0/11	0/11	11/11
Totals		18/46	1/46	46/46

Table 2: Proportion of times a testing procedure attained the type I error in the unconditional independence when the data were generated from a discrete uniform distribution and the sample sizes were at most 1,000.

Cardinalities	$X^2$ test	G <sup>2</sup> test	<b>Permutation</b> G <sup>2</sup> test
X  =  Y  = 2	7/8	7/8	2/8
X  =  Y  = 3	6/7	5/7	7/7
X  =  Y  = 4	3/7	0/7	5/7
X  =  Y  = 5	4/11	0/11	9/11
Totals	20/33	12/33	23/33

Figure 3 illustrates the estimated type I error of all testing procedures when testing the unconditional independence of two variables, for various sample sizes and cardinalities of the variables. The most accurate is the  $X^2$ , followed by the permutation  $G^2$ , whereas in all cases, except for Figure 3(a), the  $G^2$  test shows an inflated type I error.

By examining Figure 4 we can see that the conclusions change. The  $G^2$  test exhibits the poorest performance in terms of type I error, as it is either too conservative, i.e. it rejects less frequently than it should, or it is very risky as it tends to reject more frequently. The  $X^2$  test seems to perform adequately, but when the cardinalities of the variables are equal to 5, it becomes too conservative. The permutation  $G^2$  test on the other hand is the only that holds the type I error within the acceptable limits. Finally, Figure 5 yields different conclusions again. The permutation  $G^2$  test still remains size correct, but the  $X^2$  test performs adequately only in two cases, when |X| = |Y| = 2 and when |X| = |Y| = 3. In the other two cases, it could not be computed, due to the conditional contingency tables formed, that contain rows and or columns with zero frequencies, and hence the  $X^2$  test statistic could not be computed. the  $G^2$  test on the other hand almost never rejects the conditional independence.

Among the three testing procedures, the  $G^2$ manifests the worst performance in terms of attaining the type I error as it was size correct in only 11 out 130 times (8.46%), as depicted in Table 3. The  $X^2$  test performed better as it was size correct in 76 out 130 times (58.46%), whereas the permutation  $G^2$  test was size correct in 120 out of 130 times (92.31%). If we examine Table 3 more closely, we can draw more specific and more targeted conclusions. Specifically, when testing the (unconditional) independence between two variables, the following can be said. The  $X^2$  test exhibited the best performance, followed by the permutation  $G^2$  test. The  $G^2$  test had the worst performance, as it was size correct in almost 1 out of 4 times.

At this point let us remind the reader about the necessary condition the expected values should satisfy. The number of cells whose expected values is less than 5 should be no more than 20%-25% and no cell must contain 0 frequencies. According to McHugh (2013) McHugh (2013), no cell should contain expected values that are less than 3. This does not hold true for the  $X^2$  test and this is clearly observed in Figure 3, where we can see that even or small sample sizes, the  $X^2$  retains the nominal significance level (5%). When we move downwards Table 3 we draw another interesting conclusion. The permutation  $G^2$  test, unlike the  $X^2$  test is size correct in the majority of the cases.

where i = 1, 2, 3, 4 and most of the times yielded contingency tables with zero frequencies. The binomial distribution was the main distribution used thought the simulation studies. In all cases, we generated an n × 100 matrix, where n denotes the sample size and performed all  $100 * \frac{100-1}{2} = 4950$  tests with either testing procedure.

All results presented in Figures and Tables refer to the cases of the sample sizes being at most 1,000. For larger sample sizes we only tested the X2 and the G2 tests and they exhibited nearly the same performance and were always size correct and hence not visualized.

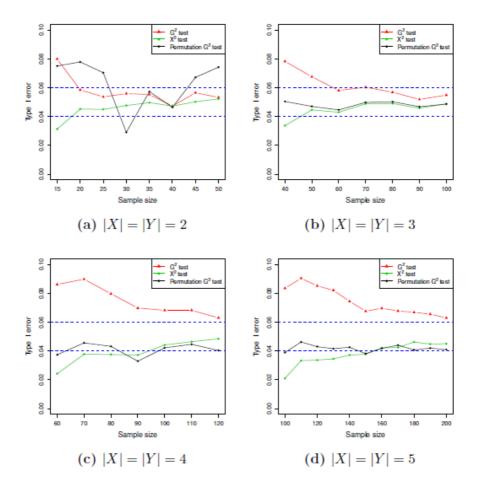
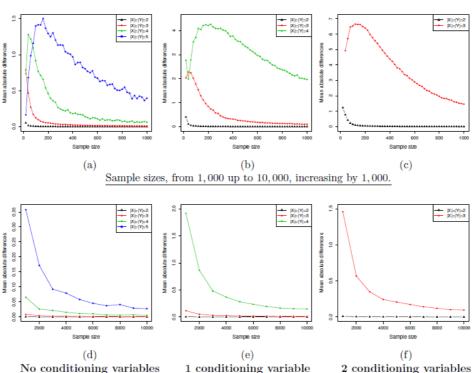


Figure 2: Estimated type I error of the  $G^2$ , permutation  $G^2$  and  $X^2$  tests of independence as a function of the sample size with no conditioning variable. The data were generated from a discrete uniform distribution and the sample sizes were at most 1,000.



Sample sizes up to 1,000, increasing by a step equal to 20.

Figure 1: Average difference between the  $G^2$  and the  $X^2$  test statistics ( $G^2 - X^2$ ). The range of sample sizes (in the first row goes up to 1,000, each time increasing by a step equal to 20. The range of sample sizes in the second row varies from 1,000 up to 10,000 increasing by a step equal to 1,000. The first column refers to unconditional independence, while the second and third columns refer to conditional independence with 1 and 2 conditioning variables respectively. The cardinalities of the variables are showed with different colors. In the first row, the  $X^2$  could not be computed for all cases with 1 and 2 conditioning variables. In order to be consistent, in the second row, the  $X^2$  was not be computed for all cases either.

# A very interesting finding is that as the number of conditioning variables increases, the $X^2$ could not be computed because of zero expected values. Our data generation mechanism is based on the binomial distribution and hence the produced tables will contain zero rows and or zero columns. Applying the $X^2$ test on such tables results in division of a finite number with 0 yielding infinite numbers and hence the $X^2$ is not applicable. In contrast, the $G^2$ test is applicable since $0\log 0 = 0$ .

#### 3.3 Type I error

At first we will consider the type I error of the three hypothesis testing procedures in four case scenarios. When both X and Y take 2 values, 3 values, 4 values and 5 values. These correspond to  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ ,  $4 \times 4$  and  $5 \times 5$  contingency tables respectively. We first considered the type I error for the unconditional independence case scenario when the data were generated from a discrete uniform distribution U(0,i), where i=1,2,3,4. This is a small case scenario and we did not examine it in more detail. We then generated random values from Bin(i,0.5),

Table 1: Time (in seconds) required by the testing procedures to perform 4,950 tests for different sample sizes and cardinalities. The relative computational cost, normalized with response to the  $X^2$  test, appears inside the parentheses.

Sample size	Cardinalities	X <sup>2</sup> test	G <sup>2</sup> test	Permutation  X <sup>2</sup> test	Permuta tion  G <sup>2</sup> test
n=100	X  =  Y  = 2	0.003(1.00)	0.004(1.12)	0.867(256.96)	2.521(74 6.95)
n=200	X  =  Y  = 3	0.005(1.00)	0.006(1.23)	2.655(549.11)	2.437(50 4.02)
n=400	X  =  Y  = 4	0.007(1.00)	0.010(1.48)	5.962(860.82)	3.031(43 7.59)
n=800	X  =  Y  = 5	0.012(1.00)	0.019(1.50)	6.645(536.00)	3.426(27 6.37)
n=10,000	X  =  Y  = 2	0.141(1.00)	0.136(0.96)	3.369(23.87)	9.558(67. 71)
n=10,000	X  =  Y  = 3	0.149(1.00)	0.135(0.91)	6.576(44.24)	10.015(6 7.38)
n=10,000	X  =  Y  = 4	0.146(1.00)	0.144(0.99)	10.763(73.93)	10.355(7 1.12)
n=10,000	X  =  Y  = 5	0.14(1.00)	0.138(0.99)	10.7(76.51)	10.165(7 2.68)

## 3.2 Difference between the $X^2$ and the $G^2$ test statistics

Figure 1 illustrates the average difference between the two test statistics  $G^2 - X^2$  for a range of sample sizes, in the case of unconditional independence. Figure 1 contains the differences for small sample sizes, up to 1; 000, and for larger sample sizes, from 1,000 up to 10,000. The G2 test statistic is on average greater than the X2 test statistic and the

differences are more pronounced as the cardinalities of the variables increase. This figure clearly shows that the X2 approximation to the  $G^2$  test statistic requires larger sample sizes with increasing cardinalities.

In all cases though, the differences decay towards zero as the sample size is at the order of hundreds. Yet, the differences between the two test statistics are large and this explains the inflated type I error of the G2 test, observed later.

$$\begin{split} G^2 &= 2 \sum_{i,j} O_{ij} \log \frac{O_{ij}}{E_{ij}} = 2 \sum_{i,j} \left( E_{ij} + \tau_{ij} \right) \log \frac{E_{ij} + \tau_{ij}}{E_{ij}} = 2 \sum_{i,j} \left( E_{ij} + \tau_{ij} \right) \log \left( 1 + \frac{\tau_{ij}}{E_{ij}} \right) \\ & \text{By expanding } \frac{\tau_{ij}}{E_{ij}} \text{ around 0 we obtain} \\ G^2 &\approx 2 \sum_{i,j} \left( E_{ij} + \tau_{ij} \right) \left[ \frac{\tau_{ij}}{E_{ij}} - \frac{1}{2} \left( \frac{\tau_{ij}}{E_{ij}} \right)^2 + O\left(\tau_{ij}^3\right) \right] \\ G^2 &= 2 \sum_{ij} \tau_{ij} - \sum_{ij} \frac{\tau_{ij}^2}{E_{ij}} + O\left(\tau_{ij}^3\right) + 2 \sum_{ij} \frac{\tau_{ij}^2}{E_{ij}} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\tau_{ij}^3}{E_{ij}} + O\left(\tau_{ij}^4\right) \\ G^2 &= \sum_{ij} \frac{\tau_{ij}^2}{E_{ij}} + O\left(\tau_{ij}^3\right) \approx \sum_{ij} \frac{\left(O_{ij} - E_{ij}\right)^2}{E_{ij}} \end{split}$$

Hoey (2012) mentioned that as the difference between  $O_{ij}$  and  $E_{ij}$  increases, the less accurate the above approximation becomes, and  $X^2$  will tend to compute erroneous answers, especially in the small sample sized data. Further, since  $X^2$  is an approximation to the  $G^2$ , the former is expected to be less accurate the latter.

#### 3 Simulation studies

We used the statistical software R 4.0.3 (R Core Team, 2020) and the library Rfast (Papadakis, Tsagris, Dimitriadis, Fafalios, Tsamardinos, Fasiolo, Borboudakis, Burkardt, Zou, Lakiotaki and Chatzipantsiou 2021) that contains implementations of the aforementioned testing procedures. R's built in function chisq.test() can return a Monte Carlo p-value, but not a permutation p-value, and it is very slow when thousands of tests must be conducted. Tsagris (2017) compared some implementations in R, showing that conditional independence testing is faster via Poisson log-linear models. Tests of independence also exist in the R package coin (Zeileis, Wiel, Hornik, and Hothorn 2008) but are not as computationally efficient as the ones in the R package Rfast. Computational efficiency was the reason why we did not consider a computer intensive version of the  $X^2$  test and we only used the tests that are available in Rfast.

#### 3.1 Computational cost of $X^2$ and $G^2$ test

Table 1 presents an example of the computational cost of each testing procedure. The G2 test is slightly slower than the  $X^2$  test because it involves computation of logarithms. The permutation  $G^2$  test, that performs 999 permutations and computes 999 test statistics, is remarkably fast, as it is at most 2 times slower than R's built in  $X^2$  test which performs only a single test. R's built in *chisq.test()* offers the option of a Monte Carlo p-value, but that would be extremely show for our example here. A reasonable estimate of the computational cost of this Monte Carlo p-value would be to multiply the last column of Table 1 with 999, resulting in more than half an hour.

The  $G^2$  test or G-test is simply a log-likelihood ratio 2002) test whose statistic is given by (Agresti,

$$G^{2}(X,Y) = 2\sum_{i,j} O_{ij}log\left(\frac{O_{ij}}{E_{ij}}\right), \tag{2}$$

Similarly to the  $X^2$  test, under  $H_0$   $G^2 \sim \chi^2_{(|X|-1)(|Y|-1)}$ .

## 2.3 The $X^2$ and $G^2$ tests of conditional independence

When we wish to test whether the two variables are independent conditional on one or more variables **Z** null and alternative hypotheses are

 $H_0: X$  and Y are independent conditional on  $\mathbb{Z}$   $H_1: X$  and Y are NOT independent conditional on  $\mathbb{Z}$  and the  $X^2$  and  $G^2$  test statistics are given by (Agresti, 2002)

$$X^{2}(X,Y) = \sum_{k} \sum_{i,j} \frac{\left(o_{ij|k} - E_{ij|k}\right)^{2}}{E_{ij|k}} \quad and \qquad X^{2}(X,Y) =$$

$$\sum_{k} \sum_{i,j} \frac{\left(o_{ij|k} - E_{ij|k}\right)^{2}}{E_{ij|k}} \quad respectively, \tag{3}$$

where k denotes the k-th value of **Z**. The  $O_{ij|k}$  are the observed frequencies of the i-th and j- th values of X and Y respectively for the k-th value of **Z**. The  $E_{ij|k}$  j are their corresponding expected frequencies computed as  $E_{ij} = \frac{O_{i+|k}O_{+j|k}}{O_{++|k}}$ , where  $O_{i+|k} = \sum_{j=1}^n O_{ij|k}$  and  $O_{+j|k} = \sum_{i=1}^n O_{ij|k}$  and  $O_{++|k} = n_k$ . Under  $H_0$ , both  $X^2$  and  $X^2$  follow a  $x_{(|X|-1)(|Y|-1)|Z|}^2$ , where  $|\mathbf{Z}|$  denotes the cardinality of **Z**. It becomes clear that (1) and (2) are special cases of (3) when  $Z = \emptyset$ .

#### 2.4 Permutation based p-values

The aforementioned test statistics produce asymptotic p-values. Computer intensive methods include Monte Carlo simulations and permutations. In this paper we will rely on permutations to obtain the p-value. With continuous variables for example, the idea is to distort the pairs multiple times and

each time calculate the relevant test statistic (based on Pearson or Spearman). With categorical variables though, extra caution must be taken. Similarly to Fisher's exact test (Agresti, 2002) the permutations must occur in such a way as to keep the row and column totals fixed. The p-value is then computed as the proportion of times the values of the permuted test statistics exceed the value of the test statistic in the original data.

## **2.5** Relationship between the $X^2$ and $G^2$ test statistics

The  $X^2$  test statistic is an approximation of the  $G^2$  using a second order Taylor expansion of the natural logarithm around 0 (Hoey, 2012). Following Hoey (2012) let us write  $O_{ij} = E_{ij} + \tau_{ij}$  and since  $\sum_{j=1}^{n} O_{ij} = \sum_{j=1}^{n} E_{ij}$  this implies that  $\sum_{j=1}^{n} \tau_{ij} = 0$ . The  $G^2$  test (2) is then given by

 $2 \times 2$  contingency table for example with low cell values and or zeros, Fisher's exact test (Fisher, 1922) is ordinarily, even though researchers have argued against its use in such cases (Liddell, 1976; Berkson, 1978) because its actual rejection rate is significance below the set nominal Nonetheless, researchers have proposed generalizations to  $r \times c$  contingency tables (Wells and King, 1980; Mehta and Patel, 1983). Another alternative is to compute the associated p-value using Monte Carlo simulation or random permutations (Tsamardinos and Borboudakis, 2010) which is applicable to larger than  $2 \times 2$  contingency tables as well.

The scope of this paper is to provide evidence that the percentage of cells that contain expected values less than 5, is a non necessary assumption/condition and should be neglected. In addition, we provide evidence as to when to compute the asymptotic p-value of the  $X^2$  or of the  $G^2$  and when to rely on the permutation based p-value. Finally, unlike the previously mentioned papers we assess the performance of the tests when used for conditional

independence. The simulation studies showed that, for either unconditional independence or conditional independence testing, the  $G^2$  performs poor in terms of attaining the type I error, whereas the  $X^2$  test performed better but is not always applicable. The permutations based  $G^2$  though, produced satisfactorily results, but only in certain cases. When used in the context of network construction (e.g. skeleton of a Bayesian network) both tests produce networks of comparable accuracy, but the permutation based  $G^2$  is highly computationally expensive.

The next section presents the two aforementioned tests covering both unconditional and conditional independence. Section 3 presents the simulation studies, and section 4 concludes the paper.

#### 2. Tests of independence for categorical data

Suppose we have n observations from two categorical variables X and Y taking discrete values and their cardinalities, by |X| and |Y|, respectively. The ordinary null and alternative hypotheses are

 $H_0$ : X and Y are independent  $H_1$ : X and Y are NOT independent

The most famous and popular independence tests (and available in all statistical software) for testing the above null hypothesis are the  $X^2$  and the  $G^2$  tests.

#### 2.1 The $X^2$ test of (unconditional) independence

The  $X^2$  test was proposed by Pearson (1900) and its test statistic is given by

$$X^{2}(X,Y) = \sum_{i,j} \frac{(o_{ij} - E_{ij})^{2}}{E_{ij}},$$
(1)

where the  $O_{ij}$  are the observed frequencies of the ith and j-th values of X and Y respectively. The  $E_{ij}$  are their corresponding expected frequencies computed as  $E_{ij} = \frac{O_{i+}O_{+j}}{O_{++}}$ , where  $O_{i+} = \sum_{j=1}^{n} O_{ij}$  and  $O_{+j} = \sum_{i=1}^{n} O_{ij}$  and  $O_{++}$  is equal to the sample size n. Under the independence assumption,  $X^2 \sim x_{(|X|-1)(|Y|-1)}^2$ , where |X| and |Y| denote the cardinality of X and Y respectively, the number of values of X and Y.

#### 2.2 The $G^2$ test of (unconditional) independence

#### 1. Introduction

Categorical data are frequently encountered in many disciplines outside statistics, mainly in the ones that fall under the social sciences umbrella, but also in medicine, biology, sociology, psychology, computer science, political sciences, demography, bioinformatics, dentistry, geology, etc. These data can either be ordinal or nominal variables. Specifically with nominal variables, for which independence is to be tested, the  $X^2$  test and the  $G^2$ test are two commonly applicable tests, both of which are able to capture non-linear relationships between the variables. Even though the list of independence tests is wider (Williams, 1976; Rao and Scott, 1981, 1984), the aforementioned tests have gained popularity mainly due to their simplicity. The convenience and ease of application of those categorical tests of independence has made them widely applicable in the social sciences (Wilcox, 1996), but also in the computer science and bioinformatics for network construction (Tsamardinos, Brown and Aliferis 2006). Despite them being so broadly used, no one, to the best of our knowledge, has performed simulation studies in order to give guidance as to which test to use and when. One exception could be Tsamardinos and Borboudakis (2010) who showed that the permutations based  $G^2$  improves the learning quality of Bayesian networks. Their considered though only the  $G^2$  with and without permutations. Numerous modifications of the two aforementioned tests have been proposed in the literature. Garside and Mack (1976) numerically evaluated the size (type I error) of the  $X^2$  test and some of its corrected versions and saw that the corrected versions are conservative and the size of the  $X^2$  test is closer to the nominal level. For small contingency tables, (greater than  $2 \times 2$ ) and small sample sizes, Lawal and Upton (1984) suggested a modification of the  $X^2$  test to bring the size closer to the nominal level. Davis (1993) described a generalized  $x^2$ 

approximation to the distribution of the  $X^2$  test statistic. Sulewski (2013) proposed the |X| test and Lipsitz, Fitzmaurice, Sinha, Hevelone, Giovannucci and Hu (2015) proposed the Wald and score test statistics for independence based on weighted least squares estimating equations. Velez, Marmolejo-Ramos and Correa (2016) proposed a new graphical method of performing diagnostic analyses applicable in two-way contingency tables.

Towards the simulation based approach, Amiri and von Rosen (2011) showed that non-parametric bootstrap is more efficient than the  $X^2$  test, with or without Yates' correction. Lin, Chang and Pal (2015) proposed the bootstrap versions of  $X^2$  and  $G^2$  tests as they appeared to attain the size better than their asymptotic versions, for small to large sample sizes as well as extreme cell frequencies. Amiri and Modarres (2017) proposed a bootstrap test statistic that provides more accurate inference for small sample sizes.

Both tests are considered to be non-parametric as they make no assumption of the underlying

distribution of the data. They do however entail some assumptions as stated by McHugh (2013). Prior to their application one must first create a contingency table and as McHugh (2013) mentions, the cells should contain frequencies of pairs of values and not percentages. The values of the variables must be mutually exclusive. For instance, in a psychology experiment the respondent can choose only one answer. In the same experiment, all respondents must have answered the questions only once, that is, repeated measurements should not be analyzed using this test. McHugh (2013) states that the categorical variables can also be ordinal, e.g. nominal-ordinal or ordinal-ordinal. A necessary condition applied to the expected values should be satisfied. The number of cells whose expected values is less than 5 should be no more than 20%-25% and no cell must contain 0 frequencies. According to McHugh (2013), no cell should contain expected values that are less than 3. In a

#### مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) (ربيع الثاني 1444هـ/ نوفمبر 2022م) المجلد (7)، العدد (2)



المملكة العربية السعودية جامعة الحدود الشمالية (NBU) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS)

طباعة ردمد: 7022-1658/ إلكتروني – ردمد: 7014-1658

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa Ulacali Alexa

Januari Italia

### اختبارات الاستقلالية للمتغيرات الفئوية: دراسة محاكاة باستخدام مونت كارلو

### عبدالعزيز بن أحمد العنزى

(قدم للنشر في 1443/10/21هـ؛ وقبل للنشر في 1444/4/22هـ)

ملخص البحث: يعد الاختباران  $X^2$  و  $X^2$  أكثر الاختبارات استخداماً لاختبار استقلالية متغيرين فئوبين. وعلى الرغم من ذلك لا أحد -إلى حد علمنا- قام بمقارنتهما على نطاق واسع ولم نجد إجابة عن السؤال أيهما يستخدم ومتى. علاوة على ذلك، فقد تمت مناقشة قابليتهما في الحالات ذات التكرارات الصفرية وتم اقتراح اختبار التباديل (غير المعلمية) لهذه الحالة. في هذه الورقة العلمية قمنا بإجراء در اسات محاكاة مونت كارلو واسعة النطاق وذلك محاولة للإجابة عن النقطتين المذكورتين أعلاه. وكما هو متوقع، في الحالات ذات العينة الكبيرة (>1,000) لايمكن تمييز الاختباران  $X^2$  و  $X^2$ . أما في الحالات ذات العينة الصغيرة (<1,000) فقد قدمنا أدلة تدعم استخدام  $X^2$  بغض النظر عن التكررات الصفرية في حالة الاستقلال غير المشروط على حساب التكلفة الحسابية العالية. أظهر اختبار  $X^2$  أذاءاً ضعيفاً لذا ينبغي استخدامه على نطاق ضيق.

كلمات مفتاحية: المتغيرات الفئوية ، اختبار الاستقلالية

. JNBAS ©1658-7022 (شر بواسطة جامعة الحدود الشمالية .جميع الحقوق محفوظة.

للمراسلة

أستاذ مساعد قسم الرياضيات ، كلية العلوم ، جامعة الحدود الشمالية ص ب: 1321 رمز بريدي: 91431

e-mail: a.alenazi@nbu.edu.sa

DOI: 0.12816/0061187

Journal of the North for Basic and Applied Sciences, Vol. (7), Issue (2), (November 2022/ Rabi' II 1444 H) 114-133



#### KINGDOM OF SAUDI ARABIA Northern Border University (NBU)

Journal of the North for Basic & Applied Sciences (JNBAS)

p - ISSN: 1658 -7022 / e-ISSN: 1658 - 7014

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa



## Categorical tests of Independence: A Monte Carlo Simulation Study

#### Abdulaziz Ahmed Alenazi

(Received 22/5/2022; accepted 16/11/2022)

**Abstract:** The  $X^2$  and  $G^2$  tests are the most frequently applied tests for testing the independence of two categorical variables. However, no one, to the best of our knowledge has compared them, extensively, and ultimately answer the question of which to use and when. Further, their applicability in cases with zero frequencies has been debated and (non parametric) permutation tests are suggested. In this work we perform extensive Monte Carlo simulation studies attempting to answer both aforementioned points. As expected, in large sample sized cases (>1,000) the  $X^2$  and  $G^2$  are indistinguishable. In the small sample-sized cases (<1,000) though, we provide strong evidence supporting the use of the  $X^2$  test regardless of zero frequencies for the case of unconditional independence. Also, we suggest the use of the permutation based  $G^2$  test for testing conditional independence, at the cost of being computationally more expensive. The  $G^2$  test exhibited inferior performance and its use should be limited.

Keywords: categorical variables, test of independence

1658-7022© JNBAS. (1444 H/2022). Published by Northern Border University (NBU). All Rights Reserved.



inbas.nbu.edu.sa DOI: 10.12816/0061187

#### \* Corresponding Author:

Assistant Professor Dept Mathematics, Faculty Science, Northern Border University, P.O. Box: 1321, Code: 91431, City Arar, Kingdom of Saudi Arabia.

e-mail: a.alenazi@nbu.edu.sa

- https://doi.org/10.1016/J.YGENO.2020.07.001
- Hulswit, R. J. G., de Haan, C. A. M., & Bosch, B. J. (2016). Coronavirus Spike Protein and Tropism Changes. In *Advances in Virus Research*. https://doi.org/10.1016/bs.aivir.2016.08.004
- Kumar, S., Nyodu, R., Maurya, V. K., & Saxena, S. K.
  (2020). Morphology, Genome Organization,
  Replication, and Pathogenesis of Severe Acute
  Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) BT Coronavirus Disease 2019
  (COVID-19): Epidemiology, Pathogenesis,
  Diagnosis, and Therapeutics. In Coronavirus
  Disease 2019 (COVID-19).
- Lehmann, E., Brueckner, F., & Cramer, P. (2007).

  Molecular basis of RNA-dependent RNA polymerase II activity. *Nature*. https://doi.org/10.1038/nature06290
- Lei, J., Kusov, Y., & Hilgenfeld, R. (2018). Nsp3 of coronaviruses: Structures and functions of a large multi-domain protein. In *Antiviral Research*. https://doi.org/10.1016/j.antiviral.2017.11.001
- Pachetti, M., Marini, B., Benedetti, F., Giudici, F., Mauro, E., Storici, P., Masciovecchio, C., Angeletti, S., Ciccozzi, M., Gallo, R. C., Zella, D., & Ippodrino, R. (2020). Emerging SARS-CoV-2 mutation hot spots include a novel RNA-dependent-RNA polymerase variant. *Journal of Translational Medicine*. https://doi.org/10.1186/s12967-020-02344-6
- Ratajczak, M. Z., & Kucia, M. (2020). SARS-CoV-2 infection and overactivation of Nlrp3

- inflammasome as a trigger of cytokine "storm" and risk factor for damage of hematopoietic stem cells. *Leukemia*. https://doi.org/10.1038/s41375-020-0887-9
- Shu, Y., & McCauley, J. (2017). GISAID: Global initiative on sharing all influenza data from vision to reality. In *Eurosurveillance*. https://doi.org/10.2807/1560-7917.ES.2017.22.13.30494
- Strickler, S. S., Gribenko, A. V., Gribenko, A. V., Keiffer, T. R., Tomlinson, J., Reihle, T., Loladze, V. V., & Makhatadze, G. I. (2006). Protein stability and surface electrostatics: A charged relationship. *Biochemistry*. https://doi.org/10.1021/bi0600143
- Subissi, L., Posthuma, C. C., Collet, A., Zevenhoven-Dobbe, J. C., Gorbalenya, A. E., Decroly, E., Snijder, E. J., Canard, B., & Imbert, I. (2014). One severe acute respiratory syndrome coronavirus protein complex integrates processive RNA polymerase and exonuclease activities. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. https://doi.org/10.1073/pnas.1323705111
- Yoshimoto, F. K. (2020). The Proteins of Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus-2 (SARS CoV-2 or n-COV19), the Cause of COVID-19. In *Protein Journal*. https://doi.org/10.1007/s10930-020-09901-4
- Ziebuhr, J. (2003). SARS Unprecedented global response to a newly emerging disease. In *International Journal of Medical Microbiology*. https://doi.org/10.1078/1438-4221-00270

arginine residues or changes in two arginine residues always result in temperature sensitivity. While three changes were shown to drastically reduce infectivity, the mutant replicon was still able to replicate in a few transfected cells (Angeletti, Benvenuto, Bianchi, Giovanetti, Pascarella, & Ciccozzi, 2020). Although not fully understood, this defect is most likely related to a defect in the viral replicase complex that causes the absence of all three arginine and prevents the replication process (Tamm, Merits, & Sarand, 2008). NSP3 also interacts with and possibly hosts proteins in SARS-CoV-2, thus playing a role in membrane rearrangement (Sakai, Kawachi, Terada, Omori, Matsuura, & Kamitani, 2017). The interaction between NSP4 and NSP3 is also essential for viral replication (Yoshimoto, 2020). There is a unique mutation in Saudi SARS-CoV-2 at position 183 on the ORF1a where, in the NSP4 region, the glutamate is replaced with glycine. Glycine is a non-polar, aliphatic amino acid and the simplest of the group of amino acids that has a high composition in interacting residues because it revolves easily and provides flexibility to interact with RNA molecules (Cheng, Su, Hwang, Sung, & Hsu, 2008).

To achieve complete transcription and replication of the viral genome, several other NSPs subunits are required to form a holoenzyme complex, including NSP10, NSP13, NSP14 and NSP16, for which the precise functions in RNA synthesis are not well understood (Lehmann et al., 2007; Ziebuhr, 2003). The viral polymerase has shown enormous promise as a highly potent antiviral drug target due to its high evolutionary stability compared to the surface proteins, which are more prone to drift as a result of selection immunity. by host Therefore, understanding the structure and function of the SARS-CoV-2 polymerase complex is an essential prerequisite for developing novel therapeutic agents.

- **5. Acknowledgments:** I appreciate the help and support provided by the Northern Border University through this work.
- **6.** Conflicts of Interest: I declare no conflict of interest.

#### 7. References

- Agostini, M. L., Andres, E. L., Sims, A. C., Graham, R. L., Sheahan, T. P., Lu, X., Smith, E. C., Case, J. B., Feng, J. Y., Jordan, R., Ray, A. S., Cihlar, T., Siegel, D., Mackman, R. L., Clarke, M. O., Baric, R. S., & Denison, M. R. (2018). Coronavirus susceptibility to the antiviral remdesivir (GS-5734) is mediated by the viral polymerase and the proofreading exoribonuclease. *MBio*. https://doi.org/10.1128/mBio.00221-18
- Angeletti, S., Benvenuto, D., Bianchi, M., Giovanetti, M., Pascarella, S., & Ciccozzi, M. (2020). COVID-2019: The role of the nsp2 and nsp3 in its pathogenesis. *Journal of Medical Virology*. https://doi.org/10.1002/jmv.25719
- Barlow, D. J., & Thornton, J. M. (1983). Ion-pairs in proteins. *Journal of Molecular Biology*. https://doi.org/10.1016/S0022-2836(83)80079-5
- Carrat, F., & Flahault, A. (2007). Influenza vaccine: The challenge of antigenic drift. In *Vaccine*. https://doi.org/10.1016/j.vaccine.2007.07.027
- Graham, R. L., Sparks, J. S., Eckerle, L. D., Sims, A. C., & Denison, M. R. (2008). SARS coronavirus replicase proteins in pathogenesis. *Virus Research*.
  - https://doi.org/10.1016/j.virusres.2007.02.017
- Harvey, W. T., Carabelli, A. M., Jackson, B., Gupta, R. K., Thomson, E. C., Harrison, E. M., Ludden, C., Reeve, R., Rambaut, A., Peacock, S. J., & Robertson, D. L. (2021). SARS-CoV-2 variants, spike mutations and immune escape. In *Nature Reviews Microbiology*. https://doi.org/10.1038/s41579-021-00573-0
- Hassan, S. S., Choudhury, P. P., & Roy, B. (2020). SARS-CoV2 envelope protein: non-synonymous mutations and its consequences. *Genomics*, 112(6), 3890–3892.

S	2	0.00	No record
I	1	0.00	No record
I	1	0.00	No record
T	8	0.00	(geo)
W	4	0.00	(geo)
D	229	0.00	(geo)
R	1	0.00	No record
Е	5820307	99.99	reference aa

#### 4. Discussion

Coronavirus replication is controlled by a group of non-structural proteins (NSPs) encoded by the open reading frame 1a (ORF1a) and the ORF1ab in its genome, which are initially translated polyproteins, followed by proteolysis cleavage for maturation (Ziebuhr, 2005). Both transcription and replication of the viral genome are mediated by these proteins via their multi-subunit polymerase complex. Non-structural proteins, such as NSP12, are catalytic subunits with RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) activity (Agostini et al., 2018) that is capable of conducting the polymerase reaction with extremely low efficiency. NSP12 polymerase activity is stimulated by the cofactors of other non-structural proteins, such as NSP7 and NSP8 (Subissi et al., 2014); together, they form a sub-complex that defines the minimal core components for mediating coronavirus RNA synthesis. Thus, the recorded mutation on the NSP12 may affect its ability, as cofactors of other non-structural proteins, as it results in the replacement of lysine with arginine. By forming ionic interactions and hydrogen bonds in the proteins as well as by interacting with water molecules, these surface amino acids play significant roles in protein stability (Barlow & Thornton, 1983; Strickler, Gribenko, Gribenko,

Keiffer, Tomlinson, Reihle, Loladze, & Makhatadze, 2006). However, increased protein solubility is known to correlate with an increase in the proportion of lysine over arginine residues due to their different pKa values (12.48 and 10.53, respectively) (Austerberry, Thistlethwaite, Fisher, Golovanov, Pluen, Esfandiary, Van Der Walle, Warwicke, Derrick, & Curtis, 2019). Differences in the pKa values can affect the stability of ionic interactions associated with lysine or arginine residues under different pH levels (Turunen, Vuorio, Fenel, & Leisola, 2002).

Another unique mutation recorded in Saudi CoV-2 results from the replacement of leucine with glutamine in NSP2, which is a component of the viral replication complex that is essential and multifunctional. CoV-2 has proved to be more contagious compared to SARS, probably due to the structural similarity of the region that is subjected to positive selection as well as the stabilizing mutation in the endosome-associated, protein-like domain of the NSP2 protein. Hence, it is possible that CoV-2 is distinguished from SARS by a destabilizing mutation occurring near the phosphatase domain in the NSP3 proteins(Angeletti et al., 2020). Despite the fact that single amino acid residues can be tolerated in the NSP2, deletions of one or two

Е	1	0.00	No record
V	3	0.00	No record
N	13	0.00	(geo)
D	1	0.00	No record
S	140	0.00	(geo)
K	53	0.00	(geo)
I	115	0.00	(geo)
del	132	0.00	(geo)
Н	1	0.00	No record
Q	8	0.00	(geo)
R	5820189	99.99	reference aa

Table 2d: Mutation statistics for NSP4 at position 183 (the recorded mutations from Saudi Arabian SARS-CoV-2 are highlighted)

AA	<u># Occ.</u>	<u>%</u>	Geo Distribution
A	47	0.00	(geo)
stop	3	0.00	No record
K	57	0.00	(geo)
V	6	0.00	(geo)
Н	2	0.00	No record
Y	1	0.00	No record
del	23	0.00	(geo)
Q	87	0.00	(geo)
N	6	0.00	(geo)
G	56	0.00	(geo)

S	14	0.00	(geo)
Y	3	0.00	No record
F	1	0.00	No record
K	1	0.00	No record
insLILTW	1	0.00	No record
F	3	0.00	No record
I	4720	0.08	(geo)
insVVIHQLVstop	1	0.00	No record
L	23	0.00	(geo)
T	5815465	99.91	reference aa

Table 2c: The mutation statistics for NSP12 at position 349 (the recorded mutations from Saudi Arabian SARS-CoV-2 are highlighted)

AA	<u># Occ.</u>	<u>%</u>	Geo Distribution
stop	4	0.00	(geo)
L	2	0.00	No record
Т	10	0.00	(geo)
insL	1	0.00	No record
Y	1	0.00	No record
insMstopTYI	5	0.00	(geo)
insG	1	0.00	No record
P	1	0.00	No record
G	159	0.00	(geo)
insstopTYI	1	0.00	No record

N	6	0.00	(geo)
del	7	0.00	(geo)
W	104	0.00	(geo)
T	3	0.00	No record
R	9	0.00	(geo)
Q	47	0.00	(geo)
<b>Q</b> F	3	0.00	(geo) No record
			-
F	3	0.00	No record

Table 2b: The mutation statistics for NSP3 at position 1590 (the recorded mutations from Saudi Arabian SARS-CoV-2 are highlighted)

<u>AA</u>	<u># Occ.</u>	<u>%</u>	Geo Distribution
del	1	0.00	No record
A	32	0.00	(geo)
M	6	0.00	(geo)
insDFSYGstopNVHLL	1	0.00	No record
stop	2	0.00	No record
insHHFIMYGKVM	1	0.00	No record
V	8	0.00	(geo)
Е	1	0.00	No record
del	35	0.00	(geo)
P	5	0.00	(geo)
N	450	0.01	(geo)a
Н	67	0.00	(geo)

MZ208928	NSP2 L39Q	ORF 1a	Lucien	Glutamin	hCoV-	South	Dec/2020
				e	19	Korea	
MZ206430	NSP12	349	Lysine	Arginine	hCoV-	Italy	Feb/2020
	R349K	ORF1ab			19		
MT755892	NSP4	183 OR	F Glutamat	Glycine	hCoV-	Saudi	Feb/2020
	E183G	1a	e		19	Arabia	

#### 3.2. Amino acid substitutions recorded in each unique mutation

In the current study, the recorded single-point mutations in the NSP3 region showed that threonine was replaced by alanine at position 1590 on the open reading frame 1a, (Table 2b). Unlike threonine, alanine is a non-polar amino acid and the second of the simple amino acid after glycine. Another mutation resulted in the substitution of glutamine for leucine on ORF1a; these amino acids have different polarities, which may affect the physical properties of the NSP2 region. The R349K mutation in the NSP12 region was first recorded in Italy in February 2020, replacing lysine with arginine, which has similar properties, at position 349 on ORF1a (Table 2c). The Saudi SARS-CoV-2 unique mutation was recorded at the NSP4 position 183 on ORF1a (Table 2d), where glutamate was replaced with glycine. Compared to glutamate, glycine is a non-polar aliphatic residue and the simplest stable amino acid in the group.

The recorded mutations in the current work originated in different countries; for example, the NSP4 mutation was first recorded in Colorado in the United States and was then identified on the European continent, followed by the Middle East. The last record of this mutation was in Saint-Denis as shown in Table 2d. Another mutation is NSP12 R349K, which mostly occurs in central Europe and North America and has only recently been found in the Middle East. R349K was first recorded in Baden-Wurttemberg, Germany followed by France and has also recently been recorded in Nouvelle-Aquitaine, France. The L39Q mutation in the NSP2 region was first recorded in Kano, Nigeria and has been reported worldwide, including in the Saudi capital, Riyadh. All data obtained from the updated database, which includes 5,820,841 sequences, were compared to the reference sequence EPI ISL 402124 in the following tables based on the last update on December 11, 2022.

Table 2a: The mutation statistics for NSP2 at position 39 (the recorded mutations from Saudi Arabian SARS-CoV-2 are highlighted)

<u>AA</u>	<u># Occ.</u>	<u>%</u>	Geo Distribution
P	2	0.00	No record
G	1	0.00	No record
M	416	0.01	(geo)

#### 2. Methods

#### 2.1. Bioinformatics

The current work is an *in silico* study that aimed to evaluate the genetic variations of recorded SARS-CoV-2 strains in Saudi Arabia. SARS-CoV-2 sequences were obtained from the severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 data hub, NCBI (May 2021). The sequence of the Wuhan strain, hCoV-19/Wuhan/WIV04/2019, was included as the reference sequence. Fifty-three sequences were aligned on the MEGA X platform against the reference (Kumar, Stecher, Li, Knyaz, & Tamura, 2018) using the ClustalW algorithm.

#### 2.2. Amino acid (aa) mutation analysis

The aligned sequences were analyzed using CoVsurver on GISAID, which permits rapid screening of coronavirus genomes for potentially significant aa changes to identify candidates for phenotypic changes or special epidemiological relevance (Shu & McCauley, 2017). All aa mutations were screened to identify the unique ones. Unique aa mutations only were investigated using CoV-GLUE to distinguish the variation between the query and the reference genome and to extract the geographical (Geo) data for each unique mutation.

#### 3. Results

3.1. The unique mutations of Saudi Arabian SARS-Cov-2 strains

Fifty-three genomic sequences of Saudi SARS-CoV-2 were analyzed using CoVsurver, revealing several aa mutations, including the unique mutation NSP3 T1590A, which has already been identified 10 times (0.00% of all samples with NSP3 sequence) in six different countries. The first strain with this aa change, collected in February 2020, was hCoV-19/Saudi Arabia/553/2020. This aa change most recently occurred in strain hCoV-19/South Africa/NICD-N13123/2021, collected in July 2021. In addition, NSP2 L39Q has already occurred 26 times (0.00% of all samples with NSP2 sequence) in nine countries. The first strain with this aa change, collected in February 2020, was hCoV-19/South Korea/KCDC2024/2020. The most recent aa change occurred in strain hCoV-19/USA/FL-CDC-LC0186780/2021, collected in August 2021. NSP12 R349K has already occurred 29 times (0.00% of all samples with NSP12 sequence) in 10 countries. Italy recorded the first strain with this aa change, collected in December 2020, known as hCoV-19/Italy/CAM-CRGS-277/2020. The most recent as change occurred in strain hCoV-19/South Korea/KDCA6515/2021, collected in July 2021. The NSP4 E183G has already occurred 46 times (0.00% of all samples with NSP4 sequence) in 13 countries. NSP4 E183G, the first strain with this aa change, was collected in February 2020 and named hCoV-19/Saudi Arabia/583/2020. This aa change strain hCoVmost recently occurred in 19/England/MILK-1B8615C/2021, collected in August 2021 (see Table 1).

Table 1: Unique mutations in the amino acids (aa) of Saudi SARS-Cov-2 strains

Accession No.	Replaceme nt	Position	aa in ref	aa in query	Ref	First record	Date
MT755889	NSP3 T1590A	1590 ORflab	Threonine	Alanine	hCoV- 19	Saudi Arabia	Feb/2020

#### 1. Introduction

Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), which caused the coronavirus outbreak in 2019, is an enveloped, positive-sense RNA virus. Its genome consists of genetic material and structural proteins needed for the invasion of host cells. Although the COVID-19 pandemic started late in 2019, the phylogenetic analysis of different full genomes of Coronavirus isolated from different countries has identified several variants with variabilities in the viral amino acid sequence (Hulswit, de Haan, & Bosch, 2016). Although such analysis has helped in detecting sources of infections as well as in developing vaccines, there is a need to follow the ongoing changes in the viral genome that cause variations in the virus's response to the current vaccines (Hulswit et al., 2016).

The SARS-CoV-2 genome consists of between 6 and 11 open reading frames (ORFs), the first of which (ORF1a/b) forms about two-thirds of the viral RNA. ORF1a/b encodes for polyprotein1a and polyprotein 1b as well as 1-16 non-structural proteins (NSP 1-NSP 16) ( Graham, Sparks, Eckerle, Sims, & Denison, 2008; Kumar, Nyodu, Maurya, & Saxena, 2020). These proteins play a key role in virus assembly, transcription, replication and host control, and suppression of host immune responses as well as the suppression of host gene expression (Chan, Kok, Zhu, Chu, To, Yuan, & Yuen, 2020). Thus, they have attracted a considerable interest in relation to developing antiviral therapies, including studies of mutated proteins during the current pandemic (Harvey, Carabelli, Jackson, Gupta, Thomson, Harrison, Ludden, Reeve, Rambaut, Peacock, & Robertson, 2021; Hassan, Choudhury, & Roy, 2020).

NSPs differ in their roles and may act as multifunctional proteins, for example, NSP3, which acts as a viral protease and has the ability to suppress interferon responses (Forni, Cagliani, Clerici, & Sironi, 2017). On the other hand, NSP12 is a major

enzyme in the replication and transcription of the viral genome and is also the RNA-dependent RNA polymerases (RdRps) of SARS-CoV-2 (Pachetti, Marini, Benedetti, Giudici, Mauro, Storici, Masciovecchio, Angeletti, Ciccozzi, Gallo, Zella, & Ippodrino, 2020). Indeed, the association between NSP7 and NSP8 with NSP12 forms a stable super complex (Pachetti et al., 2020) that ensures the transcription fidelity of the virus. NSP2, on the other hand, may alter the host cell environment by binding to prohibitin 1 and prohibitin 2 (PHB1 and PHB2) (Cornillez-Ty, Liao, Yates, Kuhn & Buchmeier, NSP3 is another multi-domain, non-2009). structural protein; it is the largest protein encoded by the coronavirus genome, with an average molecular mass of about 200 kD (Lei, Kusov, & Hilgenfeld, 2018). NSP3 is an essential component of the replication/transcription complex (Lei et al., 2018).

While structural proteins, which have the most exposure to the host immune response, have gained wide attention from drug developers, non-structural components also play a major role in virus-host interactions (Yoshimoto, 2020), as changes in these proteins induce perturbations in the virus infection. Therefore, they have been the target of investigations of neutralizing antibodies. Recently, it has been found that SARS-CoV-2 induces cytokine storms and pyroptosis in the host cells, which in many cases results in severe symptoms that increase the risk of mortality (Ratajczak & Kucia, 2020). The viral polymerase has shown enormous promise as a highly potent antiviral drug target because of its higher evolutionary stability compared with the surface proteins, which are more prone to drift due to selection by host immunity (Carrat & Flahault, 2007). Thus, current work is investigating the unique mutations in the NSPs through the resulting changes of amino acids using the Saudi Arabian CoV-SARS-2 genome in comparison with the Wuhan strain, hCoV-19/Wuhan/WIV04/2019.

#### مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) (ربيع الثاني 1444هـ/ نوفمبر 2022م) المجلد (7)، العدد (2)



المملكة العربية السعودية جامعة الحدود الشمالية (NBU) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS)

طباعة ردمد: 7022-1658/ إلكتروني – ردمد: 7014-1658

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa مجلة الشمال

## البروتينات غير التركيبية دورها في تخليق الحمض النووى الريبي وإمكانية العدوى وتطوير اللقاحات لفيروس كورونا

احمد خزيم الزهراني

(قدم للنشر في 1444/5/18هـ ؛ وقبل للنشر في 1444/5/18هـ)

ملخص البحث: يقع فيروس كورونا كوفيد2 ضمن عائلة فيروسات الرنا مفردة السلسلة موجبة الدلالة المغلفة ، ويتكون الحمض النووي للفيروس من المورثات والبروتينات الهيكلية اللازمة لغزو الخلايا المضيفة. حيث تساعد هذه البروتينات في نسخ وتكرار الجينوم الفيروسي كاملا. كما يحتاج هذا النوع من الفيروسات الى العديد من البروتينات الغير تركيبية (NSPs) والتي تساهم في تشكل مركبات تحدد المكونات الأساسية الصغرى اللازمة لتخليق الحمض النووي الريبي للفيروس. أظهرت عديد الدراسات ان البروتينات الغير تركيبية تكون أكثر عرضة للتشوة نتيجة الانتقاء من قبل مناعة المضيف وهو ما يسبب تأثيرا على القدرات المعدية للفيروس بسبب التغيرات في المكونات الأساسية التي تتوسط الحمض النووي الريبي الفيروسي أعدت الدراسة الحالية باستخدام قاعدة البيانات CoVsurverعلى الموقع GISAID، وقد استطعنا من خلالها تحليل الجينوم الخاص ب 53 عينة من فيروس كوفيد 2 تم عزلها في المملكة العربية السعودية. حيث أظهرت النتائج وجود عدد من الطفرات الفريدة في البروتينات الغير تركيبية والتي شملت البروتين الغير تركيبي الثاني NSP2 الذي يعزز قدرة الفيروس على العدوى والتحمل للمتغيرات كما يضمن حدوث عملية التكاثر. كما ظهرت طفرات مميزة على عدد من البروتينات الغير تركيبة و شملت هذه الطفرات البروتينات: NSP10, NSP13, NSP14 and NSP16 والتي لا نعلم الكثير عن دورها في تخليق الحمض الريبي للفيروس بعد. و شكلت البروتينات موضوع الدراسة مجالا إهتم به مطورو اللقاحات لوقت طويل، لذا فإن فهم هذه البروتينات بالنسبة للفيروس كوفيد 2 له دور كبير في نجاح عملية تطوير لقاح مضاد.

كلمات مفتاحية: فيرس كورونا كوفيد 2، البروتينات الغير تركيبية، الطفرات، انزيم البلمرة، الأحماض الأمينية

. JNBAS ©1658-7022 (شر بواسطة جامعة الحدود الشمالية .جميع الحقوق محفوظة.

للمراسلة:

国际数国

استاذ مساعد قسم تقنية المختبرات الطبية، كلية العلوم الطبية التطبيقية، جامعة الحدود الشمالية ص ب: 1231 رمز بريد*ي*: 91431

DOI:10.12816/0061189

e-mail: akaalz@nbu.edu.sa

Journal of the North for Basic and Applied Sciences, Vol. (7), Issue (2), (November 2022/ Rabi' II 1444 H) 103-113



#### KINGDOM OF SAUDI ARABIA Northern Border University (NBU)

Journal of the North for Basic & Applied Sciences (JNBAS)

p - ISSN: 1658 -7022 / e-ISSN: 1658 - 7014

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa



## Nonstructural proteins guide coronavirus RNA synthesis, infectious capability and vaccine development

#### A. Khuzaim Alzahrani

(Received 27/6/2022; accepted 12/12/2022)

Abstract: Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) is an enveloped, positive-sense RNA virus. The genome of the virus consists of genetic material and structural proteins needed for the invasion of host cells. To achieve complete transcription and replication of the viral genome, several non-structural proteins (NSPs) subunits are required to form a holoenzyme complex that defines the minimal core components for mediating coronavirus RNA synthesis. Unlike structural proteins, NSPs are more prone to drift due to selection by host immunity, which may affect viral infectious abilities. The current study used the CoVsurver on the GISAID website for the in silico screening of significant amino acid changes to identify candidates for phenotypic changes or special epidemiological relevance in 53 genomic sequences of SARS-CoV-2 in Saudi Arabia. The recorded unique mutations in the NSPs-like domain of the NSP2 protein were found to enhance SARS-CoV-2's contagious ability compared to SARS, its survivability rate at different temperatures and its achievement of complete transcription and replication. Other unique mutations in NSP10, NSP13, NSP14 and NSP16, whose precise functions in RNA synthesis are not well understood, were also recorded. Proteins have attracted considerable interest in the development of antiviral therapies; therefore, understanding the structure and function of the SARS-CoV-2 polymerase complex is an essential prerequisite in developing novel therapeutic agents.

Keywords: SARS-CoV-2, Non-structural proteins (NSPs), Mutations, Polymerase, Amino Acids(aa)

1658-7022© JNBAS. (1444 H/2022). Published by Northern Border University (NBU). All Rights Reserved.



inbas.nbu.edu.sa DOI: 10.12816/0061189

#### \* Corresponding Author:

Northern Border University, Faculty of Applied Medical Sciences, Arar, P.O. Box 1231, Arar 91431, Kingdom of Saudi Arabia

\*Corresponding author E-mail: akaalz@nbu.edu.sa

- and interaction with Salmon sperm DNA. *RSC Advances*, 4, 57505–57521. DOI: 10.1039/C4RA10487K.
- Smith, P. J., & Tupčiauskas, A. P. (1978). Chemical Shifts of 119Sn Nuclei in Organotin Compounds. *Annual Reports on NMR Spectroscopy*, *8*, 291–370. DOI: 10.1016/S0066-4103(08)60301-4
- Srinivasan, N., (2019). Fabrication and photocatalytic properties of Multi-Morphological CdS NSs prepared by the thermolysis of heterocyclic dithiocarbamate Cadmium(II) complexes as precursors. *Dyes and Pigments*, 162, 786 \(\text{\t
- Tan, Y.-X., Zhang, Z.-J., Liu, Y., Yu, J.-X., Zhu, X.-M., Kuang, D.-Z., & Jiang, W.-J. (2017). Synthesis,

- crystal structure and biological activity of the Schiff base organotin(IV) complexes based on salicylaldehyde-o-aminophenol. *Journal of Molecular Structure*, *1149*, 874–881. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.08.058.
- Tarahhomi, A., & Van Der Lee, A. A. (2018). New six-coordinate organotin(IV) complex of OP[NC<sub>5</sub>H<sub>10</sub>]<sub>3</sub>: A comparison with an analogous five-coordinate complex by means of X-ray crystallography, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. *Journal of Coordination Chemistry*, 71, 1575–1592. DOI: 10.1080/00958972.2018.1461847.

- Biological Activity. *Molecules*, 23(10), 2571–2598. DOI: 10.3390/molecules23102571.
- Joseph, J., Nagashri, K., & Ayisha Bibin Rani, G. (2013). Synthesis, characterization and antimicrobial activities of copper complexes derived from 4-aminoantipyrine derivatives. *Journal of Saudi Chemical Society*, 17, 285–294. DOI: 10.1016/j.jscs.2011.04.007.
- Khan, S. Z., Zia-ur-Rehman, Butler, I. S., & Bélanger-Gariepy, F. (2019). New ternary palladium(II) complexes: Synthesis, characterization, in vitro anticancer and antioxidant activities. *Inorganic Chemistry Communications*, 105, 140–146. DOI: 10.1016/j.inoche.2019.04.019
- Kim, J. S., Lee, C. W., & Han, K.-Y. (2019). Energy level tuning of InP/ZnS nanocrystals by electronically delocalized dithiocarbamate derivatives.

  \*\*Materials Today Communications, 18, 149□152.\*\*

  DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.12.002.
- Liu, K., Yan, H., Chang, G., Li, Z., Niu, M., & Hong, M. (2017). Organotin(IV) complexes derived from hydrazone Schiff base: Synthesis, crystal structure, in vitro cytotoxicity and DNA/BSA interactions. *Inorganica Chimica Acta*, 464, 137–146. DOI: 10.1016/j.ica.2017.05.017.
- Liu, W., Duan, H., Wei, D., Cui, B., & Wang, X. (2019). Stability of diethyl dithiocarbamate chelates with Cu(II), Zn(II) and Mn(II). *Journal of Molecular Structure*, 1184, 375–381. DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.02.009.
- Lockhart, T. P., & Manders, W. F. (1986). Structure determination by NMR spectroscopy. Dependence of |<sup>2</sup>J(<sup>119</sup>Sn, <sup>1</sup>H)| on the Me–Sn–Me angle in methyltin(IV) compounds. *Inorganic Chemistry*, 25, 892–895. DOI: 10.1021/ic00227a002.
- Lockhart, T.P., Manders, W.F., & Zuckerman, J. J. (1985). Structural investigations by solid-state carbon-13 NMR. Dependence of |1J(119Sn,13C)| on the methyl-tin-methyl angle in methyltin(IV)s. *Journal of the American Chemical Society, 107*, 4546–4547. DOI: 10.1021/ja00301a030.
- Momeni, B. Z., & Ghanbarzadeh, R. K. S. (2012). Reactivity of diorganotin(IV) dichlorides towards N, P, and O donor ligands: crystal structure of [SnMe<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(phendione)]. *Monatshefte für Chemie*, 143, 1479–1486. DOI: 10.1007/s00706-012-0733-5.
- Momeni, B. Z., Kia, R., & Ghanbarzadeh, S. (2012).

  Reactivity of diorganotin(IV) dichlorides towards N, P, and O donor ligands: crystal structure of [SnMe<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(phendione)]. *Monatshefte für Chemie*, 143 (11), 1479–1486. DOI: 10.1007/s00706-012-0733.5
- Oladipo, S. D., Omondi, B., & Mocktar, C. (2019). Synthesis and structural studies of nickel(II)- and copper(II)-N,N'-diarylformamidine dithiocarbamate complexes as antimicrobial and antioxidant

- agents. *Polyhedron*, 170, 712–722. DOI: 10.1016/j.poly.2019.06.038.
- Onwudiwe, D. C., & Ajibade, P. A. (2010). Synthesis and characterization of metal complexes of N-alkyl-N-phenyl dithiocarbamates. *Polyhedron*, *29*, 1431–1436. DOI: 10.1016/j.poly.2010.01.011.
- Onwudiwe, D. C., & Hosten, E. C. (2018). Synthesis, structural characterization, and thermal stability studies of heteroleptic cadmium(II) dithiocarbamate with different pyridyl groups. *Journal of Molecular Structure*, 1152, 409–421. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.09.076.
- Pettinari, C. (2017). NMR Spectroscopy, Heteronuclei, Ge, Sn, Pb, Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry (Third Edition) UK. Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, Elsevier, 330.
- Rodríguez-Uribe, N. A., Claudio-Catalán, M. Á., Medrano, F., Luis, G. P., Tlahuext, H., & Godoy-Alcántar, C. (2020). Anion interaction with homoditopic chlorodiorganotin(IV) dithiocarbamate complexes derived from a naphthalene diimide. A pathway to obtain metallomacrocycles. *Polyhedron*, 186, 114615. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114615.
- Sedaghat, T., & Shafahi, F. (2009). Synthesis, spectral, and thermal studies of organotin(IV) complexes with 4-bromo-2-{[(2-hydroxyphenyl)imino]methyl}phenol. *Main Group Chemistry*, 8, 1–9. DOI: 10.1080/10241220902962895.
- Shabbir, H., Ali, S., Shahzadi, S., Tahir, M. N., & Shahid, M. (2016). Synthesis, characterization, single crystal XRD and biological screenings of organotin(IV) derivatives with 4-(2-hydroxyethyl)piperazine-1-carbodithioic acid. *Journal of Coordination Chemistry*, 69, 687–703. DOI: 10.1080/00958972.2015.1133813
- Shi, P.-F., Jiang, Q., Duan, H.-C., & Wang, D.-Q. (2014). Synthesis, characterization and cytotoxicity of fluorescent organotin complexes of terpyridine derivatives. *Chinese Chemical Letters*, 25(4), 586–588. DOI: 10.1016/j.cclet.2014.01.049.
- Sigh, H. B., Maheshwari, S., Srivastava, S., & Rani, V. (1982). Syntheses and Characterisation of Some Metal Complexes of 4-Aminophenazone Dithiocarbamate. Synthesis and Reactivity in Inorganic and Metal-Organic chemistry, 6, 659–669. DOI: 10.1080/00945718208082683.
- Singh, H. B., Maheshwari, S., & Tomer, H. (1983). Thermal and spectral studies of some metal-4-aminophenazone dithiocarbamates. *Thermochimica Acta*, 64, 47–53. DOI: 10.1016/0040-6031(83)80127-0.
- Sirajuddin, M., Ali, S., Mckee, V., Zaibd, S., & Iqbal, J. (2014). Organotin(IV) carboxylate derivatives as a new addition to anticancer and antileishmanial agents: Design, physicochemical characterization

#### References

- Adokoh, C. K. (2020). Therapeutic potential of dithiocarbamate supported gold compounds. *RSC Advances*, 10, 2975–2988. DOI: 10.1039/c9ra09682e.
- Akremi, A., & Noubigh, A. (2019). New organotin(IV) chlorides derived from N-(2-hydroxyphenyl)aryloxy sulfamates. Synthesis, characterization and DSC investigation. *Journal of Chemical Sciences*, 131. DOI: 10.1007/s12039-018-1586-1.
- Akremi, A., Noubigh, A., & Abualreish, M. J. A. (2018).

  Novel organotin(IV) complexes, derived from chiral benzimidazoles: Synthesis, Molecular Structure and Spectral Properties. *Oriental Journal of Chemistry*, 34, 764–770. DOI: 10.13005/ojc/340220.
- Altaf, M., Monim-ul-Mehboob, M., Kawde, A., Corona, G., Larcher, R., Ogasawara, M., Casagrande, N., Celegato, M., Borghese, C., Siddik, Z. H., Aldinucci, D., & Isab, A. A. (2017). New bipyridine gold(III) dithiocarbamate-containing complexes exerted a potent anticancer activity against cisplatin-resistant cancer cells independent of p53 status. *Oncotarget*, 8, 490–505. DOI: 10.18632/oncotarget.13448.
- Andrew, F. P., & Ajibade, P. A. (2018). Metal complexes of alkyl-aryl dithiocarbamates: Structural studies, anticancer potentials and applications as precursors for semiconductor nanocrystals.

  Journal of Molecular Structure, 1155, 843–855.

  DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.10.106.
- Andrew, P. F., & Ajibade, P. A. (2018). Metal complexes of alkyl-aryl dithiocarbamates: Structural studies, anticancer potentials and applications as precursors for semiconductor nanocrystals.

  Journal of Molecular Structure, 1155, 843–855.
  DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.10.106.
- Anupama, B., Sunita, M., Shiva Leela, D., Ushaiah, B., & Kumari Gyana, C. (2014). Synthesis, Spectral Characterization, DNA Binding Studies and Antimicrobial Activity of Co(II), Ni(II), Zn(II), Fe(III) and VO(IV) Complexes with 4-Aminoantipyrine Schiff Base of Ortho-Vanillin. *Journal of Fluorescence*, 24, 1067–1076. DOI: 10.1007/s10895-014-1386-z.
- Awang, N., Kamaludin, N. F., Baba, I., Chan, K. M., Rajaajab, N. F., & Hamid, A. (2016). Synthesis, Characterization, and Antitumor Activity of New Organotin(IV) Methoxyethyldithiocarbamate Complexes. *Oriental Journal of Chemistry, 32*, 101–107. DOI: 10.13005/ojc/320110.
- Ayyavoo, S. S., & Ramalingam, B. (2017). Tris dithiocarbamate of Co(III) complexes: Synthesis, characterization, thermal decomposition studies and experimental and theoretical studies on their

- crystal structures. *Journal of Molecular Structure*, 1134, 416–425. DOI: 10.1016/j.molstruc.2016.12.097.
- Behjati, M., Baghdadi, M., & Karbassi, A. (2018). Removal of mercury from contaminated saline wasters using dithiocarbamate functionalized-magnetic nanocomposite. *Journal of Environmental Management*, 21, 366 □ 378. DOI: 10.1016/j.jenvman.2018.02.052.
- Bobinihi, F. F., Onwudiwe, D. C., Ekennia, A. C., Okpareke, O. C., Arderne, C., & Lane, J. R. (2019). Group 10 metal complexes of dithiocarbamates derived from primary anilines: Synthesis, characterization, computational and antimicrobial studies. *Polyhedron*, 158, 296–310. DOI: 10.1016/j.poly.2018.10.073.
- Bonati, F., & Ugo, R. (1967). Organotin(IV) N,N-disubstituted dithiocarbamates, *Journal of Organometallic Chemistry*, 10, 257–268. DOI: 10.1016/S0022-328X(00)93085-7.
- Chniti, I., Sanhoury, M. A. K., Merlet, D., & Chehidi, I. (2014). Synthesis and conformational study of new S-polyfluoroalkyl dithiocarbamates. *Journal of Fluorine Chemistry*, 168, 223–229. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2014.10.015.
- de Morais, B. P., de Lima, G. M., Pinheiro, C. B., San Gil, R. A. S., Takahashi, J. A., Menezes, D. C., & Ardisson, J. D. (2015). Multinuclear NMR and crystallographic studies of triorganotin valproates and their in vitro antifungal activities. *Journal of Molecular Structure*, 1094, 246–253. DOI: 10.1016/j.molstruc.2015.03.044.
- de Souza, Í. P., de P. Machado, B., de Carvalho, A. B., Binatti, I., Krambrock, K., Molphy, Z., Kellett, A., Pereira-Maia, E. C., & Silva-Caldeira, P. P. (2019). Exploring the DNA binding, oxidative cleavage, and cytotoxic properties of new ternary copper(II) compounds containing 4-aminoantipyrine and N,N-heterocyclic co-ligands. *Journal of Molecular Structure*, 1178, 18–28. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.10.004.
- Fathi, Z., Doustkhah, E., Rostamnia, S., Darvishi, F., Ghodsi, A., & Ide, Y. (2018). Interaction of Yarrowia lipolytica lipase with dithiocarbamate modified magnetic carbon Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@C-NHCS<sub>2</sub>H core-shell nanoparticles. *International Journal of Biological Macromolecules*, 117, 218□224. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.05.156.
- Imran, M., Zia-ur-Rehman, Kondratyuk, T., & Bélanger-Gariepy F. (2019). New ternary platinum(II) dithiocarbamates: Synthesis, characterization, anticancer, DNA binding and DNA denaturing studies. *Inorganic Chemistry Communications*, 103, 12–20. DOI: 10.1016/j.inoche.2019.02.007.
- Jerry, O. A., & Damian, C. O. (2018). Organotin(IV)

  Dithiocarbamate Complexes: Chemistry and

Manders & Zuckerman, 1985; Lockhart & Manders, 1987). The <sup>119</sup>Sn NMR experiment in DMSO-<sub>d6</sub> for complex **3a** displayed the coupling constants

 ${}^{1}J({}^{119}\text{Sn}{-}^{13}\text{C}) = 396 \text{ Hz}, {}^{2}J({}^{119}\text{Sn}{-}^{1}\text{H}) = 50 \text{ Hz}, \text{ and}$  the deduced  $\theta = 107.6^{\circ}$  confirming the tetracoordination geometry in solution (**Figure 4**).

$$\theta = 0.0161 |^{2}J|^{2}-1.32 |^{2}J| + 133.4$$
 eq (1)  
 $|^{1}J| = 11.4 \theta - 875$  eq (2)

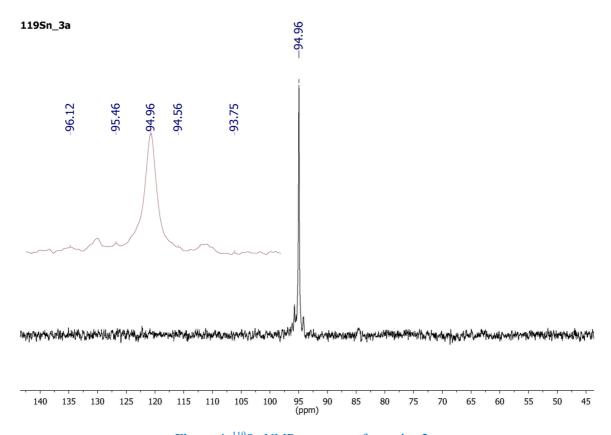


Figure 4. <sup>119</sup>Sn NMR spectrum of complex 3a.

#### 4. Conclusion

Three new monomeric dithiocarbamate diorganotin complexes derived from  $Me_2SnCl_2$ ,  $n-Bu_2SnCl_2$ , and  $Ph_2SnCl_2$  have been successfully prepared and characterized utilizing various analytical techniques. Chemical shifts  $\Box$ ( $^{119}Sn$ ) and their coupling constants  $^1J(^{119}Sn-^{13}C)$  and  $^2J(^{119}Sn-^{14}H)$  analyses permit us to define the shape of

coordination polyhedra which varied between four and five, as some influential factors contributed to this result, including the electron resonances of the ligand and of tin derivatives, as well as the tautomeric and conformational equilibria resulting from the exchange process. The study of the pharmaceutical and industrial interest of the prepared complexes will be the subject of further research work.

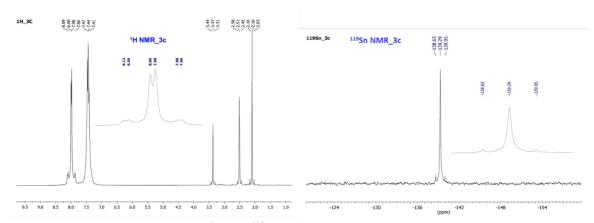


Figure 3. <sup>1</sup>H and <sup>119</sup>Sn NMR spectra of complex 3c.

On the other hand, n-butyl groups of complex 3b in CDCl<sub>3</sub> exhibited signals belonging to the methyl and three methylene protons (SnCH<sub>2 $\square$ </sub>CH<sub>2 $\square$ </sub>CH<sub>2 $\square$ </sub>CH<sub>3</sub>) in the region of 1.73–0.86 ppm. Indeed, a triplet at  $\square = 0.89$  ppm with  ${}^3J({}^1H^{-1}H)$  equals to 9 Hz due to the methyl group of the n-butyl moiety was observed. The CH<sub>2 $\gamma$ </sub> resonance appeared as a multiplet at  $\square = 1.37$  ppm, while the protons of SnCH<sub>2 $\square$ </sub>CH<sub>2 $\square$ </sub> group of the n-butyl fragment showed broad multiplet at about 1.61–1.73 ppm (Momeni et al., 2012).

In the <sup>13</sup>C NMR spectra, which are generally consistent with the conclusions drawn from <sup>1</sup>H NMR results, the thiourea function resonated at 193.2, 194.1, and 193.1 ppm for complexes **3a-c**, respectively, different from that the starting ligand which revealed signal at 218.4 ppm. Thus, the aminoantipyrine group signals were observed at about 162, 150, 133-109, 35.5, and 11.5 ppm for C=O, CH<sub>3</sub>– $\underline{C}$ =C, C<sub>arom</sub>, CH<sub>3</sub>–N, and CH<sub>3</sub>–C= groups, respectively (Anupama, Sunita, Shiva Leela, Ushaiah & Kumari Gyana, 2014). The C<sub>□</sub>,  $C_{\square}$ ,  $C_{\gamma}$  and  $C_{\square}$  chemical shifts devoted to the *n*butyl and phenyl groups in complexes 3b and 3c were identified as expected (de Morais, de Lima, Pinheiro, San Gil, Takahashi, Menezes & Ardisson, 2015).

Knowledge of the liquid state chemical shifts ( $\delta$ ) of <sup>119</sup>Sn NMR provides valuable information about the geometry of coordination polyhedra of the tin centre in the organotin(IV) complexes (Sirajuddin, Ali, Mckee, Zaibd & Iqbal, 2014). Thus, an expansion in tin coordination number from four to five relates to an expansion in tin shielding by 150-200 ppm

(Pettinari, 2017). Indeed, a general trend of up-field shift of  $\delta$ (119Sn) with inreasing coordination number of the tin atom can be observed. Furthermore, an exclusive suggested type of coordination penta isomers is conferred to complex 3b and 3c in solution (-164 and -139 ppm respectively). While, complex 3a was completely tetracoordinated in solution (95 ppm). This could be explained by the effect of the steric hindrance of the butyl, phenyl and ligand groups on their mobility and by the effect on the possibility of the interaction between the sulfur of the thionyl group (C=S) and the atom of the tin, on the other hand and in the case of complex 3a (derived from Sn(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) the speeds of the and conformational equilibriums, tautomoric mentioned before, could limit this type of interaction and therefore favor exclusively a tertacoordination. The obtained <sup>119</sup>Sn chemical shift values for the synthesized complexes are at lower frequencies compared with the diorganotin precursors Me<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> (141 ppm), n-Bu<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> (122 ppm), and Ph<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> (-32 ppm) (Smith & Tupčiauskas, 1978).

Additionally, it has been reported that NMR coupling constants  ${}^2J({}^{119}\mathrm{Sn}{}^{-1}\mathrm{H})$  and  ${}^1J({}^{119}\mathrm{Sn}{}^{-13}\mathrm{C})$  were informative parameters that allowed an interpretation about the coordination number and the C–Sn–C angle of the organotin moity. Furthermore, empirical equations explicit the mathematical relationship between the  ${}^1J$ ,  ${}^2J$ , and  $\theta$  corresponding to methyl–Sn containing complexes (eq. (1) and eq. (2)) (Lockhart & Manders, 1986; Rodríguez-Uribe, Claudio-Catalán, Medrano, Luis, Tlahuext & Godoy-Alcántar, 2020; Lockhart,

Moreover, complex **3a** in DMSO-*d*<sub>6</sub> revealed two broad bands at 8.96 and 8.73 ppm assigned to N–H proton of dithiocarbamate function which is elucidated by the dynamic exchange arising between the two rotational *s-cis* and *s-trans* conformers at room temperature (**Scheme 4**) (Chniti

Sanhoury, Merlet & Chehidi, 2014), whereas the two signals broadening were missing in the case of complexes **3b** and **3c**, presumably due to strong Vander Walls repulsion between R' and R groups which prohibit the confirmational equilibrium (**Scheme 4**).

Scheme 4. Conformational equilibrium for complex 3a.

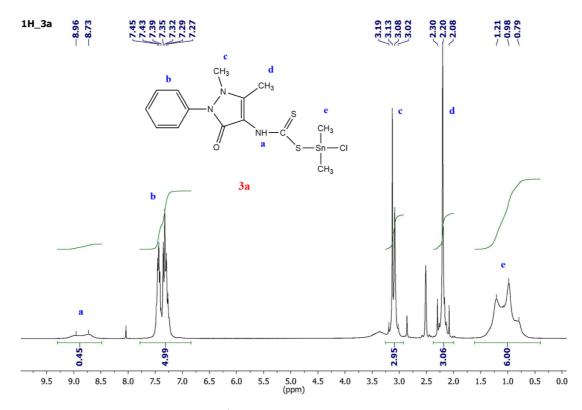


Figure 2. <sup>1</sup>H NMR spectrum of complex 3a.

In all complexes **3a-c**, the aromatic protons of aminoantipyrine group exhibited a multiplet at 7.48–7.27 ppm. For example, complex **3c** displayed two additional signals at 8.00 and 7.98 ppm

surrounded by tin satellites owing to spin-spin coupling of tin atoms with aromatic protons of SnPh<sub>2</sub> group with  ${}^{3}J({}^{119}\text{Sn}{}^{-1}\text{H}) = 72 \text{ Hz in DMSO-} d_6$  (**Figure 3**) (Sedaghat & Shafahi, 2009).

of the C-S bond at about 1054 and 1023 cm<sup>-1</sup>, suggesting a monodentate chelation mode.

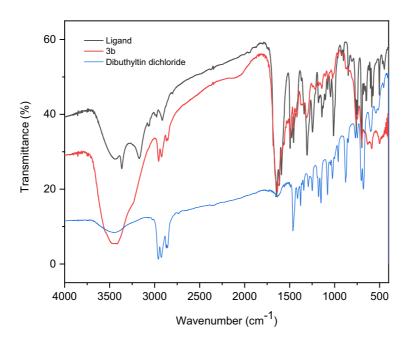


Figure 1. Infrared spectra of ligand 1, n-Bu<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> 2b and the corresponding complex 3b.

The multinuclear NMR spectra of complexes **3a-c** were registred in DMSO- $d_6$  and CDCl<sub>3</sub> at 298K. The influences of the various alkyl and aryl groups on the aminoantipyrine dithiocarbamate moiety were clearly seen in the NMR chemical shifts. The <sup>1</sup>H NMR spectrum of complex **3a** (representative spectrum **Figure 2**) showed broad signals at 0.98 ppm with  ${}^2J({}^{119}\text{Sn}{}^{-1}\text{H}) = 50 \text{ Hz}$ , different from that the starting complex Me<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> which showed  ${}^2J({}^{119}\text{Sn}{}^{-1}\text{H}) = 68 \text{ Hz}$  in CDCl<sub>3</sub> (Momeni, Kia &

Ghanbarzadeh, 2012). The latter signals could be assigned to protons of SnCH<sub>3</sub> moiety. Thus, the remarkable broadening of signals could be due to conformational and/or tautomirization structures (**Scheme 3**) (Jerry & Damian, 2018). It is important to note that the <sup>1</sup>H NMR study of peak determination at low temperature was not successful because of the precipitation of the complex in the NMR tube as soon as we approached 0°C.

$$R' \longrightarrow N \longrightarrow C$$

$$S \longrightarrow R$$

Scheme 3. Tautomeric equilibriums for complex 3a.

127.3, 129.2, 134.8, and 135.2 ( $C_{arom}$ ), 152.0 ( $CH_{3}$ – $\underline{C}$ =C), 160.4 (C=O), 192.7 (C=S); <sup>119</sup>Sn NMR (DMSO- $d_6$ , 298K):  $\Box$  = -139.3. Anal. Calculated for  $C_{24}H_{22}ClN_3OS_2Sn$ : C, 49.13; H, 3.78; N, 7.16. Found: C, 49.02; C, 49.13; C, 7.01.

#### 3. Results and Discussion

#### 3.1 Synthesis

The ligand sodium dithiocarbamate (L) was prepared *in situ* according to previously reported procedures (Singh et al., 1983; Singh et al., 1982).

The reaction of ligand 1 with dialkyl(diaryl)tin dichlorides 2a-c (dimethyl, di-n-butyl, and diphenyl) in methanolic solution and in 1:1 molar ratio respectively afforded the corresponding products 3a-c (Scheme 1). The reactions were completed within 5 min under stirring at room temperature. The resulting products were isolated good yields. They are pale yellow to white air stable powders. 3b was soluble in CHCl<sub>3</sub>, and CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, while 3a and 3c were sparingly soluble in DMSO.

Scheme 1: Synthesis pathway of organotin (IV) dithiocarbamate 3a-c.

Dithiocarbamates can behave either as monodentate (Altaf, Monim-ul-Mehboob, Kawde, Corona, Larcher, Ogasawara, Casagrande, Celegato, Borghese, Siddik, Aldinucci & Isab, 2017) or bidentate ligands (Adokoh, 2020). The denticity mode of such derivatives can be identified on the basis of their solid-state IR and liquid state <sup>119</sup>Sn NMR analyses (Andrew & Ajibade, 2018).

#### 3.2 Spectroscopic studies

The IR spectra of dithiocarbamates complexes exhibited three principal areas of particular interest. The stretching bands in the region 1496–1457 cm<sup>-1</sup> were attributed to  $\Box$ (N–C) (Onwudiwe & Ajibade, 2010). The second region which determined the bending mode (Bonati & Ugo, 1967), is located in

the range 1050–950 cm<sup>-1</sup> and assigned to  $\Box$ (C–S). The third region from 566–557 and 450–417 cm<sup>-1</sup> was due to  $\Box$ (Sn–C) and  $\Box$ (Sn–S), respectively (Awang, Kamaludin, Baba, Chan, Rajaajab & Hamid, 2016). Indeed, the solid-state IR spectra of complexes **3a-c** are practically comparative to that of the parent ligand expected for the presence of stretching bands of  $\Box$ (Sn–S) and  $\Box$ (C–H), the latter appeared clearly at 2958–2849 cm<sup>-1</sup> in the case of *n*-butyl groups in complex **3b** (**Figure 1**). Furthermore, the appearance of only one stretching band of the C–S bond at about 1022 cm<sup>-1</sup> and 1012 cm<sup>-1</sup> corresponding to complexes **3b** and **3c** respectively, indicated a bidentate mode of bonding, whereas complex **3a** showed two stretching bands

#### 2.2 Synthesis of ligand and complexes 2.2.1 Synthesis of organotin complex Me<sub>2</sub>SnClL (3a)

The ligand 4-aminophenazone dithiocarbamic acid (LH) was generated in situ by treating stoichiometric amount of 4-aminoantipyrine, dissolved in minimum quantity of ethanol with purified carbon disulphide. The 4-aminophenazone dithiocarbamic acid produced is unstable and could not be isolated. However, the sodium salt was prepared by treating the above mixture with 8N sodium hydroxide. On stirring the mixture mechanically for two hours at 5°C, a white crystalline product separated out which was recrystallized from acetone and dried in vacuum over P<sub>4</sub>O<sub>10</sub> at room temperature (Singh et al., 1983; Singh, Maheshwari, Srivastava & Rani, 1982). Then, a stoichiometric amount of 10 mL methanolic solution of Me<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub> (5 mmol, 1.09 g) were added, with constant stirring, to 10 mL methanolic solution of dithiocarbamate sodium salt (5 mmol, 1.59 g) which was prepared in situ according to reported methods (Singh et al., 1983). The reaction mixture was stirred for approximately 2 min, and white powder was instantaneously precipitated. On completion of the reaction, it was filtered and the filtrate was concentrated under reduced pressure and dried in vacuo. The obtained white solid was recrystallized from suitable solvent. A white powder was slowly formed at room temperature. Yield: 1.92 g, 83%; mp: 244°C. IR (KBr) ( $\square_{max}$  cm<sup>-</sup> 1):  $v_{N-H}$  3442 (m);  $v_{C-Q}$  1644 (s);  $v_{C-N}$  1489 (m);  $v_{C-Q}$ s 1054(w) and 1023 (w);  $v_{(Sn-C)}$  586 (w);  $v_{(Sn-C)}$  430 (w). <sup>1</sup>H NMR (DMSO- $d_6$ , 298K):  $\Box = 0.98$  (2t, 6H,  $2 \times \{SnCH_3\}, {}^2J({}^{119}Sn{}^{-1}H) = 50 \text{ Hz}), 2.20 \text{ (s, 3H, }$ CH<sub>3</sub>-C=), 3.13 (s, 3H, CH<sub>3</sub>-N), 7.27-7.45 (m, 5H, H<sub>arom</sub>), 8.73 and 8.96 (2br, 1H, N-H), <sup>13</sup>C NMR (DMSO- $d_6$ , 298K):  $\square = 6.6$  (CH<sub>3</sub>–Sn), 11.4 (CH<sub>3</sub>– C=), 36.3 (CH<sub>3</sub>-N), 111.5, 123.8, 126.6, 129.3, and 135.2 ( $C_{arom}$ ), 154.8 ( $CH_3-\underline{C}=C$ ), 163.5 (C=O), and 193.2 (C=S); <sup>119</sup>Sn NMR (DMSO- $d_6$ , 298K): □ =

94.96. Anal. Calculated for C<sub>14</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>Sn: C, 36.35; H, 3.92; N, 9.08. Found: C, 36.17; H, 3.88; N, 8.98.

## 2.2.2 Synthesis of organotin complex *n*-Bu<sub>2</sub>SnClL (3b)

The procedure was similar to the synthesis of complex 3a. The obtained yellow solid was recrystallized from MeOH and a white powder was slowly formed at room temperature. Yield: 2.11 g, 77%; mp: 198°C. IR (KBr) ( $\square_{\text{max}}$  cm<sup>-1</sup>):  $v_{N-H}$  3444 (m);  $v_{C=0}$  1649 (s);  $v_{C-N}$  1491 (m);  $v_{C-S}$  1022(w);  $v_{(Sn-C)}$  587 (w);  $v_{(Sn-C)}$  419 (w). <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 298K):  $\Box = 0.89$  (2t, 6H, 2 x {CH<sub>3</sub>},  ${}^{3}J({}^{1}H-{}^{1}H) = 9$ Hz), 1.37 (m, 4H, 2 x { $CH_{2\gamma}$ }), 1.61–1.73 (m, 8H, 2  $x \{SnCH_{2} CH_{2} \}), 2.24 (s, 3H, CH_{3} - C =), 3.18 (s, 2.24 (s, 3H, CH_{3} - C =)), 3.18 (s, 3H, CH_{3} -$ 3H, CH<sub>3</sub>-N), 7.28–7.48 (m, 5H, H<sub>arom</sub>), 8.61 (br, N– H),  ${}^{13}$ C NMR (CDCl<sub>3</sub>, 298K):  $\Box$  = 11.5 (C $_{\Box}$ H<sub>2</sub>–Sn), 13.3 (CH<sub>3</sub>–C=), , 25.1 (C $_{\square}$ H<sub>2</sub>-C $_{\square}$ H<sub>2</sub>–Sn), 26.8  $(\underline{C}_{\gamma}H_2-\underline{C}_{\square}H_2-\underline{C}_{\square}H_2-\underline{S}n),$ 29.5  $(\underline{C}H_3-C_{\gamma}H_2 C_{\square}H_2-C_{\square}H_2-S_n$ , 34.5 (CH<sub>3</sub>-N), 109.0, 127.0, 129.7, 130.3, and 132.5 (C<sub>arom</sub>), 148.9 (CH<sub>3</sub>-C=C), 158.8 (C=O), and 194.1 (C=S); <sup>119</sup>Sn NMR (CDCl<sub>3</sub>, 298K):  $\Box$  = -164.84. Anal. Calculated for C<sub>20</sub>H<sub>30</sub>ClN<sub>3</sub>OS<sub>2</sub>Sn: C, 43.93; H, 5.53; N, 7.69. Found: C, 43.86; H, 5.51; N, 7.66.

## 2.2.3 Synthesis of organotin complex Ph<sub>2</sub>SnClL (3c)

Complex **3c** was prepared by a similar method as complex **3a**. The recovered white solid was recrystallized from MeOH. Yield: 2.04 g, 69%; mp: 169 °C. IR (KBr) ( $\square_{\text{max}}$  cm<sup>-1</sup>):  $v_{N-H}$  3415 (m);  $v_{C=O}$  1636 (s);  $v_{C-N}$  1482 (m) ;  $v_{C-S}$  1012 (m);  $v_{(Sn-C)}$  578 (w);  $v_{(Sn-C)}$  441 (w). <sup>1</sup>H NMR (DMSO- $d_6$ , 298K):  $\square$  = 2.51 (s, 3H, CH<sub>3</sub>-C=), 3.37 (s, 3H, CH<sub>3</sub>-N), 7.41–7.47 (m, 5H<sub>Ligand</sub> + 6H<sub>3,4,5</sub> SnPh<sub>2</sub>), 7.86–8.12 (dd,  ${}^3J_{\text{HH}}$  = 6 Hz, 4H, H<sub>2,6</sub> SnPh<sub>2</sub>,  ${}^3J_{\text{(}}^{\text{(}19}\text{Sn-}^{\text{)}}\text{H})}$  = 72 Hz,  ${}^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ , 298K):  $\square$  = 11.4 (CH<sub>3</sub>-C=), 35.5 (CH<sub>3</sub>-N), 110.3, 124.0, 124.9, 125.1, 126.7,

#### 1. Introduction

Dithiocarbamates (DTCs) have been generally considered due to their structural varieties and unique chemical and physical properties including stereochemistry, thermal stability, as well as their antioxidative, and magnetic properties (Srinivasan, 2019; Fathi, Doustkhah, Rostamnia Darvishi, Ghodsi & Ide, 2018). The variety of their molecular structures and various purposes in materials science, electrochemistry, catalysis, optics, detecting, climate and medication has made the investigation of DTCs fascinating (Kim, Lee & Han, 2019; Behjati, Baghdadi & Karbassi, 2018).

The advancement of DTCs metal complex chemistry has always been firmly credited to their outstanding coordination potential to transition elements (Ayyavoo & Ramalingam, 2017), which produces very stable complexes with many metals in a bidentate fashion (Liu, Duan, Wei, Cui & Wang, 2019; Onwudiwe & Hosten, 2018) and offers to these compounds a wide range of properties and applications such as anticancer, (Andrew & Ajibade, 2018; Imran, Zia-ur-Rehman, Kondratyuk & Bélanger-Gariepy, 2019) antimicrobial, (Bobinihi, Onwudiwe, Ekennia, Okpareke, Arderne & Lane, 2019) and as antioxidant agents (Khan, Ziaur-Rehman, Butler & Bélanger-Gariepy, 2019; Oladipo, Omondi & Mocktar, 2019). On the other hand, tin dialkyl (or diaryl) dichlorides are relatively strong Lewis acids forming highly coordinated species with a variety of neutral or ionic ligands (Shi, Jiang, Duan & Wang, 2014; Shabbir, Ali, Shahzadi, Tahir & Shahid, 2016) (especially with those containing heteroatoms such as N, O and/or S). The structure of such ligands usually affects the geometry of their corresponding complexes, which are formed in mono, di or trinuclear coordination modes, adopting a distorted trigonal bipyramid or octahedral coordination geometry (Tarahhomi & Van Der Lee, 2018; Liu, Yan, Chang, Niu & Hong, 2017; Tan, Zhang, Liu, Yu, Zhu, Kuang & Jiang, 2017). In this context, we have recently detailed studies on tin(IV) complexes enclosing a diversity of ionic ligands as Lewis bases (Akremi, Noubigh & Abualreish, 2018; Akremi & Noubigh, 2019). Although many studies have highlighted complexes derived from organometal aminoantipyrine because of their rich diversity of structures and significant biological activities (de Souza, Machado, de Carvalho, Binatti, Krambrock, Molphy, Kellett, Pereira-Maia & Silva-Caldeira, 2019; Joseph, Nagashri & Ayisha Bibin Rani, **DTCs** complexes 2013), involving aminoantipiryne (named also 4-aminophenazone dithiocarbamates) are rarely studied (Singh, Maheshwari & Tomer, 1983). Herein we report on the synthesis, characterization, and coordination order investigation of our tin(IV) adducts (R<sub>2</sub>SnClL) using the liquid state <sup>119</sup>Sn NMR analyses.

#### 2. Experimental

#### 2.1 Materials and physical measurements

All the reagents, *n*-Bu<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub>, Me<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub>, Ph<sub>2</sub>SnCl<sub>2</sub>, 4-aminoantipyrine and CS<sub>2</sub> were purchased from Sigma-Aldrich and used as received. The melting points were determined using crimped sealed pans by a differential scanning calorimetric instrument (DSC 131 evo-Setaram, France). Elemental (H, C, N) analyses of the complexes were performed on an Exeter Analytical CE-440 Elemental instrument (Exeter Analytical, UK). Infrared spectra of the solid compounds were recorded on a Nicolet iS5 Infrared Spectrometer in KBr (Thermo Scientific, USA) over the range 4000-500 cm<sup>-1</sup> in KBr discs. <sup>1</sup>H (300.13 MHz), <sup>13</sup>C (75.47 MHz) and <sup>119</sup>Sn (111.9 Hz) spectra were recorded using a Bruker Avance 300 spectrometer (Bruker, France). TMS was utilized as the internal standard for <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C and SnCl<sub>4</sub> was used for <sup>119</sup>Sn.

مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) (ربيع الثاني 1444هـ/ نوفمبر 2022م) المجلد (7)، العدد (2)



المملكة العربية السعودية جامعة الحدود الشمالية (NBU) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) طباعة ردمد: 7012-1658 الكتروني – ردمد: 7014-1658

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa للمحلل الشمال المحلل المحلم المحلل المحلم المحلل ا

## توليف مركبات جديدة من معقدات رباعي القصدير وتحليلها باستعمال ثنائى كبريت الكربمات

على العكرمي

(قدم للنشر في 1444/3/19هـ؛ وقبل للنشر في 1444/4/27هـ)

ملخص البحث: في هذه الدراسة ، تم توليف مركبات جديدة من معقدات ثنائي كبريتات القصدير رباعية وخماسية التنسيق حيث أستعمل كلوريد ثنائي الميثيل والبيوتيل والفينيل كمشتقات لمركبات القصدير كما أستعمل مركب صوديوم كبريتات الامينوأنتبيرين كمعقد. بعد ذلك وقع تحليل النواتج باستعمال مطياف تحت الحمراء والرنين المغناطيسي النووي لنواة الهيدروجين، الكربون والقصدير. تمت دراسة نظام التنسيق للمعقدات المنتجة في محاليل التحليل أثناء مطيافية نواة القصدير حيث تمكنا من إقتراح تنسيق رباعي لمشتقات ثنائي الميثيل وتنسيق خماسي لكل من مشتقات ثنائي البيوتيل والفينيل.

كلمات مفتاحية: ثنائي كبريتات القصدير، التنسيق، مطياف الرنين المغناطيسي.

. JNBAS © 1658-7022 فشر بواسطة جامعة الحدود الشمالية جميع الحقوق محفوظة.

للمراسلة: قسم الكيمي

قسم الكيمياء ، كلية العلوم ، جامعة الحدود الشمالية، عرعر 91431 ، المملكة العربية السعودية (العنوان الحالي)

قسم الكيمياء ، المعهد العالي لعلوم وتكنولوجيا البيئة، جامعة قرطاج، برج السدرية ، تونس (عنوان دائم)

inbas.nbu.edu.sa DOI:10.12816/0061188

e-mail: ali.akrmi@nbu.edu.sa

Journal of the North for Basic and Applied Sciences, Vol. (7), Issue (2), (November 2022/ Rabi' II 1444 H) 91-102



### KINGDOM OF SAUDI ARABIA Northern Border University (NBU)

Journal of the North for Basic & Applied Sciences (JNBAS)

p - ISSN : 1658 -7022 / e-ISSN: 1658 - 7014

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa



# Synthesis, characterization and experimental study of three new bridged Tin(IV) coordination complexes with dithiocarbamates

Akremi, Ali

(Received 15/10/2022; accepted 21/11/2022)

**Abstract:** Sodium (1,5-dimethyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydro-1H-pyrazol-4-yl)carbamodithioate (L) react with dimethyltin dichloride R2SnCl2 (R = methyl (2a), R = n-Bu (2b) and R = Ph (2c)) to produce the new tin adducts R2SnClL (3a-c) in good yields. Structures of these complexes were established by IR, 1H, 13C and 119Sn NMR spectroscopic, and elemental analyses data. The 119Sn NMR analyses in solution revealed an absolute tetracoordinate for Me2SnCl2 derivative, whereas, in the case of n-Bu2SnCl2 and Ph2SnCl2 derivatives, five coordination species were exclusively observed.

**Keywords:** Tetra- and pent-coordinate; carbamodithioate; liquid state 119Sn NMR.

formula.

 $1658-7022 \\ \odot \ JNBAS.\ (1444\ H/2022).\ Published\ by\ Northern\ Border\ University\ (NBU).\ All\ Rights\ Reserved.$ 



DOI: 10.12816/0061188

#### \* Corresponding Author:

Department of Chemistry, Faculty of Science, Northern Border University, Arar 91431, Kingdom of Saudi Arabia (current address)

Department of Chemistry, High Institute of Environmental Sciences and Technologies, Carthage University, Borj Cedria, Tunisia (permanent address)

 $\textbf{E-mail:} \ ali.akrmi@nbu.edu.sa\ ,\ orcid\ id:\ 0000-0003-3837-1096,\ Tel:+966532458823.$ 

#### 6. Conclusion

The FVM has been developed for solving the SFCE, the numerical solution has been represented in an implicit scheme, and the von Neumann stability analysis and consistency have been discussed. The Numerical results have been found using Mathematica software 11.0 and found that this method has close to the exact solution, see table.2 and table 4 depict that the FVM is more accurate to the exact solution in two different experiments. In the future, we can extend this method to solve SFCE with time-fractional order.

#### **References:**

- Arqub, O. A., Edwan, R., Al-Smadi, M., & Momani, S. (2020).
  Solving space-fractional Cauchy problem by modified finite-difference discretization scheme. *Alexandria Engineering Journal*, 59 (4) 2409-2017.
- Edwan, R., Saadeh, R., Hadid, S., Al-Smadi, M., & Momani, S. (2020). Solving Time-Space-Fractional Cauchy Problem with Constant Coefficients by Finite-Difference Method. In Computational Mathematics and Applications (pp. 25–

- 46). Springer.
- Fu, H., Liu, H., & Wang, H. (2019). A finite volume method for two-dimensional Riemann-Liouville space-fractional diffusion equation and its efficient implementation. Journal of Computational Physics, 388, 316–334.
- Fu, H., Sun, Y., Wang, H., & Zheng, X. (2019). Stability and convergence of a Crank–Nicolson finite volume method for space fractional diffusion equations. Applied Numerical Mathematics, 139, 38–51.
- Hejazi, H., Moroney, T., & Liu, F. (2014). Stability and convergence of a finite volume method for the space fractional advection-dispersion equation. Journal of Computational and Applied Mathematics, 255, 684–697.
- Li, C. (2018). Hölder regularity for abstract fractional Cauchy problems with order in (0, 1). Journal of Applied Mathematics and Physics, 6 (01), 310-319.
- Liu, R., Li, M., & Piskarev, S. (2015). Approximation of semilinear fractional Cauchy problem. Computational Methods in Applied Mathematics, 15(2), 203–212.
- Podlubny, I. (1998). Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications. Elsevier.
- Zhao, J., Fang, Z., Li, H., & Liu, Y. (2020a). A Crank–Nicolson Finite Volume Element Method for Time Fractional Sobolev Equations on Triangular Grids. Mathematics, 8(9), 1591.
- Zhao, J., Fang, Z., Li, H., & Liu, Y. (2020b). Finite volume element method with the WSGD formula for nonlinear fractional mobile/immobile transport equations. Advances in Difference Equations, 2020, (1), 1–20

Table 3. The numerical results of  $\psi(x,t)$  of Example 5.2 at t=0.5, with varying  $\alpha$ .

x	Exact	$\alpha = 0$	$\alpha = 0.05$	$\alpha = 0.15$
1.	-0.01570	-0.01539	-0.01233	-0.0080
	5.0 = 5.7	5.5257		
1.01563	0.03337	0.03370	0.03605	0.03974
1.03125	0.08237	0.08272	0.08470	0.08798
1.04688	0.13117	0.13154	0.13327	0.13623
1.0625	0.17966	0.18004	0.18157	0.18427
1.07813	0.22771	0.22811	0.22947	0.23193
1.09375	0.27521	0.27562	0.27684	0.27908
1.10938	0.32205	0.32248	0.32356	0.32560
1.125	0.36812	0.36856	0.36951	0.37136

Table 4. Exact, approximate, and absolute error results of  $\psi(x,t)$  of Example 5.2 at  $t=0.5, \alpha=0$ 

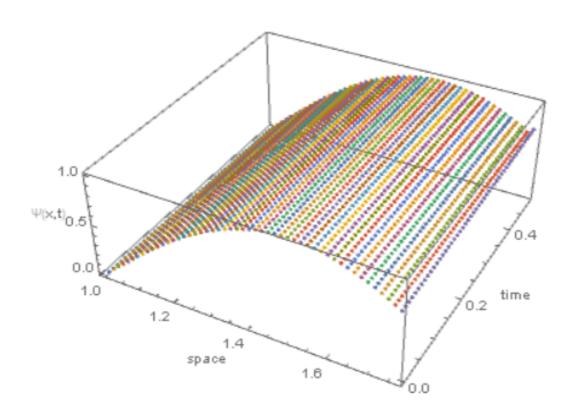
x	Exact	Approximate	Absolute error
1.	-0.0157073	-0.01539	$3.14407 \times 10^{-4}$
1.01563	0.0333732	0.03370	$3.32690 \times 10^{-4}$
1.03125	0.0823734	0.08272	$3.50172 \times 10^{-4}$
1.04688	0.131175	0.13154	$3.66811 \times 10^{-4}$
1.0625	0.179661	0.18004	$3.82565 \times 10^{-4}$
1.07813	0.227714	0.22811	$3.97398 \times 10^{-4}$
1.09375	0.275218	0.27562	$4.11274 \times 10^{-4}$
1.10938	0.322059	0.32248	$4.24159 \times 10^{-4}$
1.125	0.368125	0.36856	$4.36022 \times 10^{-4}$

#### **Example 5.2:** Consider the following SFCE

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} J_a^{\alpha} \psi(x,t) = 0, \epsilon = 1 \times 10^{-2}, t > 0, x \in [1,2], 0 \le \alpha < 1, \tag{13}$$

subject to the initial condition  $\psi(x,0) = \sin(\pi x)$ , at  $\alpha = 0$  the exact solution  $\psi(x,t) = \sin(\pi(x - \epsilon t))$ , the numerical results of FVM with varying  $\alpha$  such that  $\alpha \in \{0.15,0.05,0\}$  are given in Table3 at the time t = 0.5 and  $x \in [1,1.125]$  using  $\tau = 0.01$  and h = 0.015625. Table 4 shows

a numerical result of  $\psi(x,t)$  at t=0.5,  $\alpha=0, x \in [1,1.25]$ . The absolute error in Table 2 shows that the exact approximate solution of  $\psi(x,t)$  is very close to the approximate solutions of  $\psi(x,t)$  at  $\alpha=0$ . In figure 2 the surface plot of solution  $\psi(x,t)$  are given at  $\alpha=0.75, x \in [1,1.8]$ .



**Figure 2.** Surface plot of solution  $\psi(x, t)$  of Example 5.2 at  $\alpha = 0.25$ 

Table 1. The numerical results of  $\psi(x,t)$  of Example 5.1 at t=0.5, with varying  $\alpha$ .

x	Exact	$\alpha = 0$	$\alpha = 0.05$	$\alpha = 0.15$
1.	2.704724	2.704891	2.670914	2.641113
1.015625	2.747317	2.747487	2.730628	2.712593
1.03125	2.790581	2.790753	2.779730	2.766780
1.046875	2.834526	2.834701	2.826601	2.816505
1.0625	2.879164	2.879341	2.872990	2.864727
1.078125	2.924504	2.924684	2.919492	2.912511
1.09375	2.970558	2.970742	2.966372	2.960338
1.109375	3.017338	3.017524	3.013768	3.008462
1.125	3.064854	3.065043	3.061760	3.057033
1.140625	3.113118	3.113310	3.110404	3.106147
1.15625	3.162143	3.162338	3.159737	3.155870
1.171875	3.211939	3.212138	3.209789	3.206251
1.1875	3.262520	3.262721	3.260586	3.257328
1.203125	3.313897	3.314102	3.312147	3.309131
1.21875	3.366083	3.366291	3.364492	3.361687
1.234375	3.419091	3.419303	3.417638	3.415020
1.25	3.472934	3.473149	3.471603	3.469149

Table2. Exact, approximate, and absolute error results of  $\psi(x,t)$  of Example 5.1 at  $t=0.5, \alpha=0$ 

x	Exact	Approximate	Absolute error
1.	2.704724	2.704891	$1.670690 \times 10^{-4}$
1.015625	2.747317	2.747487	$1.696999 \times 10^{-4}$
1.03125	2.790581	2.790753	$1.723723 \times 10^{-4}$
1.046875	2.834526	2.834701	$1.750868 \times 10^{-4}$
1.0625	2.879164	2.879341	$1.778440 \times 10^{-4}$
1.078125	2.924504	2.924684	$1.806447 \times 10^{-4}$
1.09375	2.970558	2.970742	$1.834894 \times 10^{-4}$
1.109375	3.017338	3.017524	$1.863789 \times 10^{-4}$
1.125	3.064854	3.065043	$1.893140 \times 10^{-4}$
1.140625	3.113118	3.113310	$1.922952 \times 10^{-4}$
1.15625	3.162143	3.162338	$1.953234 \times 10^{-4}$
1.171875	3.211939	3.212138	$1.983993 \times 10^{-4}$
1.1875	3.262520	3.262721	$2.015237 \times 10^{-4}$
1.203125	3.313897	3.314102	$2.046972 \times 10^{-4}$
1.21875	3.366083	3.366291	$2.079207 \times 10^{-4}$
1.234375	3.419091	3.419303	$2.111950 \times 10^{-4}$
1.25	3.472934	3.473149	$2.145208 \times 10^{-4}$

$$-\mathcal{O}(\tau+h^2) - \epsilon h^{\alpha-1} \left[ \sum_{j=0}^{i} w_j^{\alpha} \psi(x_{i-j}, t_{n+1}) - \sum_{j=0}^{i+1} w_j^{\alpha} \psi(x_{i-j+1}, t_{n+1}) \right]$$

Use (7) and (8) we have  $e_i^n = \mathcal{O}(\tau + h^2)$ , and  $e_i^n \to 0$  as  $\tau \to 0$  and  $h \to 0$ .

#### 4.3. Convergence

The numerical scheme (10) is consistent and stable, so, by the fundamental theorem of numerical methods for differential equations, the given numerical scheme is convergent.

Two examples are introduced in this section to evince the accuracy of the proposed method, the calculations are performed by Mathematica Software 11.0.

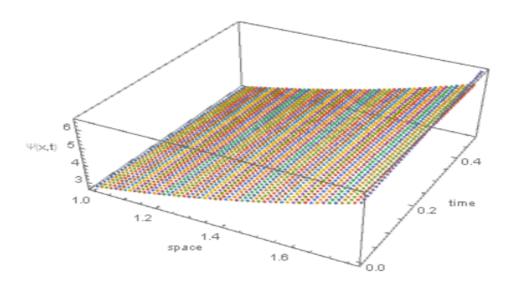
#### Example 5.1: Consider the following SFCE

#### 5. Numerical Experiments

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} J_a^{\alpha} \psi(x,t) = 0, \epsilon = 1 \times 10^{-2}, t > 0, x \in [1,2], 0 \le \alpha < 1, \quad (12)$$

subject to the initial condition  $\psi(x, 0) = Exp(x)$ , at  $\alpha = 0$  the exact solution  $\psi(x, t) = Exp(x - \epsilon t)$ , the numerical results of FVM with varying  $\alpha$  such that  $\alpha \in \{0.85, 0.95, 0\}$  are given in Table1 at the time t = 0.5 and  $x \in [1,1.125]$  using  $\tau = 0.01$  and h = 0.015625. Table 2 shows a numerical result of

 $\psi(x,t)$  at t=0.5,  $\alpha=0,x\in[1,1.25]$ . The absolute error in Table 2 shows that the exact approximate solution of  $\psi(x,t)$  is very close to the approximate solutions of  $\psi(x,t)$  at  $\alpha=0$ . In figure 1 the surface plot of solution  $\psi(x,t)$  are given at  $\alpha=0.75,x\in[1,1.8]$ .



**Figure 1.** Surface plot of solution  $\psi(x, t)$  of Example 5.1 at  $\alpha = 0.25$ 

$$k_{ij} = \begin{cases} \epsilon h^{\alpha} \left[ w_{i-j}^{\alpha} - w_{i-j+1}^{\alpha} \right], & j < i-2 \\ \epsilon h^{\alpha} \left[ w_{2}^{\alpha} - w_{3}^{\alpha} \right], & j = i-2 \\ \epsilon h^{\alpha} \left[ w_{1}^{\alpha} - w_{2}^{\alpha} \right], & j = i-1 \\ \epsilon h^{\alpha} \left[ w_{0}^{\alpha} - w_{1}^{\alpha} \right], & j = i \\ \epsilon h^{\alpha} \left[ -w_{0}^{\alpha} \right], & j = i+1 \\ 0, & j > i+1. \end{cases}$$

#### 4. Numerical Analysis

#### 4.1. Stability Analysis

**Theorem 2.** The numerical scheme  $\frac{\psi_i^{n+1}-\psi_i^n}{\tau}=\frac{1}{h}\sum_{j=0}^N k_{ij}\psi_j^{n+1}$ , i=0,1,...,N is conditionally stable.

**Proof:** Substitute  $\psi_i^n = \hat{\psi}^n \exp(iI\xi)$ , into the scheme

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\tau} = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{N} k_{ij} \psi_j^{n+1}, i = 0, 1, 2, \dots, N.$$

We have

$$\hat{\psi}^{n+1} \exp(iI\xi) - \psi^n \exp(iI\xi) = r \sum_{j=0}^{N} k_{ij} \hat{\psi}^{n+1} \exp(jI\xi), r = \frac{\tau}{h}$$

$$\hat{\psi}^{n+1} = \rho(\xi) \hat{\psi}^n,$$

 $\rho(\xi)$  satisfies the von Neumann condition if  $\left|\sum_{j=0}^{N} k_{ij} exp\left((j-i)I\xi\right)\right| \ge \frac{2}{r}$ , for  $\forall i$  which means that the given scheme is conditionally stable.

#### 4.2. Consistency

**Proof:** Insert  $\psi(x,t)$  into expression (10) we get

**Theorem 3.** The numerical scheme (10) is consistent, with first-order accuracy in time and second-order accuracy in space.

$$\frac{\psi(x_i,t_{n+1})-\psi(x_i,t_n)}{\tau} = \epsilon h^{\alpha-1} \left[ \sum_{j=0}^i w_j^\alpha \psi(x_{i-j},t_{n+1}) - \sum_{j=0}^{i+1} w_j^\alpha \psi(x_{i-j+1},t_{n+1}) \right]$$

$$e_i^n = \frac{\psi(x_i,t_{n+1})-\psi(x_i,t_n)}{\tau} - \epsilon h^{\alpha-1} \left[ \sum_{j=0}^i w_j^\alpha \psi(x_{i-j},t_{n+1}) - \sum_{j=0}^{i+1} w_j^\alpha \psi(x_{i-j+1},t_{n+1}) \right],$$
the temporal backward difference combined with a control volume averages can be written as:

the temporal backward difference combined with a control volume averages can be written as:  $\frac{\psi(x_i,t_{n+1})-\psi(x_i,t_n)}{\tau} = \frac{d\bar{\psi}_i(t_{n+1})}{dt} - \mathcal{O}(\tau + h^2).$ 

We have

$$e_i^n = \frac{d\bar{\psi}_i(t_{n+1})}{dt} - \mathcal{O}(\tau + h^2) - \epsilon h^{\alpha - 1} \left[ \sum_{j=0}^i w_j^\alpha \psi(x_{i-j}, t_{n+1}) - \sum_{j=0}^{i+1} w_j^\alpha \psi(x_{i-j+1}, t_{n+1}) \right]$$

Using equation (6) we have

$$e_i^n = \frac{\overline{\epsilon}}{h} [J_a^{\alpha} \psi(x,t)|_{x=x_{i-\frac{1}{2}}} - J_a^{\alpha} \psi(x,t)|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}}]$$

**Theorem 1.** Let  $\alpha > 0$ , and  $\psi \in C[a, b]$ . Then,

$$J_{a}^{\alpha}\psi(x) = \lim_{h \to 0} h^{\alpha} \sum_{k=0}^{\left[\frac{x-a}{h}\right]} w_{k}^{\alpha}\psi(x-kh), \ h = \frac{x-a}{N}, \ a < x \le b, \ where \quad w_{0}^{\alpha} = 1, \ w_{1}^{\alpha} = \alpha \ \ and \ w_{k}^{\alpha} = \left(1 - \frac{(1-\alpha)}{k}\right) w_{k-1}^{\alpha}, \ k = 2,3, \dots$$

Proof of Theorem 1. see (Arqub et al., 2020).

#### 3. Finite Volume Method

A new formulation of FVM is proposed for solving the SFCE in the following form:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} J_a^{\alpha} \psi(x,t) = 0 \quad t > 0 , 0 \le \alpha < 1, \tag{3}$$

subject to the initial condition

$$\psi(x,0) = f(x), a \le x \le b,\tag{4}$$

where  $\epsilon$  is a positive parameter, f(x) is given analytical function,  $\psi(x,t)$  is an unknown smooth function, and  $J_a^{\alpha}$  is the fractional integral with respect to x in Riemann-Liouville sense. First, discretize a finite domain I = [a, b] and that yields nodes  $x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{N}, i = 0,1,...,N$ , and define a time partition  $t_n = n\tau$ ,  $\tau$  is the time step, n = 0,1,... Integrating (3) over the  $i^{th}$  interval  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ :

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\epsilon J_a^{\alpha} \psi(x,t) \right] dx. \tag{5}$$

$$\frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} dx = \frac{\epsilon}{h} \left[ J_a^{\alpha} \psi(x_{i-\frac{1}{2}},t) - J_a^{\alpha} \psi(x_{i+\frac{1}{2}},t) \right], \tag{6}$$

using the standard Grünwald-Letnikov formula for approximate the Riemann-Liouville integral

 $J_a^{\alpha}\psi(x,t)$  at  $x=x_{i-\frac{1}{2}}$  and  $x=x_{i+\frac{1}{2}}$ , here we require the fractional shift  $p = \frac{1}{2}$  so, we have:

$$J_a^{\alpha}\psi(x,t)|_{x=x_{i-\frac{1}{2}}} = J_a^{\alpha}\psi\left(x_{i-\frac{1}{2}},t\right) = h^{\alpha}\sum_{j=0}^{i}w_j^{\alpha}\psi(x_{i-j},t) + o(1), \tag{7}$$

$$J_a^{\alpha}\psi(x,t)|_{x=x_{i+\frac{1}{2}}} = J_a^{\alpha}\psi\left(x_{i+\frac{1}{2}},t\right) = h^{\alpha}\sum_{j=0}^{i+1}w_j^{\alpha}\psi\left(x_{i-j+1},t\right) + o(1),\tag{8}$$

 $\psi(x,t)$  is a smooth function, hence, the  $\bar{\psi}_i(t) = \frac{1}{h} \int_{x_i - \frac{1}{2}}^{x_i + \frac{1}{2}} \psi(x,t) dx$  coincide with  $\frac{d\psi(x_i,t)}{dt}$  to  $\mathcal{O}(h^2)$ .

So, the equation (6) can be approximated by

So, the equation (6) can be approximated by 
$$\frac{d\psi(x_i,t)}{dt} = \epsilon h^{\alpha-1} \left[ \sum_{j=0}^{i} w_j^{\alpha} \psi(x_{i-j},t) - \sum_{j=0}^{i+1} w_j^{\alpha} \psi(x_{i-j+1},t) \right]$$
 (9) Now, using the standard backward difference to approximate the temporal derivative in (9) 
$$\frac{d\psi(x_i,t)}{dt} \Big|_{t=t_{n+1}} = \frac{\psi(x_i,t_{n+1}) - \psi(x_i,t_n)}{\tau} + \mathcal{O}(\tau),$$

$$\left. \frac{d\psi(x_i,t)}{dt} \right|_{t=t_{n+1}} = \frac{\psi(x_i,t_{n+1}) - \psi(x_i,t_n)}{\tau} + \mathcal{O}(\tau),$$

Letting  $\psi_i^n \approx \psi(x_i, t_n)$ , then we have

$$\frac{\psi_{i}^{n+1} - \psi_{i}^{n}}{\tau} = \epsilon h^{\alpha - 1} \left[ \sum_{j=0}^{i} w_{j}^{\alpha} \psi_{i-j}^{n+1} - \sum_{j=0}^{i+1} w_{j}^{\alpha} \psi_{i-j+1}^{n+1} \right]$$
Rewrite equation (10) as:

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\tau} = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{N} k_{ij} \psi_j^{n+1}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N,$$
 where  $k_{ij}$  given by (11)

#### 1. Introduction

In optics, the mathematician Augustin-Louis Cauchy has been introduced the relationship between the wavelength and refractive index of the light and modeled the empirical relationship by the Cauchy transmission equation in 1836.

Recently, Numerical solutions for Cauchy equations have continued to the attention of physicists and mathematicians, in addition, there is an extended number of papers that were devoted to solving the fractional Cauchy equation FCE that has been proposed by several scholars. Liu, Li, & Piskarev, (2015) solved the semilinear FCE on a Banach space, where the time-fractional derivative is in the Caputo–Dzhrbashyan sense. Li, (2018) investigated the Hölder regularity to the fractional Cauchy equation with the order in (0,1).

During this paper, the finite volume method was introduced to discuss the solution of the fractional Cauchy problem in the following form:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} J_a^{\alpha} \psi(x,t) = 0 \quad t > 0 , 0 \le \alpha < 1, \tag{1}$$

with initial condition

$$\psi(x,0) = f(x), \ a \le x \le b, \tag{2}$$

where  $\epsilon$  is a positive parameter, f(x) is a smooth function, and  $\alpha$  is the order of space fractional integral. Several scholars used the FVM for solving various types of differential equations, for example, Fu, Liu, & Wang, (2019) verified the feasibility of a finite volume scheme in one and two dimensions for solving a space fractional diffusion equation and achieved convergence and stability analysis for the scheme (Fu, Sun, Wang, & Zheng, 2019 and. Zhao, Fang, Li, & Liu, 2020a). proposed a Finite volume element FVE scheme to solve the time-fractional Sobolev equations on triangular grids, and they verified the achievability of this method. Also Zhao, 1. Fang, Li, & Liu, (2020b). introduced an FVE scheme for the fractional mobile/immobile transport equations by using the weighted and Shifted Grünwald difference WSGD formula in handling the Riemann-Liouville space fractional derivative, the error estimation and stability analysis of the scheme have been carried out. For more studies, see Arqub, Edwan, Al-Smadi, & Momani, (2020),

Hejazi, Moroney, & Liu, (2014), Edwan, Saadeh, Hadid, Al-Smadi, & Momani, (2020).

This paper is organized as follows. In the next section, some preliminary about fractional derivatives and integrals is proposed. Section 3 contains a new formulation of FVM for solving the IVPs (1) and (2). Section 4 is devoted to theoretical analysis and discusses the von Neumann stability analysis. Numerical examples are given in Section 5 to show the validity of the method. Finally, in Section 6 some conclusions are given.

#### . 2.Preliminaries

We introduce in this section some definitions and theorems related to the Riemann-Liouville fractional integral and the Grünwald-Letnikov formula.

**Definition 1.** (see (Podlubny, 1998)) The fractional integral of order  $\alpha > 0$  in Riemann-Liouville sense  $J_a^{\alpha}\psi(x)$  is defined as:

$$J_a^\alpha \psi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} \psi(t) dt \text{ , provided that } \psi \in L_1[a,b].$$
 where  $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty s^{\alpha-1} e^{-s} ds, \ \alpha > 0, \Gamma(\alpha+1) = \alpha \Gamma(\alpha), \Gamma(\alpha) \Gamma(1-\alpha) = \frac{\pi}{\sin \pi \alpha}.$  Where the function'  $\Gamma$ ' is the Euler function.

**Definition 2.** (see (Podlubny, 1998) ) Let  $\psi \in \mathcal{C}^{[\alpha]}[a,b]$ ,  $\alpha > 0$ . Then the fractional derivative of defined as:

$$\widetilde{\mathcal{D}}_{a}^{\alpha}\psi(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h^{\alpha}} \sum_{k=0}^{\left[\frac{x-a}{h}\right]} (-1)^{k} {\alpha \choose k} \psi(x-kh), \ a < x \le b, h = \frac{x-a}{N}.$$
N is the number of subdivisions of the interval.

#### مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) (ربيع الثاني 1444هـ/ نوفمبر 2022م) المجلد (7)، العدد (2)



المملكة العربية السعودية جامعة الحدود الشمالية (NBU) مجلة الشمال للعلوم الأساسية والتطبيقية (JNBAS) طباعة ردمد: 7022-1658/ إلكتروني – ردمد: 1058-7014

> www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa

Ulmanil alega Sales (Sales) alega (Sales) a

### تحليل استقرار فون نيومان لطريقة الحجم المنتهية لحل معادلة كوشي الكسرية ريم العدوان

(قدم للنشر في1444/2/18؛ وقبل للنشر في 1444/2/18هـ)

ملخص البحث: تم تطوير طريقة الحجم المنتهية لحل معادلة كوشي الكسرية من خلال استخدام صيغ جرانوود لتنكوف الكسرية. اثبتنا ان الطريقة مستقرة باستخدام نظرية فون نيومان وتم تقديم الامثلة العددية لتوضيح سلوك الحل لقيم مختلفة من المشتقات الكسرية ومدى تقارب وفعالية الطريقة المقترحة مع الحل الدقيق.

كلمات مفتاحية: طريقة الحجم المنتهية، معادلة كوشي، صيغ جراونوود ليتكوف.

. JNBAS ©1658-7022 فشر بواسطة جامعة الحدود الشمالية .جميع الحقوق محفوظة.

للمراسلة:

قسم الرياضيات، جامعة طيبة، المدينة المنورة، المملكة العربية السعودية.

inbass.nbu.edu.sa DOI:10.12816/0061185

e-mail: redwan@taibahu.edu.sa

Journal of the North for Basic and Applied Sciences, Vol. (7), Issue (2), (November 2022/ Rabi' II 1444 H) 81-90



#### KINGDOM OF SAUDI ARABIA Northern Border University (NBU)

Journal of the North for Basic & Applied Sciences (JNBAS)

p - ISSN : 1658 -7022 / e-ISSN: 1658 - 7014

www.nbu.edu.sa http://jnbas.nbu.edu.sa



## Von Neumann Stability Analysis of a Finite Volume Method for Solving a Space-Fractional Cauchy Equation

Reem Edwan

(Received 1/12/2021; accepted 14/9/2022)

**Abstract**: A new formulation of the Finite Volume Method (FVM) is introduced for solving the space-fractional Cauchy equation (SFCE), this method converts the SFCE to the implicit scheme by using the fractional Grünwald-Letnikov formula. The von Neumann stability analysis shows that the proposed method is conditionally stable. Our examples show the results for different values of fractional order and show the approximated solution is close to the exact solution that revealing the reliability and efficiency of the proposed method.

Keywords: Finite Volume Method; Cauchy equation; Grünwald-Letnikov formula.

 $1658\text{-}7022 \\ \odot \text{ JNBAS.} \ (1444 \text{ H}/2022). \ Published by \ Northern \ Border \ University} \ (NBU). \ All \ Rights \ Reserved.$ 



\* Corresponding Author:

Department of Mathematics, Taibah University, Al Madinah Al Munawara, Kingdom of Saudi Arabia.

e-mail: redwan@taibahu.edu.sa



Vol. 7, Issue 2

November 2022 - Rabi' II 1444

#### **CONTENTS**

#### Manuscripts in Arabic Language

•	A comparative morphological and anatomical studies of the fruits of three date palm cultivars (phoenix dactylifera L.) in valley and coast of Hadhramout Regions – Yemen  Mahrous Bahwerth, Yasser Bahramz & Jaafar BaOmar	70
•	Manuscripts in English Language	
	Von Neumann Stability Analysis of a Finite Volume Method for Solving a Space-Fractional Cauchy Equation  *Reem Edwan*	81
•	Synthesis, characterization and experimental study of three new bridged Tin(IV) coordination complexes with dithiocarbamates  **Akremi, Ali***	91
•	Nonstructural proteins guide coronavirus RNA synthesis, infectious capability and vaccine development  A. Khuzaim Alzahrani	102
•	Categorical tests of independence: A Monte Carlo simulation study  *Abdulaziz Alenazi**	114

#### Citation from a book of more than one author:

Timothy, N., Stepich, D., & James, R. (2014/1434 H) *Instructional technology for teaching and learning*. Riyadh, Kingdom of Suadi Arabia: University of King Saud Publications.

#### Citation from Periodicals:

Al Nafaa, A. H. (1427 H). Effect of driving off-road on wild vegetation parks: A study in environmental protection, in the center of the Kingdom of Saudi Arabia. *Saudi Journal of Life Sciences*, 14(1), 35-72.

#### Citation from M.A. or Ph.D. Thesis:

AlQadi, I. A. (1429 H). *Natural Plants in a Coastal Environment between Rassi Tanoura and Elmalouh in the Eastern Region: A Study in Botanical Geography and the Protection of Environment.* Unpublished Ph.D. Dissertation, College of Arts for Girls, Dammam, Kingdom of Suadi Arabia: King Faisal University.

#### **Citation from Internet References:**

#### Citing an online book:

Almazroui, M. R. & Madani, M. F. (2010). *Evaluation of performance in Higher Education Institutions*. Digital Object Identifier (doi:10.xxxx/xxxx-xxxxxxxx-x), or the Hypertext Transfer Protocol (http://www...), or the International Standard Book Number (ISBN: 000-0-00-00000-0) must be mentioned.

#### Citing an article in a periodical:

Almadani, M. F. (2014). The definition of debate in reaching consensus. *The British Journal of Educational Technology*, *11*(6), 225-260. Digital Object Identifier (doi:10.xxxx/xxxx-xxxxxxxxx) or the Hypertext Transfer Protocol (http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1111), or the International Standard Serial Number of the journal (ISSN: 1467- 8535) must be mentioned.

15. It is the researcher's responsibility to translate into English the Arabic bibliography.

#### **Example:**

```
الجبر، سليمان. (1991م). تقويم طرق تدريس الجغرافيا ومدى اختلافها باختلاف خبـرات المدرسين وجنسياتهم وتخصصاتهم في المرحلة المتوسطة
بالمملكة العربية السعودية. مجلة جامعة الملك سعود. العلوم التربوية، (13)، 143-170.
```

- Al-Gabr, S. (1991). The evaluation of geography instruction and the variety of its teaching concerning the experience, nationality, and the field of study in intermediate schools in Kingdom of Saudi Arabia (in Arabic). Journal of King Saud University- Educational Sciences, 3(1), 143-170.
- 16. Numerals should be the original Arabic numbers (0, 1, 2, 3 ...) in the manuscript.

#### **Required Documents**

#### Researchers are required to submit the following:

1. An electronic copy of their submissions in two formats: Microsoft Word Document (WORD) and Portable Document Format (PDF), to be sent to the following email:

s.journal.nbu@gmail.com

R

s.journal@nbu.edu.sa

- 2. The researcher's CV, including his/her full name in Arabic and English, current work address, email, and academic rank.
- 3. The researcher must fill out and submit the application for publishing in the Journal of the North, along with the Pledge Statement that his/her submission has not been published before or has not been submitted for publishing elsewhere.

#### NB

- 1. The submissions received by the Journal of the North will not be returned whether they are published or not.
- 2. The published papers reflect only the author's points of view.
- 3. All accepted manuscripts devolve their property to the Journal of the North for Basic and Applied Sciences (JNBAS).

#### PUBLICATION INSTRUCTIONS FOR AUTHORS

#### **Submission Guidelines**

- 1. Manuscript must not exceed 35 pages of plain paper (A4).
- 2. Manuscript must have a title and an abstract in both Arabic and English on one page; the abstract should not be more than 250 words. The manuscript should include, in both languages, keywords that indicate the field of specialization. The keywords are written below each summary and should not be more than six.
- 3. The author(s) name(s), affiliation(s) and address(es) must be written immediately below the title of the article, in Arabic and English.
- 4. The Arabic manuscript is typed in Simplified Arabic, in 14-font size for the main text, and 12-font size for notes.
- 5. The English manuscript is typed in Times New Roman, in 12- font size for the main text, and 9-font size for notes.
- 6. The manuscript is typed only on one side of the sheet, and line spacing should be single. Margins should be 2.5 cm (or 1.00 inches) on all four sides of the page.
- 7. The manuscript must have the following organization:

**Introduction:** It should indicate the topic and aims of the research paper, and be consistent with its ideas, information and the established facts. The research problem(s) and importance of the literature review should also be introduced.

**Body:** The manuscript body includes all necessary and basic details of research approach, tools and methods. All stated information should be arranged according to priority.

**Findings and Discussion:** Research findings should be clear and brief, and the significance of these findings should be elucidated without repetition.

Conclusion: It is a brief summary of the research topic, findings, recommendations and suggestions.

- 8. Figures, diagrams and illustrations should be included in the main text and consecutively numbered and given titles, with explanatory notes beneath them.
- 9. Tables should also be included in the main text, consecutively numbered and given titles at the top, with explanatory notes below.
- 10. Footnotes should be added at the bottom of each page, when necessary. They are to be indicated by numbers or asterisks, in 12-font size for Arabic and 9-font size for English.
- 11. The Journal of the North does not publish research and measurement tools (instruments). However, they must be included in the submission(s).
- 12. Citations must follow the American Psychological Association (APA) reference style in which both the author's name and year of publishing are mentioned in the main text, i.e. (name, year). Numbering the references inside the main text and adding footnotes are not allowed.

Researchers' documentation must be as follows:

- For single author, the author's family name, followed by a comma, and the publishing year, such as (Khayri, 1985). Page numbers are indicated in the main text in case of quotations, such as (Khayri, 1985, p. 33).
- If a manuscript has two authors, they must both be cited as shown previously, e.g. (AL-Qahtani & AL-Adnani, 1426 H)
- If there are multiple (more than two) authors, their family names must be mentioned the first time only, e.g. (Zahran, Al-Shihri, & Al-Dusari, 1995); if the researcher is quoting the same work several times, the family name of the first author followed by "et al." [for papers in English] and by "وَالْخُرُونُ [for papers in Arabic] must be used, e.g. (Zahran et al., 1995) / (1995) [ Full publishing data must be mentioned in the bibliography.
- 13. Hadith documentation must follow the following example: (Sahih Al-Bukhari, vol.1, p.5, hadith number 511).
- 14. The bibliography, list of all the sources used in the process of researching, must be added in alphabetical order using the author's last name according to the APA reference style (6<sup>th</sup> edition) in 12-font size for Arabic and 9-font size for English.

The bibliography should be organized as follows:

Citation from books:

#### Citation from a one-authored book:

Shotton, M. A. (1989). Computer education? A study to computer dependency. London, England: Taylor & Francis.

#### Journal of the North for Basic and Applied Sciences (JNBAS)

#### About the Journal

The Journal of the North is concerned with the publication of original, genuine scholarly studies and researches in Basic and Applied Sciences in Arabic and English. It publishes original papers, review papers, book reviews and translations, abstracts of dissertations, reports of conferences and academic symposia. It is a biannual publication (May and November).

#### Vision

The journal seeks to achieve leadership in the publication of refereed scientific papers and rank among the world's most renowned scientific periodicals.

#### Mission

The mission of the journal is to publish refereed scientific researches in the field of Basic & Applied Sciences according to well-defined international standards.

#### **Objectives**

- 1. Serve as a scholarly academic reference for researchers in the field of Basic & Applied Sciences.
- 2. Meet the needs of researchers, publish their scientific contributions and highlight their efforts at the local, regional and international levels.
- Participate in building a knowledge community through the publication of research that contributes to the development of society.
- 4. Cover the refereed works of scientific conferences.

#### Terms of Submission

- 1. Originality, innovation, and soundness of both research methodology and orientation.
- 2. Sticking to the established research approaches, tools and methodologies in the respective discipline.
- 3. Accurate documentation.
- 4. Language accuracy.
- 5. The contribution must be unpublished or not submitted for publication elsewhere.
- 6. The research extracted from a thesis/dissertation must be unpublished or not submitted for publishing elsewhere and the researcher must indicate that the research submitted for publishing in the journal is extracted from a thesis/dissertation.

#### Correspondence

Editor-in-Chief

Journal of the North for Basic and Applied Sciences (JNBAS), Northern Border University, P.O.Box 1321, Arar 91431, Kingdom of Saudi Arabia.

Tel: +966(014)6615499 Fax: +966(014)6614439

email: s.journal@nbu.edu.sa & s.journal.nbu@gmail.com

Website: http://jnbas.nbu.edu.sa

#### **Subscription & Exchange**

Scientific Publishing Center, Northern Border University, P.O.Box. 1321, Arar 91431, Kingdom of Saudi Arabia.



## Journal of the North for Basic and Applied Sciences (JNBAS)

**Peer-Reviewed Scientific Journal** 

Published by

Scientific Publishing Center Northern Border University

Vol. (7), Issue (2) November 2022 - Rabi' II 1444 H

Website & Email

http://jnbas.nbu.edu.sa
s.journal@nbu.edu.sa & s.journal.nbu@gmail.com

p-ISSN: 1658-7022 / e-ISSN: 1658-7014





#### IN THE NAME OF ALLAH

THE MOST GRACIOUS, THE MOST MERCIFUL

#### Journal of the North for Basic and Applied Sciences (JNBAS)

#### **Editorial Board**

**Editor-in-Chief** 

Dr. Abdullah Ferhan Al Madhari

Northern Border University, KSA

**Deputy Editor-in-chief** 

Saleh Mohammed Ali Altowaijri

Northern Border University, KSA

**Managing Editor** 

Prof. Osama H. S. Hassanein

Northern Border University, KSA

**Editorial Board** 

**Prof. Mohamed Soliman Mahmoud Sherif** 

Northern Border University, KSA.

Prof. Mohamed Shaban Zaky Sayedahmed

Northern Border University, KSA.

Prof. Safwat Abdelhaleem Mahmoud

Northern Border University, KSA.

**Prof. Mohamed Hamdy Mohamed Helal** 

Northern Border University, KSA.

Dr. Shehab Ahmed Khalifa Alenazi

Northern Border University, KSA.

Dr. Nasser Salem Misfer Alqahtani

Northern Border University, KSA.

Dr. Mohamed Abdelghaffar Ali Ashour

Northern Border University, KSA.

Dr. Yahia Fahem Bechir Said

Northern Border University, KSA.

**International Advisory Editors** 

Prof. Sultan Tawfeeq Al Adwan

Chief of the Arab University Union, Jordan

Prof. Abdulaziz J. Al-Saati

King Faisal University, KSA

Prof. Muddathir Tingari

Khurtum University, Sudan

Prof. Muhammad Musa Al-Shamrani

King Abdulaziz University, KSA

**Prof. Ahmed Al-Khazem** 

King Saud University, KSA

**Prof. Anita Oommen** 

Northern Border University, KSA

Dr. Thangavelu Muthukumar

Bharathiar University, India

Dr. Tahir Mehmood Khan

Monash University Malaysia, Malaysia

**Language Editors** 

Dr. Mohammad H. Al-khresheh

(English Lang.)

**Journal Secretary** 

Mr. Mohammed Abdelhakam

#### © 2022 (1444 H) Northern Border University

All publishing rights are reserved. Without written permission from the Journal of the North. No part of this journal may be reproduced, republished, transmitted in any form by any means: electronic, mechanical, photocopying, recording via stored in a retrieval system.



Volume (7)
Issue (2)
November
2022
Rabi` II

1444 H

J N B A S

# Journal of the North for Basic and Applied Sciences

**Peer-Reviewed Scientific Journal** 

**Northern Border University** 

www.nbu.edu.sa & jnbas.nbu.edu.sa

p- ISSN: 1658 - 7022 e- ISSN: 1658 - 7014