

## Skupina 18: Kemijski grafi

*Avtorja: David Planinšek Šilc, Lenart Žerdin*

*Datum: 20. 12. 2024*

Najina tema je raziskovanje kemijskih grafov in njihovega totalnega  $\sigma$ -indeksa iregularnosti.

### Opis problema

Graf je kemijski, če so vsa njegova vozlišča stopnje največ 4. Če ima kemijski graf  $a_i$  vozlišč stopnje  $i$ ,  $1 \leq i \leq 4$ , potem njegovo stopenjsko zaporedje označimo kot  $(1^{a_1}, 2^{a_2}, 3^{a_3}, 4^{a_4})$ .

Definiramo totalni  $\sigma$ -indeks iregularnosti, v angleščini 'Total  $\sigma$ -irregularity',  $\sigma_t^{f(n)}(G)$  kot

$$\sigma_t^{f(n)}(G) = \sum_{\{u,v\} \subseteq V(G)} |d_G(u) - d_G(v)|^{f(n)},$$

kjer je  $n = |V(G)|$  in je  $f(n)$  funkcija, definirana za  $n \geq 4$ .

Očitno je, da je minimalna vrednost  $\sigma_t^{f(n)}$  dosežena z regularnimi grafi, ki jih na primer ponazarjajo strukture, kot so cikel  $C_n$  ali grafi z stopnjskimi zaporedji, kot so  $(1^0, 2^0, 3^0, 4^n)$ . Zato se osredotočamo na kemijske grafe, ki dosegajo maksimalno vrednost  $\sigma_t^{f(n)}$ .

### Izrek

Naj bo  $n \geq 7$ ,  $f(n) \leq \log_3 \left( \frac{3n^2}{3n^2-8} \right)$ , in naj bo  $(1^{a_1}, 2^{a_2}, 3^{a_3}, 4^{a_4})$  stopenjsko zaporedje kemijskega grafa  $G$  z maksimalno vrednostjo  $\sigma_t^{f(n)}(G)$ . Potem velja:

1. Če  $n = 4k - 1$ , potem  $a_1 = a_3 = a_4 = k$  in  $a_2 = k - 1$ .
2. Če  $n = 4k$ , potem  $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = k$ .
3. Če  $n = 4k + 1$ , potem  $a_1 = a_2 = a_3 = k$  in  $a_4 = k + 1$ .
4. Če  $n = 4k + 2$ , potem velja bodisi  $a_1 = a_3 = k$  in  $a_2 = a_4 = k + 1$ , bodisi  $a_1 = a_3 = k + 1$  in  $a_2 = a_4 = k$ .

Ker je za kemijske grafe razlika med stopnjami vozlišč omejena, domnevamo naslednje:

- **Domneva 1:** Isti grafi, kot v Izreku, imajo maksimalno vrednost za  $\sigma_t^{f(n)}$ , če je  $f(n) = \frac{1}{n}$ .
- **Domneva 2:** Isti grafi, kot v Izreku, imajo maksimalno vrednost za  $\sigma_t^{f(n)}$ , če je  $f(n) = c$ , kjer je  $c$  konstanta v intervalu  $(0, 1)$ .

## Potek dela

1. Implementirala bova algoritm za sistematično iskanje vseh možnih stopenjskih zaporedij za kemijske grafe do števila vozlišč  $n = 10$ , saj se čas iskanja eksponentno povečuje.
2. Za vsako stopenjsko zaporedje bova izračunala  $\sigma_t^{f(n)}(G)$  z ustrezno funkcijo  $f(n) = \frac{1}{n}$  ali  $f(n) = c$ ,  $c \in (0, 1)$ , in jih uredila po velikosti. Osredotočila se bova na  $c$ -je, ki so blizu 0 oziroma 1.
3. Za obe funkciji in za različne parametre  $c$  bova preverila ujemanje s posledicama izreka.
4. Implementirala bova algoritm za stohastično iskanje stopnejskih zaporedij za kemijske grafe za  $n > 10$ . Najna hipoteza je, da je za večji totalni  $\sigma$ -indeks biti števila stopenjskega zaporedja blizu skupaj. Algoritem bo začel z nekim naključnim grafom, nato pa bo iterativno mutiral trenutni graf, tj. odstranil in dodal po 1 povezavo tako, da bo graf še vedno kemijski, in izračunal vrednost  $\sigma_t^{f(n)}$  za mutiran graf. Če mutirani graf izboljša vrednost  $\sigma_t^{f(n)}$ , ga agoritem sprejme kot trenutni graf. Po končnem številu iteracij bo algoritem vrnil stopenjsko zaporedje, kjer je bil dosežen maksimum, torej trenutnega grafa.