

# Graovac-Ghorbanijev indeks

Jaša Pavčič in Liza Logar

December 2023

## 1 Opis problema

Graovac-Ghorbanijev (G-G) indeks je pomemben koncept v teoriji grafov. Poleg tega ima velik pomen tudi v kemijski teoriji, veji matematične kemije, ki uporablja teorijo grafov pri matematičnem modeliranju kemijskih pojavov. Graovac-Ghorbanijev indeks namreč lahko interpretiramo kot atomsko-veznostni indeks, ki opisuje vzorce povezljivosti atomov in vezi znotraj molekularne strukture.

Naš cilj je analizirati strukturo grafov na fiksnem številu vozlišč, ki imajo najmanjši oziroma največji možen G-G indeks. Nato enak problem obravnavamo še na dvodelnih grafih, drevesih in grafih brez trikotnikov. Za manjše grafe bomo rezultat izračunali natančno, pri večjih pa bomo izračunali približek s pomočjo metahevrstike. Za programiranje bomo uporabili okolje Sage.

## 2 Načrt za delo

Najprej bomo na grafih izračunali razdalje med vsemi pari vozlišč, saj bomo te razdalje uporabili pri izračunu G-G indeksa. Nato bomo zapisali formulo za izračun indeksa in jo uporabili na različnih manjših grafih, da dobimo nekaj intuicije za to, kateri grafi imajo Graovac-Ghorbanijev indeks velik in kateri majhen. Dobili bomo hipotezo, ki jo bomo testirali še na večjih grafih.

Pri reševanju problema za večje grafe bomo uporabili metahevrstično metodo simuliranega ohlajanja. Definiramo sledeče parametre, da bomo lahko izvedli metodo:

- *Sosednja stanja* grafa bomo dobili tako, da bomo dodajali/odvzemali povezave originalnemu grafu. Pri drevesih, dvodelnih grafih in grafih brez trikotnikov bomo sosede definirali nekoliko drugače, da obdržimo želeno strukturo grafa. Funkcijo imenujemo *neighbour()*.
- *Energijska funkcija* je ciljna funkcija, ki jo želimo minimizirati/maksimizirati. V našem primeru je to G-G indeks. Označimo jo z *GGI()*.

- *Temperaturna funkcija* Definira kako se temperatura zmanjšuje, njena izbira je ključna pri uspešnosti iskanja optimuma. Primer začetne funkcije:

$$T_k = \alpha * T_0 / \ln(1 + k)$$

kjer je  $T_k$  vrednost temperature ob  $k$ -ti iteraciji in  $\alpha$  ohlajevalni koeficient.

- *Verjetnost sprejema* je verjetnost prehoda iz trenutnega stanja  $s$  na novo stanje  $s'$ . Definiramo jo kot

$$P(e, e', T) = \begin{cases} 1 & , \text{ če } e' < e \\ \exp(-(e' - e)/T) & , \text{ sicer} \end{cases} \quad (1)$$

kjer je  $e = GGI(s)$  in  $e' = GGI(s')$ .

Poskuse bomo izvedli na splošnih grafih, dvodelnih grafih, drevesih in grafih brez trikotnikov. Končne vrednosti Graovac-Ghorbanijevega indeksa bomo primerjali z zgornjo in spodnjo mejo indeksa, ki sta definirani v članku, dostopnem na povezavi. Ko bodo rezultati zadovoljivi, jih bomo dokumentirali.