

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Finančna matematika – 1. stopnja

Luka Lavš, Tinka Napret-Kaučič

KOMPLEMENTARNI DRUGI ZAGREBŠKI INDEKS

Delo finančnega praktikuma

Mentor: dr. Riste Škrekovski

Somentor: dr. Timotej Hrga

Ljubljana, december, 2025

Kazalo

1	Drugi komplementarni Zagrebški indeks	1
2	k kot funkcija parametra n	1
3	Grafi danega ciklometričnega števila	5
3.1	Problem minimuma	6
3.2	Problem maksimuma	7
4	Preverjanje manjših grafov	10
5	Metaheuristične metode	10
6	Vzorci za minimalne in maksimalne grafe	11
	Literatura	12

1 Drugi komplementarni Zagrebški indeks

Definicija 1.1. Naj bo G graf ter $E(G)$ množica njegovih povezav. Z $d_G(u)$ označimo stopnjo vozlišča $u \in E(G)$. Tedaj definirajmo drugi komplementarni Zagrebški indeks (DKZI) kot:

$$\text{cM}_2(G) := \sum_{uv \in E(G)} |d_G(u)^2 - d_G(v)^2| \quad (1.1)$$

V tem delu se bomo osredotočili na problem, pri katerih povezanih grafih DKZI doseže ekstremne vrednosti. Za začetek navedimo trditev, ki jo je dokazal Gao [1], leta 2025.

Trditev 1.2. Naj bo \mathcal{G}_n množica povezanih grafov reda n , K_m popoln graf, torej $(m-1)$ -regularen, in \overline{K}_m njegov komplement, torej nepovezan graf z m vozlišči.

Tedaj za vsak $n \geq 5$ velja, da če $G^* \in \mathcal{G}_n$ doseže maksimalno vrednost drugega komplementarnega Zagrebškega indeksa $\text{cM}_2(G)$, potem obstaja $k < \lceil n/2 \rceil$, tak da je G^* izomorfen grafu $K_k + \overline{K}_{n-k}$. Oziroma krajše:

$$\forall n \geq 5 : G^* \in \arg \max_{G \in \mathcal{G}_n} \text{cM}_2(G) \implies \exists k < \lceil \frac{n}{2} \rceil : G^* \cong K_k + \overline{K}_{n-k}. \quad (1.2)$$

Tu je operacija $+$ definirana kot join grafov, torej za grafa G in H je $G + H$ graf, ki ga dobimo tako, da vzamemo disjunktna grafa G in H ter dodamo vse povezave med vsakim vozliščem grafa G in vsakim vozliščem grafa H .

2 k kot funkcija parametra n

Trditev 1.2 nam pove, da so grafi, ki za dano število vozlišč n dosežejo maksimalno vrednost drugega komplementarnega Zagrebškega indeksa, oblike $K_k + \overline{K}_{n-k}$. Glede parametra k pa zgolj omeji območje iskanja na $[0, \lceil \frac{n}{2} \rceil]$. S tem se ne zadovoljimo prehitro ter analitično poiščimo funkcijo Γ , ki bo za dani parameter n vrnila ustrezno število k .

Najprej predstavimo DKZI grafa iz trditve 1.2 kot funkcijo parametrov n in k . Nato pa dano funkcijo maksimizirajmo, kjer se seveda omejimo na naravna števila.

Trditev 2.1. Naj bo $n \geq k$, tedaj je DKZI grafa $G = K_k + \overline{K}_{n-k}$ enak $\text{cM}_2(G) = k(n-k)((n-1)^2 - k^2)$.

Dokaz. Naj bo $G = K_k + \overline{K}_{n-k}$. Graf G je očitno sestavljen iz dveh gruč, zato njegove povezave razdelimo na notranje povezave podgrafa K_k , povezave med K_k in

\overline{K}_{n-k} ter na notranje povezave podgrafa \overline{K}_{n-k} .

$$\begin{aligned}
\text{cM}_2(G) &= \sum_{uv \in E(G)} |d_G(u)^2 - d_G(v)^2| \\
&= \sum_{uv \in E(K_k)} |((k-1) + (n-k))^2 - ((k-1) + (n-k))^2| + \\
&\quad \sum_{u \in V(K_k) \wedge v \in V(\overline{K}_{n-k})} |((k-1) + (n-k))^2 - k^2| + \\
&\quad \sum_{uv \in E(\overline{K}_{n-k})} |k^2 - k^2| \\
&= |V(K_k)| |V(\overline{K}_{n-k})| ((n-1)^2 - k^2) \\
&= k(n-k)((n-1)^2 - k^2)
\end{aligned}$$

□

Sedaj funkcijo imamo, označimo jo z $f(n, k) = k(n-k)((n-1)^2 - k^2)$. Najprej poiščimo njen maksimum (pri fiksnem n) na množici realnih števil. Pri tem si bomo pomagali s Cardanovo formulo [3] ter z analizo odvodov.

Izrek 2.2 (Cardanova formula). *Naj bo $ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$ splošna kubična enačba z $a \neq 0$ ter naj bodo $\Delta_0 = b^2 - 3ac$, $\Delta_1 = 2b^2 - 9abc + 27a^2d$ in $C = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3}}{2}}$. Potem so rešitve dane kubične enačbe enake:*

$$x_j = -\frac{1}{3a} \left(b + \xi^j C + \frac{\Delta_0}{\xi^j C} \right), \quad (2.1)$$

za $\xi = e^{2\pi i/3}$, ter $j \in \{0, 1, 2\}$.

Trditev 2.3. *Za poljuben $n \in \mathbb{R}$ funkcija $f(n, k) = k(n-k)((n-1)^2 - k^2)$ doseže maksimum pri*

$$k = \frac{1}{12} \left(3n - \sqrt[3]{3} e^{\frac{4i\pi}{3}} \sqrt[3]{A} + \frac{3^{2/3} B}{e^{\frac{4i\pi}{3}} \sqrt[3]{A}} \right),$$

kjer sta A in B definirana kot:

$$\begin{aligned}
A &= 9(n-2)n(3n-2) \\
&\quad + 4\sqrt{3} \sqrt{-(n-1)^2(n(2n(34n-73) + 201) - 128) + 32}; \\
B &= (16 - 11n)n - 8.
\end{aligned}$$

Velja tudi, da je f konkavna na intervalu

$$\left[\frac{n}{4} - \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}}, \frac{n}{4} + \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} \right]$$

in konveksna drugod.

Dokaz. V dokazu si bomo pomagali s parcialnima odvodoma funkcije f :

$$\frac{\partial f}{\partial k} = 4k^3 - 3nk^2 - 2(n-1)^2k + n(n-1)^2 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial k^2} = 12k^2 - 6nk - 2(n-1)^2 \quad (2.3)$$

Kvadratna neenačba $\frac{\partial^2 f}{\partial k^2} \leq 0$, glede na parameter k , nam da rešitev

$$k \in \left[\frac{n}{4} - \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}}, \frac{n}{4} + \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} \right], \quad (2.4)$$

f je torej tu res konkavna.

Pokažimo, da so vse rešitve enačbe $\frac{\partial f}{\partial k} = 0$ realne. To velja, saj sta si vrednosti ekstremov funkcije $\frac{\partial f}{\partial k}$ (parametra k) nasprotno predznačeni. Velja namreč:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f}{\partial k} \left(n, \frac{n}{4} - \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} \right) \cdot \frac{\partial f}{\partial k} \left(n, \frac{n}{4} + \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} \right) \\ &= -\frac{17}{27}n^6 + \frac{47}{18}n^5 - \frac{187}{36}n^4 + \frac{169}{27}n^3 - \frac{163}{36}n^2 + \frac{16}{9}n - \frac{8}{27} < 0 \end{aligned}$$

Sedaj pa enačbo $\frac{\partial f}{\partial k} = 0$ razrešimo s pomočjo Cardanove formule 2.2. Po nekaj izračunih vidimo, da je j -ta rešitev enačbe enaka:

$$x_j = \frac{1}{12} \left(\underbrace{3n}_{\text{prvi člen}} - \underbrace{\sqrt[3]{3e^{\frac{2i\pi j}{3}}} \sqrt[3]{A}}_{\text{drugi člen}} + \underbrace{\frac{3^{2/3} e^{-\frac{2i\pi j}{3}} B}{\sqrt[3]{A}}}_{\text{tretji člen}} \right),$$

kjer sta A in B enaka kot v trditvi 2.3. S tem zaključimo dokaz. □

Z nekaj dodatnimi izračuni lahko še pokažemo, da je funkcija f , za vsak $n \geq 5$, konkavna tudi na intervalu $[0, \lceil \frac{n}{2} \rceil]$. To je res, saj

$$\forall n \in \mathbb{R} : \frac{n}{4} - \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} \leq 0.$$

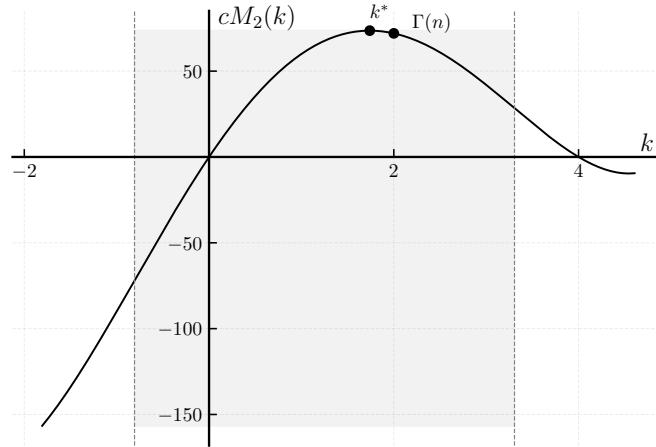
in tudi:

$$\forall n \geq 5 : \frac{n}{4} + \frac{\sqrt{11n^2 - 16n + 8}}{4\sqrt{3}} > \lceil \frac{n}{2} \rceil.$$

Če nam uspe pokazati še, da rešitev x_j , ki je po velikosti druga, leži na intervalu $[0, \lceil \frac{n}{2} \rceil]$; potem lahko sklepamo, da je $\arg \max_{1 \leq k \leq \lceil n/2 \rceil} f$ v neposredni bližini rešitve x_j .

In res empirična in asimptotska analiza pokaže, da je $x_0 \leq x_2 \leq x_1$ za vsak n ter, da $0 < x_2 < \lceil \frac{n}{2} \rceil$ za vsak $n \geq 5$.

Od tu sledi naslednji izrek, katerega smo ravnokar tudi dokazali. Funkcijo Γ smo namreč našli.



Slika 1: $k^* := \arg \max_{x \in [0, \lceil n/2 \rceil]} f(n, x)$ in $\Gamma(n) := \arg \max_{x \in [0, \lceil n/2 \rceil] \wedge x \in \mathbb{N}} f(n, x)$

Izrek 2.4 (*k kot funkcija n*). Naj bo \mathcal{G}_n množica povezanih grafov reda n . Naj bo $cM_2 : \mathcal{G}_n \rightarrow \mathbb{R}$ funkcija, ki grafu priredi DKZI. Naj bo $\Gamma : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ "funkcija" s predpisom:

$$\Gamma(n) = \arg \max_{x \in \{\lceil h(n) \rceil, \lfloor h(n) \rfloor\}} cM_2(x), \quad (2.5)$$

kjer so h , A ter B podani kot:

$$h(n) = \frac{1}{12} \left(3n - \sqrt[3]{3} e^{\frac{4i\pi}{3}} \sqrt[3]{A} + \frac{3^{2/3} B}{e^{\frac{4i\pi}{3}} \sqrt[3]{A}} \right);$$

$$\begin{aligned} A &= 9(n-2)n(3n-2) \\ &\quad + 4\sqrt{3} \sqrt{-(n-1)^2 \left(n(n(2n(34n-73) + 201) - 128) + 32 \right)}; \\ B &= (16 - 11n)n - 8 \end{aligned}$$

Tedaj za vsak $n \geq 5$ velja:

$$G^* \in \arg \max_{G \in \mathcal{G}_n} cM_2(G) \implies \exists k \in \Gamma(n) : G^* \cong K_k + \overline{K}_{n-k} \quad (2.6)$$

Opomba 2.5. "Funkcija" Γ iz izreka 2.4 ni čista funkcija, saj obstajajo števila $n \geq 5$ za katere je $\Gamma(n)$ množica dveh števil. Primeri takih (zaporednih) vrednosti n so: 12, 117, 450, 4674, 48620, 505829, 1955714, 20347010, ...

Opremljeni s funkcijo Γ prikažimo tabelo vrednosti k za dane n , ki po trditvi 1.2 tvorijo graf, ki doseže maksimalen DKZI. Ta tabela nadaljuje vrednosti tabele, ki so jo podali Saber in dr. [2].

n	k	n	k	n	k	n	k	n	k	n	k	n	k
150	58	193	75	236	92	279	109	322	126	365	142	408	159
151	59	194	76	237	92	280	109	323	126	366	143	409	159
152	59	195	76	238	93	281	110	324	126	367	143	410	160
153	60	196	76	239	93	282	110	325	127	368	143	411	160
154	60	197	77	240	94	283	110	326	127	369	144	412	161
155	60	198	77	241	94	284	111	327	127	370	144	413	161
156	61	199	78	242	94	285	111	328	128	371	145	414	161
157	61	200	78	243	95	286	111	329	128	372	145	415	162
158	62	201	78	244	95	287	112	330	129	373	145	416	162
159	62	202	79	245	95	288	112	331	129	374	146	417	163
160	62	203	79	246	96	289	113	332	129	375	146	418	163
161	63	204	79	247	96	290	113	333	130	376	147	419	163
162	63	205	80	248	97	291	113	334	130	377	147	420	164
163	63	206	80	249	97	292	114	335	131	378	147	421	164
164	64	207	81	250	97	293	114	336	131	379	148	422	165
165	64	208	81	251	98	294	115	337	131	380	148	423	165
166	65	209	81	252	98	295	115	338	132	381	149	424	165
167	65	210	82	253	99	296	115	339	132	382	149	425	166
168	65	211	82	254	99	297	116	340	133	383	149	426	166
169	66	212	83	255	99	298	116	341	133	384	150	427	167
170	66	213	83	256	100	299	117	342	133	385	150	428	167
171	67	214	83	257	100	300	117	343	134	386	151	429	167
172	67	215	84	258	101	301	117	344	134	387	151	430	168
173	67	216	84	259	101	302	118	345	135	388	151	431	168
174	68	217	85	260	101	303	118	346	135	389	152	432	168
175	68	218	85	261	102	304	119	347	135	390	152	433	169
176	69	219	85	262	102	305	119	348	136	391	152	434	169
177	69	220	86	263	102	306	119	349	136	392	153	435	170
178	69	221	86	264	103	307	120	350	136	393	153	436	170
179	70	222	86	265	103	308	120	351	137	394	154	437	170
180	70	223	87	266	104	309	120	352	137	395	154	438	171
181	70	224	87	267	104	310	121	353	138	396	154	439	171
182	71	225	88	268	104	311	121	354	138	397	155	440	172
183	71	226	88	269	105	312	122	355	138	398	155	441	172
184	72	227	88	270	105	313	122	356	139	399	156	442	172
185	72	228	89	271	106	314	122	357	139	400	156	443	173
186	72	229	89	272	106	315	123	358	140	401	156	444	173
187	73	230	90	273	106	316	123	359	140	402	157	445	174
188	73	231	90	274	107	317	124	360	140	403	157	446	174
189	74	232	90	275	107	318	124	361	141	404	158	447	174
190	74	233	91	276	108	319	124	362	141	405	158	448	175
191	74	234	91	277	108	320	125	363	142	406	158	449	175
192	75	235	92	278	108	321	125	364	142	407	159	450	175,176

3 Grafi danega ciklomatičnega števila

Problem maksimalne vrednosti drugega komplementarnega Zagrebškega indeksa pri danem številu vozlišč smo rešili. Optimalen graf, je dan s trditvama 1.2 in 2.3. Podobno je znana tudi optimalna vrednost s trditvama 2.1 in 2.3.

V tem poglavju pa problem razširimo in se posvetimo grafom, ki za dano število vozlišč n in dano število povezav m dosežejo bodisi minimum bodisi maksimum drugega komplementarnega Zagrebškega indeksa. Ker se število povezav da enolično določiti s številom vozlišč in ciklomatičnem številom ν , si za lažje prepoznavanje vzorcev raje ogledujemo grafe reda n ter ciklomatičnega števila ν .

Definicija 3.1. Naj bo G graf reda n , m število njegovih povezav ter p število povezanih komponent, ki sestavljajo graf G . Tedaj je ciklomatično število k grafa G enako:

$$\nu = m - n + p.$$

Povezani grafi reda n s ciklomatičnem številom ν imajo torej $m = n - 1 + \nu$ povezav.

Trditev 3.2. *Naj bo G povezan graf reda n ter s ciklometričnim številom ν , tedaj ima $n \geq \lceil (3 + \sqrt{1 + 8\nu})/2 \rceil$ vozlišč. Namreč to sledi iz tega, da ima graf lahko največ toliko povezav kot bi jih imel, če bi bil poln.*

3.1 Problem minimuma

Najprej se osredotočimo na grafe, ki pri danem n in ν DKZI minimizirajo. Manjše grafe poiščimo s pomočjo mešano celoštevilskega linearnega programiranja (MILP), večje pa poiščimo s preprosto heuristično metodo simulated annealing (SA).

MILP za problem minimuma je sledeč: Naj bo za vsak urejen par $i < j$ spremenljivka x_{ij} enaka 1 natanko tedaj ko sta vozlišči i ter j povezani. S s_i modelirajmo kvadrat stopnje i -tega vozlišča. S z_{ij} modelirajmo absolutno vrednost razlike kvadratov stopenj. S spremenljivkami f_{uv} pa modelirajmo povezanost grafa.

$$\min \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n z_{ij} \quad (3.1)$$

$$\text{p. p.} \quad (3.2)$$

$$\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n x_{ij} = m := n - 1 + \nu \quad (3.3)$$

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : \sum_{t=1}^{n-1} y_{it} = 1 \quad (3.4)$$

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : \sum_{t=1}^{n-1} t y_{it} = \sum_{j < i} x_{ji} + \sum_{i < j} x_{ij} \quad (3.5)$$

$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : s_i = \sum_{t=1}^{n-1} t^2 y_{it} \quad (3.6)$$

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, i < j : z_{ij} \geq s_i - s_j - (n-1)^2(1 - x_{ij}) \quad (3.7)$$

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, i < j : z_{ij} \geq s_j - s_i - (n-1)^2(1 - x_{ij}) \quad (3.8)$$

$$\forall u, v \in \{1, \dots, n\}, u \neq v : f_{uv} \leq (n-1)x_{\min(u,v), \max(u,v)} \quad (3.9)$$

$$\forall v \in \{2, \dots, n\} : \sum_{\substack{u=1 \\ u \neq v}}^n f_{uv} - \sum_{\substack{u=1 \\ u \neq v}}^n f_{vu} = 1 \quad (3.10)$$

$$\sum_{v=2}^n f_{1v} = n - 1 \quad (3.11)$$

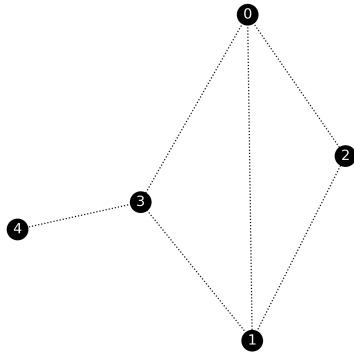
$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, i < j : x_{ij} \in \{0, 1\} \quad (3.12)$$

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, i < j : z_{ij} \geq 0 \quad (3.13)$$

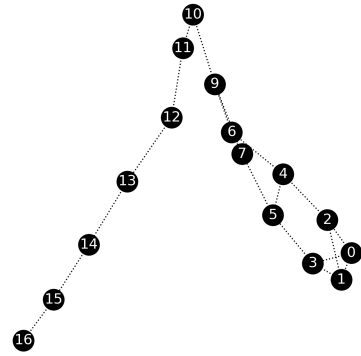
$$\forall i \in \{1, \dots, n\} : s_i \geq 0 \quad (3.14)$$

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \forall t \in \{1, \dots, n-1\} : y_{it} \in \{0, 1\} \quad (3.15)$$

Najdeni grafi so sledečih oblik, pri čemer pa je vredno omeniti, da grafi za dan red n ter ciklometrično število ν niso nujno unikatni.



(a) Graf reda 5 z ciklometričnim številom 2. Primer, ki ga razreši prva točka hipoteze 3.3



(b) Graf reda 17 z ciklometričnim številom 5. Primer, ki ga razreši tretja točka hipoteze 3.3

Slika 2: Grafa, ki glede na svoje število vozlišč ter ciklometrično število dosežeta minimum DKZI vrednosti.

Hipoteza 3.3. Z $G_{n,\nu}$ označimo graf reda n , ki za dano ciklometrično število ν doseže minimalno vrednost DKZI, tedaj velja:

1. $cM_2(G_{4,2}) = 20 \wedge cM_2(G_{5,2}) = 18 \wedge \forall n \geq 6 : cM_2(G_{n,2}) = 16$
2. $\forall \nu \geq 3 : cM_2(G_{2\nu-1,\nu}) = 10.$
3. $\forall \nu \geq 3, \forall n \geq 2\nu : cM_2(G_{n,\nu}) = 8.$

3.2 Problem maksimuma

Opomba 3.4. Ciklometrično število grafa $K_k + \overline{K}_{n-k}$ je enako

$$\nu = k(n - k) + k(k - 1)/2 - n + 1.$$

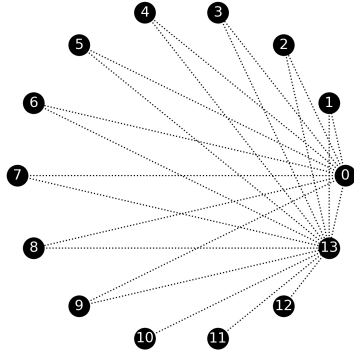
To preprosto sledi iz števila njegovih povezav.

Hipoteza 3.5. Z $G_{n,\nu}$ označimo graf reda n , ki za dano ciklometrično število ν doseže maksimalno vrednost DKZI, tedaj velja:

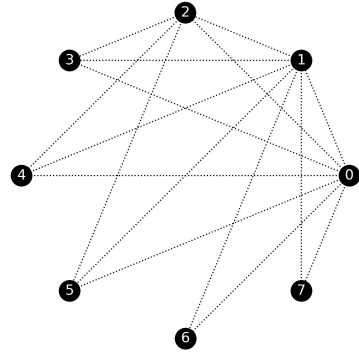
1. Naj bo Z_n zvezda, \overline{K}_n prazen graf ter K_1 enovozliščen graf. Za poljuben ν in za vsak $n \geq \nu + 2$ velja $G_{n,\nu} = (Z_\nu \cup \overline{K}_{n-\nu-2}) + K_1$ in $cM_2(G_{n,\nu}) = n(n - 1)(n - 2) + \nu(\nu^2 + \nu - 8).$
2. Naj bo $\lceil (3 + \sqrt{1 + 8\nu})/2 \rceil \leq n < \nu + 2$. Naj bo (a, b) prvi celoštevilski par, ki zadošča enačbi $b = (1 + a)(4 + a - 2n)/2 + \nu$, in pogojema $0 \leq a \leq n - 3$

ter $1 \leq b \leq n - 1 - a$. Tedaj velja:

$$\begin{aligned}
\text{cM}_2(G_{n,\nu}) = & ((n-1)^2 - (2+a+b)^2) (2+a) + \\
& + ((2+a+b)^2 - (3+a)^2) b \\
& + ((n-1)^2 - (3+a)^2) 2b \\
& + ((n-1)^2 - (3+a)) ab \\
& + ((n-1)^2 - (2+a)^2) 2(n-3-a-b) \\
& + ((n-1)^2 - (2+a)^2) a(n-3-a-b)
\end{aligned}$$



(a) Graf reda 14 z ciklomatičnem številom 9. Primer, ki ga razreši prva točka hipoteze 3.5



(b) Graf reda 8 z ciklomatičnem številom 9. Primer, ki ga razreši druga točka hipoteze 3.5

Slika 3: Grafa, ki glede na svoje število vozlišč ter ciklomatično število dosežeta maksimum DKZI vrednosti.

Opomba 3.6. Hipoteza 3.5 v celoti razreši problem maksimalnega DKZI pri grafih z danim redom n ter ciklomatičnem številom ν .

Ob predpostavki, da hipoteza velja, prikažimo tabelo maksimalnih DKZI vrednosti za dana parametra n ter ν . Na njej pa odebeljeno označimo tiste vrednosti DKZI, ki nam jih narekuje izrek 2.4. Vidimo, da se naša hipoteza z njimi ujema povsod koder se lahko. Prav tako se hipoteza ujema z vsemi rezultati, ki jih prineseta metodi (MILP) in (SA).

n	ν	$\text{cM}_2(G_{n,\nu})$	n	ν	$\text{cM}_2(G_{n,\nu})$	n	ν	$\text{cM}_2(G_{n,\nu})$	n	ν	$\text{cM}_2(G_{n,\nu})$
3	1	0	6	5	148	14	9	2922	14	14	3930
4	1	18	7	5	320	15	9	3468	15	14	4972
5	1	54	8	5	446	16	9	4098	16	14	6188
6	1	114	9	5	614	17	9	4818	17	14	6908
7	1	204	10	5	830	18	9	5634	18	14	7724
8	1	330	11	5	1100	6	10	0	7	15	0
9	1	498	12	5	1430	7	10	282	8	15	528
10	1	714	13	5	1826	8	10	544	9	15	918
11	1	984	14	5	2294	9	10	816	10	15	1512
12	1	1314	15	5	2840	10	10	1202	11	15	1878
13	1	1710	16	5	3470	11	10	1708	12	15	2400
14	1	2178	17	5	4190	12	10	2340	13	15	3084
15	1	2724	18	5	5006	13	10	2736	14	15	3936
16	1	3354	5	6	0	14	10	3204	15	15	4962
17	1	4074	6	6	138	15	10	3750	16	15	6168
18	1	4890	7	6	300	16	10	4380	17	15	7560
4	2	20	8	6	540	17	10	5100	18	15	8376
5	2	56	9	6	708	18	10	5916	8	16	456
6	2	116	10	6	924	7	11	252	9	16	906
7	2	206	11	6	1194	8	11	600	10	16	1470
8	2	332	12	6	1524	9	11	844	11	16	2008
9	2	500	13	6	1920	10	11	1208	12	16	2490
10	2	716	14	6	2388	11	11	1698	13	16	3140
11	2	986	15	6	2934	12	11	2320	14	16	3964
12	2	1316	16	6	3564	13	11	3080	15	16	4968
13	2	1712	17	6	4284	14	11	3548	16	16	6158
14	2	2180	18	6	5100	15	11	4094	17	16	7540
15	2	2726	6	7	144	16	11	4724	18	16	9120
16	2	3356	7	7	290	17	11	5444	8	17	398
17	2	4076	8	7	520	18	11	6260	9	17	918
18	2	4892	9	7	840	7	12	240	10	17	1440
4	3	0	10	7	1056	8	12	558	11	17	2184
5	3	72	11	7	1326	9	12	900	12	17	2620
6	3	132	12	7	1656	10	12	1236	13	17	3230
7	3	222	13	7	2052	11	12	1704	14	17	4020
8	3	348	14	7	2520	12	12	2310	15	17	4996
9	3	516	15	7	3066	13	12	3060	16	17	6164
10	3	732	16	7	3696	14	12	3960	17	17	7530
11	3	1002	17	7	4416	15	12	4506	18	17	9100
12	3	1332	18	7	5232	16	12	5136	8	18	360
13	3	1728	6	8	102	17	12	5856	9	18	960
14	3	2196	7	8	296	18	12	6672	10	18	1428
15	3	2742	8	8	510	7	13	168	11	18	2142
16	3	3372	9	8	820	8	13	528	12	18	2796
17	3	4092	10	8	1232	9	13	990	13	18	3360
18	3	4908	11	8	1502	10	13	1292	14	18	4110
5	4	52	12	8	1832	11	13	1732	15	18	5052
6	4	168	13	8	2228	12	13	2316	16	18	6192
7	4	258	14	8	2696	13	13	3050	17	18	7536
8	4	384	15	8	3242	14	13	3940	18	18	9090
9	4	552	16	8	3872	15	13	4992	8	19	250
10	4	768	17	8	4592	16	13	5622	9	19	888
11	4	1038	18	8	5408	17	13	6342	10	19	1440
12	4	1368	6	9	72	18	13	7158	11	19	2112
13	4	1764	7	9	324	7	14	110	12	19	3024
14	4	2232	8	9	516	8	14	516	13	19	3536
15	4	2778	9	9	810	9	14	948	14	19	4240
16	4	3408	10	9	1212	10	14	1382	15	19	5142
17	4	4128	11	9	1728	11	14	1788	16	19	6248
18	4	4944	12	9	2058	12	14	2344	17	19	7564
5	5	42	13	9	2454	13	14	3056	18	19	9096

4 Preverjanje manjših grafov

V tem razdelku empirično preverimo doseganje minimalnih in maksimalnih vrednosti drugega komplementarnega Zagrebskega indeksa $cM_2(G)$ za vse povezane grafe majhnega reda n . Postopek je sledeč:

1. Sistematično generiramo vse neizomorfne povezane grafe za izbrana števila vozlišč ($n = 3, 4, 5, 6, 7, 8$).
2. Za vsak graf izračunamo $cM_2(G)$ po definiciji.
3. Zabeležimo grafe z minimalno in maksimalno vrednostjo indeksa.
4. Preverimo, ali ima graf z maksimalnim indeksom obliko $K_k + \bar{K}_{n-k}$, kot napoveduje izrek.

V spodnji tabeli je za vsako število vozlišč n prikazana minimalna in maksimalna dosežena vrednosti komplementarnega drugega zagrebskega indeksa $cM_2(G)$ ter pripadajoč parameter k .

n	Min cM_2	Je join	k	Max cM_2	k
3	0	Da	2	6	1
4	0	-	-	24	1
5	0	-	-	72	2
6	0	-	-	168	2
7	0	-	-	324	3
8	0	-	-	600	3

Pri minimalnih vrednostih indeksa se pogosto pojavljajo grafi, kjer je večina vozlišč povezanih oziroma je skoraj celoten graf popoln, medtem ko je preostali del izoliran. Zaradi tega so razlike med kvadrati stopenj sosednjih vozlišč zelo majhne ali celo ničelne. Iz tabele je razvidno, da za vse obravnavane vrednosti $n \leq 8$ minimalno vrednost indeksa $cM_2(G)$ dosežejo grafi, ki so regularni ali ciklični, saj imajo vozlišča enako stopnjo, kar zmanjša razliko kvadratov stopenj na povezavah na nič. Posledično je minimalna vrednost indeksa enaka nič.

Pri maksimalnih vrednostih indeksa pa prevladujejo grafi, ki so izomorfni grafu oblike $K_k + \bar{K}_{n-k}$, torej sestavljeni iz popolnega grafa z k vozlišči in nepovezanih vozlišč z ostankom $n - k$, med katerima so vse možne povezave. Ti grafi zaradi močne razlike v stopnjah vozlišč med komponentama dosežajo največje vrednosti indeksa. Iz tabele je razvidno da so bile maksimalne vrednosti vedno dosežene pri takšnih strukturah, kar je skladno z trditvijo 1.2.

Na slikah so prikazani minimalni in maksimalni grafi za $n = 3, 4, 5$.

5 Metaheuristične metode

Metaheuristika je množica algoritemskih konceptov in strategij visoke ravni, ki se uporabljajo za definiranje heuristične metode, primerne za širok nabor optimizacijskih problemov. Iščejo dovolj dobre rešitve kompleksnih problemov, kjer je podrobno iskanje najboljše rešitve nemogoče ali pa traja predolgo.

Za večje grafe ($n \geq 20$), kjer točne metode (MILP) postanejo računsko prezahtevne, sv uporabili metahevristiko **Simulated Annealing**. To je stohastična

optimizacijska metoda, ki začne z naključno rešitvijo in jo iterativno izboljšuje z zamenjavo povezav v grafu. Na začetku (pri visoki temperaturi) algoritem sprejema tudi slabše rešitve, kar omogoča izogibanje lokalnim optimumom. S časom temperatura pada in algoritem konvergira k dobri rešitvi.

6 Vzorci za minimalne in maksimalne grafe

Pri minimalnih grafih za ciklometrično število k so minimalni grafi strukturirani kot cikel C_n z k dodatnimi povezavami. Te dodatne povezave so razporejene enakomerno po ciklu, kar zagotavlja majhne razlike med stopnjami sosednjih vozlišč. Pri večjih n ta vzorec postane stabilen, saj si grafi postajajo strukturno podobni.

Za maksimalne grafe pri majhnih n maksimalne vrednosti dosegajo grafi z zvezdasto strukturo, kjer ima eno centralno vozlišče visoko stopnjo, ostala pa nizko. Ko n narašča, se struktura razvije v join graf oblike $K_j + \overline{K}_{n-j}$. Tu je K_j poln graf z j vozlišči, \overline{K}_{n-j} pa množica izoliranih vozlišč, povezanih le na K_j . Ta struktura ustvari velika razlika med stopnjami: vozlišča v K_j imajo stopnjo blizu n , zunanja pa okoli j . Pri večjih k se začnejo dodajati povezave tudi med zunanjimi vozlišči, vendar osnovna zvezdasta oblika ostane prepoznavna.

Literatura

- [1] H. Gao, *Extremal graphs with maximum complementary second zagreb index*, AIMS Mathematics **10**(7) (2025) 16105–16116, dostopno na <https://www.aimspress.com/article/doi/10.3934/math.2025721>.
- [2] H. Saber in dr. *On a conjecture concerning the complementary second zagreb index*, arXiv preprint arXiv:2501.01295 (2025), dostopno na <https://arxiv.org/abs/2501.01295>.
- [3] Wikipedia contributors, *Cubic equation (mathematics)* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*, 2025, [ogled 8.12.2025], dostopno na https://en.wikipedia.org/wiki/Cubic_equation.