Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko

AZI in AZI_α mere

Nikolaj Candellari, Marija Janeva

Ljubljana, 2019

AZI in AZI_α mere

Nikolaj Candellari, Marija Janeva

1. Navodilo naloge

Povečani zagrebški indeks ali s kratico-AZI grafa $G(V,E)$ z n vozlišči je vrednost definirana kot:

$$AZI(G) = \sum_{v_iv_j \in E} [d_id_j/(d_i + d_j - 2)]^3$$

kjer je $V = \{v_0, v_1, \cdots, v_{n-1}\}$, $\quad n \geq 3$ in d_i označuje stopnjo vozlišča v_i grafa G. Kot varianta dobro poznane metode *"atom-bond"* povezljivostnega indeksa se je AZI izkazal kot najboljšega pri predvidevanju za kombinacijo fizikalno-kemijskih lastnosti na grafih, označenimi s topološkimi indeksi po stopnji vozlišč. Pred kratim je bil rešen problem ekstremalnih vrednosti AZI mere na drevesih z n vozlišči. Dodajmo še, da AZI_α dobimo iz AZI z zamenjavo kubiranja s potenciranjem na α.
Rešite nasledja problema:

(1) Med grafi s samo enim ciklom na n vozliščih poiščite tiste, ki imajo minimalne in maksimalne AZI vrednosti.
(2) Med drevesi na n vozliščih poiščite tiste, ki imajo maksimalne in minimalne AZI_α vrednosti. Poskus izvajajte za različne vrednosti α.

2. Reševanje problema

2.1. **1. problem.** Reševanje tega dela naloge se bomo lotili z postavljanjem hipotez na enocikličnih grafih z malo vozlišči. Zdi se nam da bomo maksimalno vrednost AZI dosegali na grafih, ki imajo največji cikel (sepravi so stopnje vseh vozlič enake 2). Predvidevanje kje bomo dobili minimalno vrednost je nekoliko težje napovedljiva, vendar se zdi, da bodo v ospredju grafi, ki imajo eno vozlišče zelo visoke stopnje in čim več vozlišč 1 stopnje. Podobno se da pokazati, da ima minimalno AZI vrednost med drevesi graf v obliki zvezde (sledi iz članka navedenega v virih). V SAGE-u bomo torej definirali funkcijo, ki bo znala zgenerirati vse enociklične grafe z n vozlišči ter nato izračunala in primerjala vredosti med sabo.

2.2. **2. problem.** V tem delu naloge se bomo osredotočili na grafe brez ciklov. Podobno kot v prvem delu naloge bomo tudi v tem delu postavljali hipoteze na grafih z malo vozlišč. Najprej bomo ugotovili na katerih grafih doseže minimalno in maksimalno AZI_α vrednost. Začeli bomo pri $\alpha = 0$ in potem bomo primerjali z različnimi vrednostmi α. Zanimalo nas bo ali bo vrednost α vplivala na maksimalno in minimalno AZI_α vrednost pri določenem številu vozlišč (pri enakem n-ju).

3. Viri

(1) $https:$
$//www.researchgate.net/publication/336837572_Complete_Characterization_of_Trees_with_Max$