AZI in AZI_α mere

Nikolaj Candellari, Marija Janeva

10.1.2020

1 Navodilo naloge

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

$$AZI(G) = \sum_{v_i v_j \in E} [d_i d_j / d_i + d_j - 2]^3 = 1$$

kjer je $V = \{v_0, v_1, \ldots, v_{n-1}\}$; $n > 2$ 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 vrednosti mnogih fizikalno-kemijskih lastnosti na grafih, označenih 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:

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

2 Direktna analiza

Pri obeh delih naloge smo za problem iskanja maksimalne in minimalne AZI in AZI_α vrednosti na grafih z malo vozliščih uporabili direktno metodo. Ta je poiskala vse ustezne grafe, jih spravila v slovar in vsakemu priredila AZI vrednost. Na koncu je iz slovarja vrnila ekstermalne vrednosti in pripadajoči graf. Ta metoda je sicer natančna (z ozirom na numerične napake) vendar vzame zelo veliko časa, saj z naraščajočim številom vozlišč število grafoveksponentno raste. Zato smo ta postopek uporabili le na grafih z 8 vozlišči ali manj.

2.1 Psevdokoda

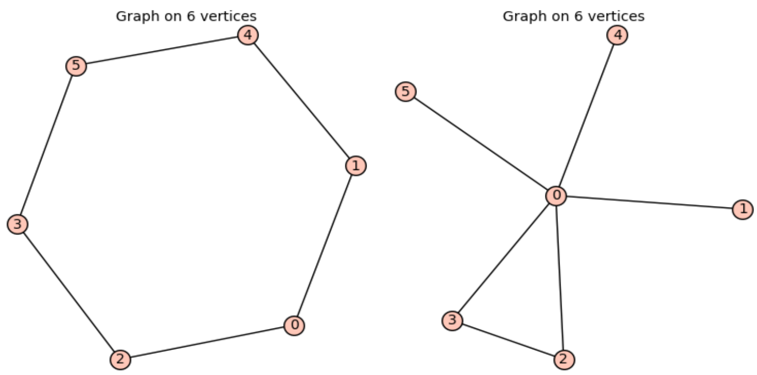
```
 eno_ciklicni =[]
for G in graphs(5, size=5):
    if G.is_connected():
        if len(G.cycle_basis('vertex')) == 1:
            eno_ciklicni.append(G)

AZI_vred = {}
for G in eno_ciklicni:
    a = AZIvrednost(G, 3)
    AZI_vred[a] = (G)
```

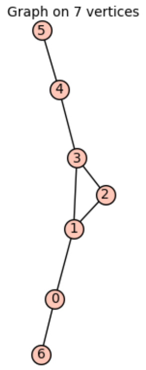
2.2 Rezultati direktne analize

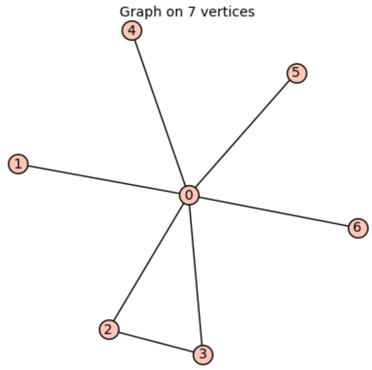
Pri analizi enocikličnih grafov na malo vozliščih je očitno, da so pripadajoči grafi za minimalno *AZI* vrednost zvezdaste oblike. Za maksimalne grafe je težje določiti pameten zaključek, se pa zdi, da ima maksimalen graf kar se da malo listov.

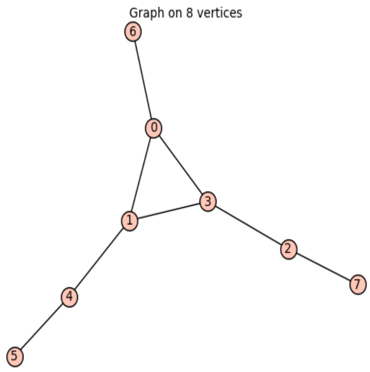
DIREKTNA ANALIZA			
st. vozlišč	MAX	MIN	ST.GRAFOV
4	32,0	27,4	2
5	40,0	28,7	5
6	48,0	29,9	13
7	59,4	30,9	33
8	69,5	31,9	89

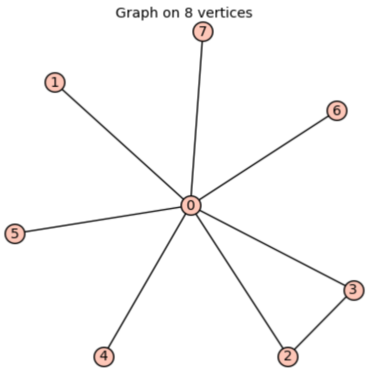
Maksimalni (levi) in minimalni (desni) grafi







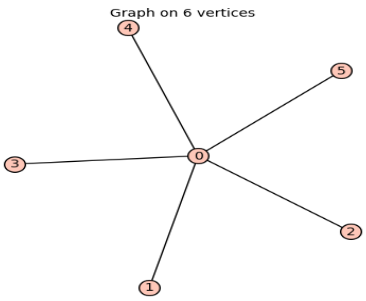




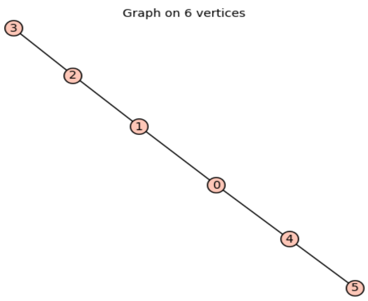
Za drugi del naloge, smo pri majhnih drevesih ugotovili, da je minimalna AZI_α vrednost pri $\alpha > 0$, zvezdaste oblike. Zanimivo je, da pri $-\alpha$ ti grafi dosežejo maksimalne vrednosti. Zdi se nam, da ta opazka pri večanju števila vozlišč n ne bo veljala.

Maksimalni grafi

$\alpha = -3$

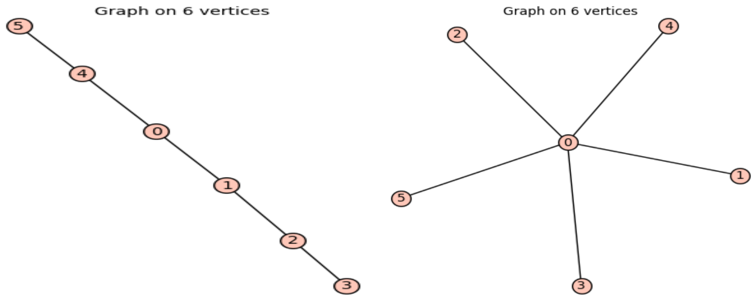


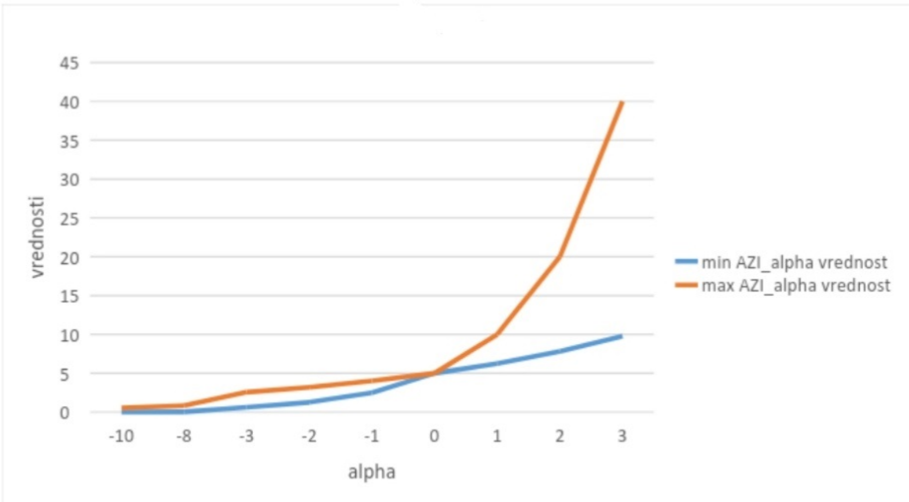
$\alpha = 3$



Minimalni grafi

$\alpha = -3$ $\alpha = 3$





Iz zgornjega grafa je razvidno, da minimalna in maksimalna AZI vrednost v odvisnosti od α strogo naraščata in se dotikata v $\alpha = 0$

3 Analiza z uporabo algoritmoma Simulating Annealing

Pri iskanju ekstremnih vrednosti na grafih z več kot 8 vozlišči smo uporabili *Simulating Annealing* algoritem. Najprej s pomočjo vgrajenih fukcij generiramo začetni graf, ki ustreza našim kriterijem (v prvem delu naloge mora veljati, da je graf enocikličen, v drugem pa mora biti graf drevo) na tem začetnem grafu pa poženemo naš algoritem. Algoritem deluje v dveh korakih:

- spreminjanje trenutnega grafa
- primerjanje AZI vrednosti trenutnega in do sedaj najboljšega grafa

Pri tem moramo poudariti, da spreminjanje trenutnega grafa poteka tako, da trenutnemu grafu odvzamemo eno povezavo. Nato želim naključno dodati novo povezavo vendar

moramo pri tem zadostiti pogoju enocikličnosti. Zato preverimo katero od povezav smo od grafa odstarnili. Če je bila odvzeta povezava drevesna moramo novo dodati tako, da ponovno povežemo obe komponenti. Če pa graf ostane povezan moramo novo povezavo dodati na način, da ustvarimo cikel. V našem primeru bo katera koli nova povezava temu zadostila.
Za drugu del naloge poganjamo algoritem na drevesih zato je pri generiranju trenutnega grafa tako ali tako možna samo prva varianta.

3.1 Psevdokoda

Koda za generiranje naključnega (enocikličnega) grafa.

```
def generiranje_grafa(n):
    A = graphs.RandomTree(n)
    A.add_edge(A.complement().random_edge(labels=False))
    return A
```

***Simulating Annealling* algoritem.**

```
from random import choice
def maxima(graf, n=100000, alpha=3):
    i = 0
    najboljsa = trenutna = AZIvrednost(graf, alpha)
    najboljsi_graf = graf
    for j in range(n):
        T = n/(j+1)
        e = graf.random_edge(labels=False)
        i += 1
        K = Graph(graf)
        if i > n:
            return(AZIvrednost(K, alpha))
        K.delete_edge(e)
        if K.is_connected():
            e = K.complement().random_edge()
        else:
            A, B = K.connected_components()
            e = (choice(A), choice(B))
        K.add_edge(e)
        a = AZIvrednost(K, alpha)
        if a > najboljsa:
            najboljsi_graf = K
            najboljsa = a
        if a > trenutna or exp((trenutna - a) / T) > random():
            graf = K
            trenutna = a
    najboljsi_graf.show()
```

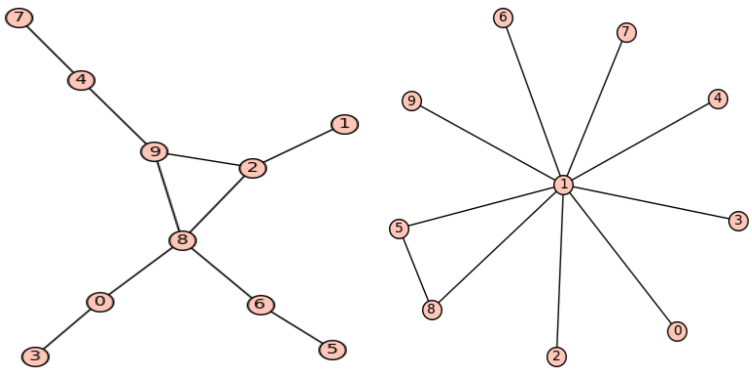
```
return (najboljsi_graf, najboljsa)
```

3.2 Rezultati

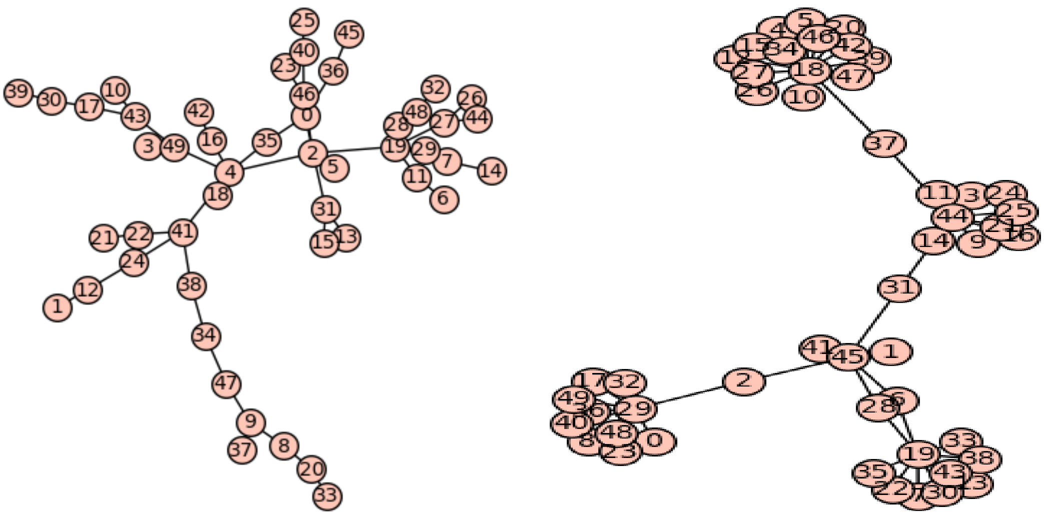
Pri analizi AZI vrednosti na enocikličnih grafih ugotovimo, da se z večanjem števila vozlišč hipoteza o obliki zvezde grafa z minimalno vrednostjo ne uresniči v celoti. Morda je krivo tudi dejstvo, da za večje grafe izvedemo premalo korakov (mi smo jih izvedli za vsak algoritem okoli 100.000). Morda bi ob večjem številu ponovitev grafi na koncu le prišli zvezdaste oblike. Ne glede na to pa je razvidno, da imajo grafi, ki dosežejo minimalno vrednost, obliko (nekaj) povezanih zvezd. Za grafe z maksimalnimi vrednostmi drži načelo zmanjševanja števila listov vendar ne popolnoma, saj bi v nasprotnem tvorili en sam velik cikel (primer tega je podan že pri $n = 8$).

Maksimalni (levi) in minimalni (desni) grafi

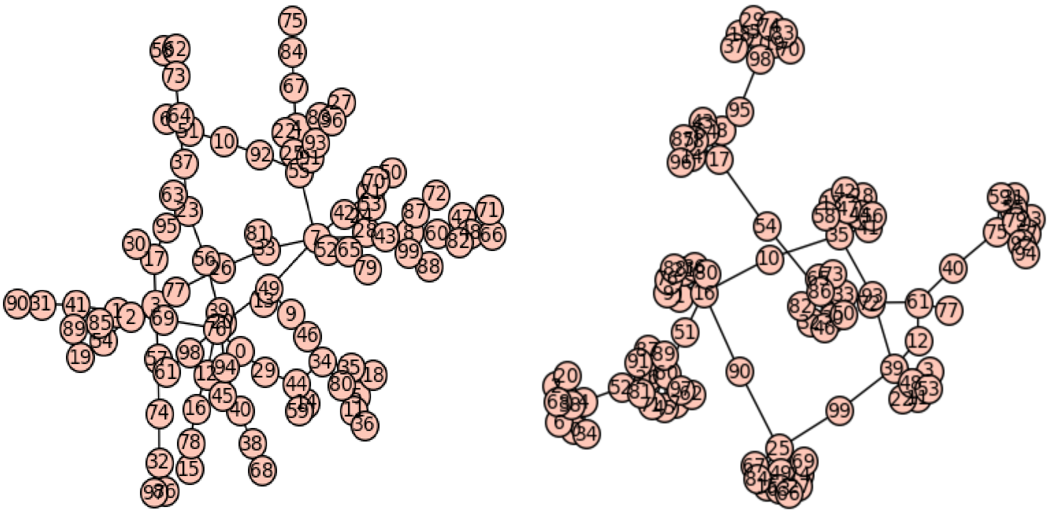
$n = 10$



$n = 50$



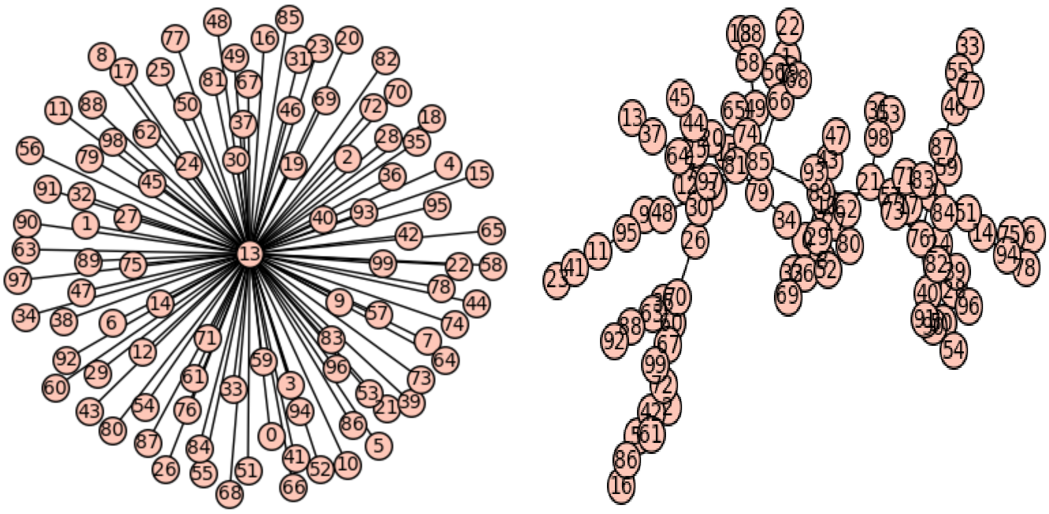
$n = 100$



Na drevesih pri več vozliščih moram ovreči zgornjo hipotezo o usklajenosti dreves glede na predznak α. Pri maksimalni vrednosti za α in minimalni vrednosti za $-\alpha$ se grafa torej ne ujemata. Morda bi se grafi po več korakih manj razlikovali vendar dvomimo, da bi prišli identični. Tako kot pri enocikličnih grafih se zvezdasta oblika za dano število korakov ne ohranja pri večanju števila vozlišč.

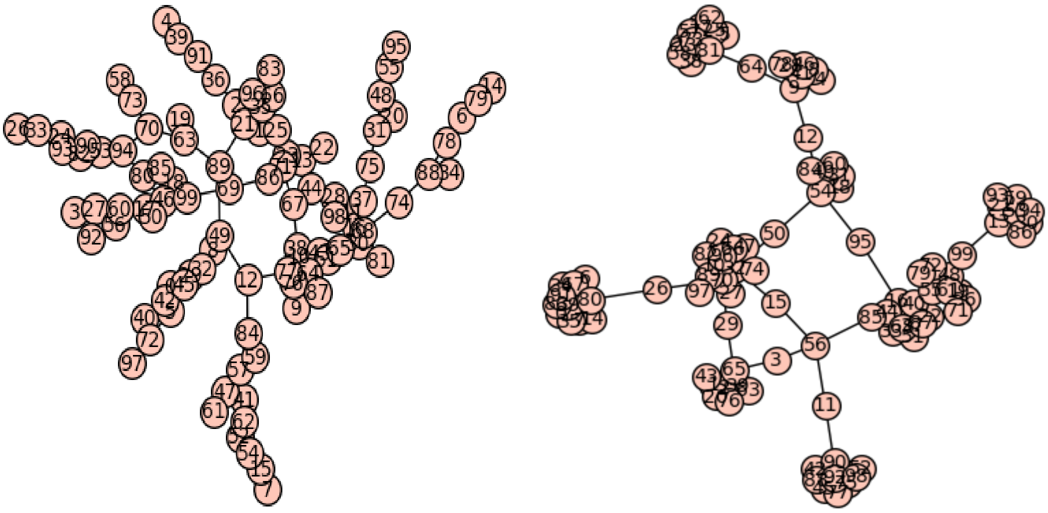
Maksimalni grafi pri $n = 100$

$\alpha = -10$ $\alpha = 10$



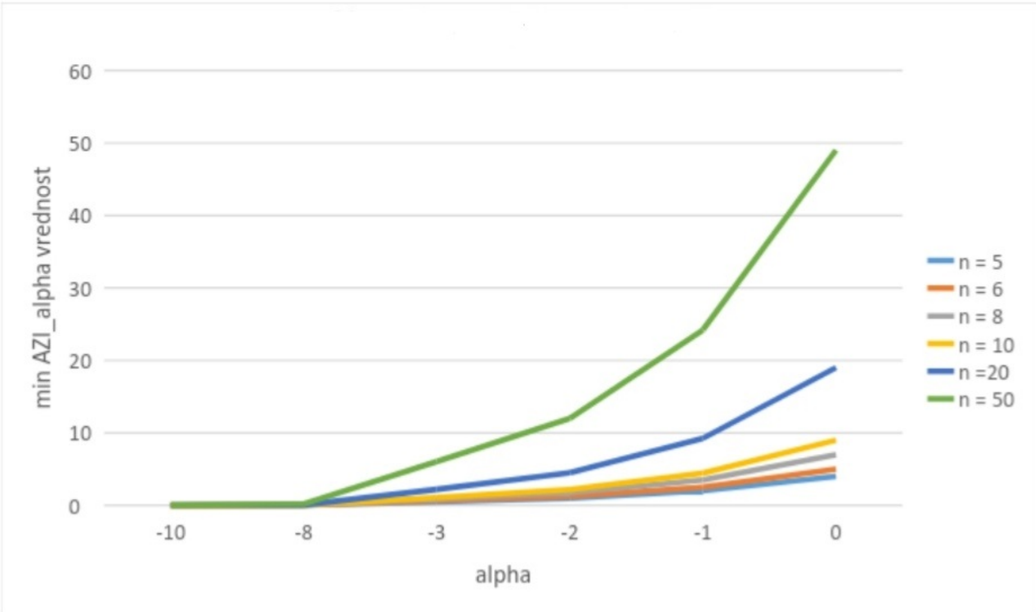
Minimalni grafi pri $n = 100$

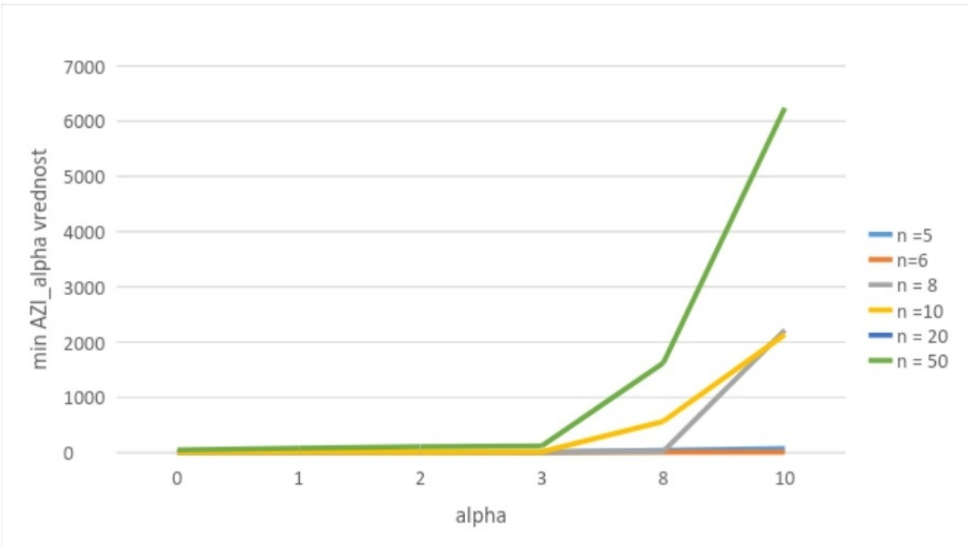
$\alpha = -10$ $\alpha = 10$



Iz spodnjih grafov vidimo kako se gibljejo minimalne in maksimalne AZI_α vrednosti ob povečevanju α ter povečevanju števila vozlišč. AZI_α vrednosti strogo naraščajo, kar je posledica večanja števila vozlišč.

Minimalna AZI_α vrednost





Maksimalna AZI_α vrednost