Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko

AZI in AZI_α mere

Nikolaj Candellari, Marija Janeva

Ljubljana, 2019

1. **Navodilo naloge**

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

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

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 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:

(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 vsaj enem grafu.Eden od tistih bo graf, ki ima največji cikel (stopnje vseh vozlič so enake 2). Med vsemi drevesi ima graf v obliki zvezde minimalno AZI vrednost. To bomo uporabili pri iskanju enocikličnih grafov z minimalno AZI vrednostjo. To naredimo tako, da grafu zvezda dodamo en rob in dobimo enocikličen graf z n vozlišči. Se pravi, radi bi imeli čimveč vozlišč s stopnjo 1. 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 drevesne grafe. Podobno kot v prvem delu naloge bomo tudi v tem delu postavljali hipoteze na grafih z malo vozlišč in z njihovo pomočjo ugotavljali na katerih grafih doseže AZI_α ekstremalni vrednosti. Vemo da je pri $\alpha = 0$ vrednost AZI_α na vseh drevesih enaka in je enaka številu povezav grafa. Podobno vemo, da poznamo rešitev problema pri $\alpha = 3$. Želeli si bomo ugotoviti ali obstaja kakšno splošno pravilo v odvisnosti od α za reševanje maksimalnega problema na grafih z n vozlišči. Zanimalo nas bo tudi kako pri določenem številu oglišč sprememba vrednosti α vpliva na maksimalno in minimalno vrednost AZI_α.

3. **Viri**

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