Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Splošni Somborjev indeks

Pecoraro Eliza Katarina, Žefran Kaja

november 2025

1 Uvod

Naj bo $G = (V, E)$ graf sestavljen iz množice vozlišč $E(G)$ in množice povezav $V(G)$, kjer je $|E(G)| = n$ število vozlišč in $|V(G)| = m$ število povezav. Stopnja vozlišča $d_G(v_i)$ za neko vozlišče $v_i \in E(G)$ predstavlja število vozlišč s katerimi si je to sosednje, torej med njimi obstaja povezava. Največjo stopnjo vozlišča grafa G označimo z $\Delta(G)$ oziroma, kot v nadaljevanju tudi le kot Δ.

V kemijski matematiki imajo zelo pomembno vlogo topološki indeksi, ki temeljijo na stopnjah vozlišč. Ti so uporabljeni v analizah in pri določanju napovedi. Gre za numerične vrednosti, ki jih dodelimo molekulam oziroma njihovim strukturnim predstavitvam (grafom). Eden izmed teh topoloških indeksov je *splošen Somborjev indeks*, ki ga bomo bolj podrobno obravnavali pri tem projektnem delu.

Definicija 1.1 *Somborjev indeks $SO_\alpha(G)$ grafa G definiramo kot:*

$$SO_\alpha(G) = \sum_{v_i, v_j \in E(G)} (d_G(v_i)^2 + d_G(v_j)^2)^\alpha$$

kjer $d_G(v_i) \in V(G)$ predstavlja stopnjo vozlišča $v_i \in E(G)$, α pa je poljuben realen parameter.

Za $\alpha = 0$ je $SO_0(G)$ enak številu povezav m na grafu G. Za drevo T z n vozlišči, pa je $SO_0(T)$ enak $n - 1$. Splošen Somborjev indeks $SO_{1/2}(G)$ obravnavamo, ko je $\alpha = 1/2$.

2 Cilj projekta

Graf reda n, ki ne vsebuje ciklov imenujemo drevo n-vozlišč. Zanj uporabimo oznako $T \in \tau(n, \Delta)$.

V tem projektnem delu želimo indentificirati drevesa z največjo vrednostjo Somborjevega indeksa znotraj razreda dreves n-vozlišč $\tau(n, \Delta)$, stopnje Δ in parametrom $\alpha \in (0, 1)$.

Da bi rešili ta problem, moremo najprej razumeti, kako sama strukura dreves vpliva na Somborjev indeks za različne vrednosti α. To lahko razdelimo na dva posamezna dela:

- $\alpha > 1$ in $\alpha \in [-1, 0)$
- $\alpha < 0$ in $\alpha > 0$

2.1 $\alpha > 1$ in $\alpha \in [-1, 0)$

- Za $\alpha > 1$: V tem primeru višje stopnje vozlišč bolj vplivajo na vrednost indeksa, saj člen $(d_G(v_i)^2 + d_G(v_j)^2)^\alpha$ zanje hitro narašča. Zato bomo v tem primeru želeli drevesa z večjimi stopnjami. Drevo, ki je za ta primer najboljše je zvezdno drevo, saj ima centralno vozlišče najvišjo možno stopnjo, vse druge stopnje pa so nizke.
- Za $\alpha \in [-1, 0)$: Ko bo α negativen, večje stopnje vozlišč vplivajo na zmanjšanje indeksa. Zato želimo drevesa, kjer so stopnje vozlišč manjše. Drevo, ki je za ta primer najbolše je potno drevo.

2.2 $\alpha < 0$ in $\alpha > 0$

- Za $\alpha < 0$:
- Za $\alpha > 0$:

3 Strukura dela

Pri manjših grafih oziroma drevesih bomo te iskali sistematično, za večje se bomo tega lotili stohastično. Ločeno bomo preverili kaj se dogaja pri različnih vrednostih Δ in $\alpha \in (0, 1)$.