Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Splošni Somborjev indeks

Poročilo projekta

Pecoraro Eliza Katarina, Žefran Kaja

december 2025

1 Teoretični uvod

Naj bo $G = (V, E)$ graf, sestavljen iz množice vozlišč $V(G)$ in množice povezav $E(G)$, kjer je $|V(G)| = n$ število vozlišč in $|E(G)| = m$ število povezav. Stopnja vozlišča $d_G(v)$ predstavlja število povezav, ki so incidentne z vozliščem v. Največjo stopnjo grafa G označimo z $\Delta(G)$ oziroma, kadar ni dvoumnosti, le z Δ.

V kemijski matematiki imajo pomembno vlogo topološki indeksi, ki temeljijo na stopnjah vozlišč. Gre za numerične invariante grafov, ki se uporabljajo pri modeliranju molekulskih struktur in napovedovanju njihovih lastnosti. Eden izmed takšnih indeksov je *splošni Somborjev indeks.*

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

$$SO_\alpha(G) = \sum_{\{u,v\} \in E(G)} \left(d_G(u)^2 + d_G(v)^2\right)^\alpha,$$

kjer je $\alpha \in \mathbb{R}$ realen parameter.

Za $\alpha = 0$ je $SO_0(G) = |E(G)|$. Če je T drevo z n vozlišči, velja $SO_0(T) = n - 1$. V nadaljevanju se bomo osredotočili na primer $\alpha \in (0, 1)$.

2 Cilj projekta

V tem delu raziskave se omejimo na *drevesa*, saj ta predstavljajo osnovni, a hkrati dovolj raznolik razred grafov, pri katerem je mogoč popoln pregled vseh neizomorfnih struktur za manjše vrednosti n.

Razred vseh dreves reda n z največjo stopnjo največ Δ označimo z $\tau(n, \Delta)$. Cilj projekta je identificirati drevesa z največjo vrednostjo splošnega Somborjevega indeksa znotraj razreda $\tau(n, \Delta)$ za izbran parameter $\alpha \in (0, 1)$.

Posebej nas zanima vpliv:

- največje stopnje Δ,
- razporeditve stopenj v drevesu,
- izbire parametra α,

na vrednost indeksa in obliko ekstremnih dreves.

2.1 Vedenje indeksa pri različnih vrednostih parametra α

Čeprav se v projektu osredotočamo na interval $\alpha \in (0, 1)$, nam vpogled v obnašanje indeksa pri drugih vrednostih parametra pomaga pri razumevanju ekstremnih struktur.

- Za $\alpha > 1$ imajo večje stopnje vozlišč izrazit vpliv na vrednost indeksa, zato so ekstremna drevesa tista z zelo neenakomerno porazdelitvijo stopenj, kot je zvezdno drevo.
- Za $\alpha < 0$ velike stopnje indeks zmanjšujejo, zato so ugodna drevesa z enakomerno porazdeljenimi stopnjami, na primer potna drevesa.

Za $\alpha \in (0, 1)$ je funkcija $x \mapsto x^\alpha$ naraščajoča in konkavna, kar pomeni, da večje stopnje še vedno povečujejo vrednost indeksa, vendar z zmanjšanim prispevkom. Pričakujemo, da bodo ekstremna drevesa po strukturi nekje med zvezdnim in potnim drevesom.

3 Analiza grafov

V tem poglavju analiziramo obnašanje Somborjevega indeksa pri različnih vrednostih parametra α na grafih različnih velikosti. Celotna raziskava je omejena na drevesa, saj ta predstavljajo osnovni, a hkrati dovolj raznolik razred grafov, pri katerem je mogoč popoln pregled vseh neizomorfnih struktur. Z analizo želimo raziskati vpliv parametra $\alpha \in (0, 1)$ na vrednost Somborjevega indeksa ter preučiti vpliv stopnje razvejanosti in števila vozlišč.

V nadaljevanju najprej obravnavamo majhne grafe, kjer je zaradi omejenega števila vozlišč mogoč izčrpen računski pregled vseh neizomorfnih dreves, nato pa analizo razširimo še na večje grafe.

3.1 Majhna drevesa

Pri analizi majhnih grafov, ki vsebujejo vse do 10 vozlišč, opazimo izrazit in stabilen trend v obnašanju Somborjevega indeksa. Za vse uporabljene vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$ se izkaže, da je vrednost Somborjevega indeksa največja pri grafih z največjo možno maksimalno stopnjo Δ, glede na število vozlišč. To pomeni, da imajo vozlišča z največjim številom povezav oziroma z največjo stopnjo ključno vlogo pri velikosti indeksa, saj bistveno zaznamujejo celotno strukturo grafa.

V numerični analizi majhnih grafov smo uporabili vrednosti parametra

$$\alpha \in \{0.05, 0.45, 0.5, 0.55, 0.95\},$$

ki ležijo znotraj intervala $(0, 1)$. Izbrane vrednosti omogočajo opazovanje obnašanja indeksa v bližini mejnih vrednosti 0 in 1 ter v okolici srednje vrednosti 0.5. Rezultati so pokazali, da večja kot je vrednost parametra α, večja je tudi vrednost Somborjevega indeksa, ne glede na število vozlišč ali stopnjo razvejanosti grafa.

Za vsako fiksno število vozlišč n smo izvedli popoln računski pregled vseh neizomorfnih dreves. Za vsak graf smo najprej izračunali največjo stopnjo Δ, nato pa drevesa razvrstili v razrede glede na to vrednost. Znotraj vsakega razreda smo izračunali Somborjev indeks, definiran z

$$SO_\alpha(G) = \sum_{uv \in E(G)} (d_u^2 + d_v^2)^\alpha,$$

kjer d_u in d_v označujeta stopnji krajišč roba uv. Na ta način smo za vsak Δ določili drevo, pri katerem Somborjev indeks doseže največjo vrednost. Poleg tega smo za vsako izbrano vrednost parametra α določili tudi globalni maksimum Somborjevega indeksa med vsemi drevesi z n vozlišči.

Kot reprezentativen primer si oglejmo primer $n = 7$. Rezultati pokažejo, da Somborjev indeks za vse obravnavane vrednosti parametra α monotono narašča z naraščanjem maksimalne stopnje Δ. Globalni maksimum je v vseh primerih dosežen pri drevesu z $\Delta = 6$, kar ustreza zvezdastemu drevesu. To drevo vsebuje eno vozlišče stopnje 6, ki je povezano z vsemi preostalimi vozlišči, kar povzroči največji možni prispevek k vrednosti indeksa.

Opazimo tudi, da se z večanjem parametra α razlike med vrednostmi Somborjevega indeksa pri različnih vrednostih Δ še povečujejo. To pomeni, da večje vrednosti α dodatno poudarijo prispevek robov, ki povezujejo vozlišča z visokimi stopnjami, kar pride posebej do izraza pri zvezdastih drevesih.

Na podlagi izčrpne računske analize majhnih grafov lahko sklenemo, da za vsako obravnavano število vozlišč $n \leq 10$ in za vsak parameter $\alpha \in (0, 1)$ α-Somborjev indeks na razredu dreves doseže največjo vrednost pri grafih z največjo možno maksimalno stopnjo $\Delta = n - 1$. Z večanjem števila vozlišč se vrednost Somborjevega indeksa povečuje, vendar osnovni trendi, povezani z vplivom parametra α in strukture drevesa, ostajajo enaki. To omogoča smiselno primerjavo rezultatov med majhnimi in večjimi drevesi.

3.2 Velika drevesa

Pri analizi velikih grafov se osnovne lastnosti Somborjevega indeksa v določenem smislu ohranijo, vendar se v primerjavi z majhnimi grafi pojavijo pomembne strukturne razlike. Absolutne vrednosti indeksa z naraščanjem števila vozlišč sicer naraščajo, vendar grafi z največjo možno stopnjo razvejanosti Δ ne zagotavljajo več maksimalne vrednosti Somborjevega indeksa.

Pri velikih drevesih se izkaže, da ekstremna koncentracija povezav v enem vozlišču postane manj ugodna. Čeprav ima vozlišče z zelo veliko stopnjo pomemben prispevek k posameznim členom vsote v definiciji Somborjevega indeksa, se pri takšnih strukturah zmanjša število robov, ki povezujejo vozlišča z zmerno velikimi stopnjami. Posledično celotni prispevek vseh robov ni več optimalen.

Analiza nakazuje, da se maksimum Somborjevega indeksa pri velikih grafih pogosto doseže pri drevesih z vmesno stopnjo razvejanosti. Takšna struktura omogoča, da večje število robov prispeva k vsoti z dovolj velikimi vrednostmi izraza

$$(d_u^2 + d_v^2)^\alpha,$$

kar je pri večjih vrednostih parametra α ugodneje kot posamezni zelo veliki prispevki, ki jih ustvarja eno samo močno razvejano vozlišče.

Poleg tega se z naraščanjem števila vozlišč optimalna vrednost največje stopnje Δ postopoma zmanjšuje glede na velikost grafa. To kaže na obstoj prehoda v optimalni strukturi dreves: medtem ko so pri majhnih grafih optimalna drevesa z maksimalno razvejanostjo, pri velikih grafih optimalna struktura teži k zmerni razvejanosti in bolj uravnoteženi porazdelitvi stopenj.

Vpliv parametra $\alpha \in (0, 1)$ ostaja tudi pri velikih grafih bistven. S povečevanjem vrednosti parametra α se vrednost Somborjevega indeksa povečuje, vendar se hkrati okrepi pomen porazdelitve stopenj vozlišč v celotnem grafu. To potrjuje, da pri velikih grafih vrednost indeksa ni določena zgolj z lokalnimi ekstremi, temveč predvsem z globalno strukturo drevesa.

3.3 Računski pristop in generiranje podatkov

Analiza Somborjevega indeksa je bila izvedena z uporabo dveh različnih računskih pristopov, odvisno od velikosti obravnavanih dreves. Pri majhnih drevesih smo uporabili izčrpen, sistematičen pregled vseh neizomorfnih struktur, pri večjih drevesih pa smo zaradi računske zahtevnosti uporabili stohastično iskanje.

Majhna drevesa. Za majhne vrednosti števila vozlišč (do $n = 10$) smo generirali vsa neizomorfna drevesa dane velikosti. Za vsako drevo smo izračunali največjo stopnjo Δ ter vrednost α-Somborjevega indeksa za izbrane vrednosti parametra

$$\alpha \in \{0.05, 0.45, 0.5, 0.55, 0.95\}.$$

Drevesa smo nato razvrstili glede na največjo stopnjo in identificirali tista, pri katerih Somborjev indeks doseže maksimalno vrednost. Ta pristop omogoča natančno primerjavo vseh možnih struktur in jasen vpogled v vpliv razvejanosti na vrednost indeksa.

Velika drevesa. Pri večjih vrednostih n izčrpno generiranje vseh dreves ni več izvedljivo, zato smo uporabili stohastični pristop. Pri tem smo uporabili **iste vrednosti parametra α kot pri majhnih drevesih**, da so rezultati med seboj primerljivi. Algoritem začne z naključno izbranim drevesom in izvaja zaporedne lokalne spremembe strukture (npr. prevezave robov), pri čemer se ohrani lastnost, da je graf drevo. Vsaka sprememba je sprejeta le, če poveča vrednost Somborjevega indeksa.

Ker je število možnih vrednosti največje stopnje Δ pri velikih drevesih zelo veliko, smo stohastično preizkusili le nekatere reprezentativne vrednosti. Na primer, za drevo z $n = 80$ smo preizkusili

$$\Delta \in \{15, 30, 40, 50, 65\}.$$

Pri velikih drevesih se zvezdno drevo ne izkaže kot optimalna struktura. Razlog je v tem, da pri zelo veliki maksimalni stopnji Δ večina robov povezuje vozlišče z zelo visoko stopnjo z listi, kar omeji skupni prispevek ostalih robov. Drevesa z bolj uravnoteženo porazdelitvijo stopenj omogočajo, da večje število robov prispeva k vsoti v definiciji Somborjevega indeksa, kar je za $\alpha \in (0, 1)$ ugodneje.

Rezultati stohastičnega iskanja se lahko med posameznimi zagoni nekoliko razlikujejo, kar je pričakovano zaradi naključne narave algoritma. Kljub temu se dobljene optimalne strukture dosledno gibljejo okoli podobnih vrednosti največje stopnje in imajo primerljivo porazdelitev stopenj, kar potrjuje stabilnost opaženih strukturnih lastnosti.

Ker smo pri velikih drevesih uporabili iste vrednosti parametra α kot pri majhnih, lahko rezultate obeh pristopov med seboj neposredno primerjamo in tako dobimo celovit vpogled v vpliv α in razvejanosti na Somborjev indeks.

3.4 Povzetek ugotovitev

Na podlagi analize majhnih in velikih grafov smo ugotovili, da z naraščanjem vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$ vrednost α-Somborjevega indeksa monotono narašča, ne glede na velikost grafa. Ta lastnost se izkaže kot stabilna tako pri majhnih kot pri velikih drevesih.

Vpliv največje stopnje razvejanosti Δ se pri tem izkaže kot ključen, vendar se njegova vloga razlikuje glede na velikost grafa. Pri majhnih grafih je maksimum Somborjevega indeksa dosežen pri drevesih z največjo možno stopnjo razvejanosti, saj vozlišče z največ povezavami prispeva največji delež k vsoti v definiciji indeksa. Pri večjih grafih pa se optimalna vrednost Δ premakne proti vmesnim vrednostim, kar kaže, da indeks ni odvisen zgolj od lokalnih ekstremov, temveč predvsem od globalne porazdelitve stopenj v grafu.

Uporaba različnih vrednosti parametra α, vključno z vrednostmi v bližini 0, 0,5 in 1, je omogočila celovito analizo vpliva parametra na obnašanje indeksa. S tem smo pokazali, da parameter α ne vpliva zgolj na absolutno velikost Somborjevega indeksa, temveč tudi na relativni pomen posameznih strukturnih lastnosti grafa, zlasti razporeditve stopenj vozlišč.

Viri

- Ahmad S., Farooq R., Das K. C.: *General Sombor Index*. MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 94 (2020), 825–853.