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.

Graf reda n, ki ne vsebuje ciklov, imenujemo drevo z n vozlišči. Razred vseh dreves reda n z največjo stopnjo največ Δ označimo z $\tau(n, \Delta)$.

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.

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.

3 Analiza dreves

V tem poglavju analiziramo obnašanje splošnega Somborjevega indeksa pri različnih vrednostih parametra α na drevesih različnih velikosti. Z analizo želimo raziskati vpliv parametra $\alpha \in (0,1)$ na vrednost splošnega 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 Računski pristop in generiranje podatkov

Analiza splošnega 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 (za $n \leq 10$) smo generirali vsa neizomorfna drevesa dane velikosti. Za vsako drevo smo izračunali največjo stopnjo Δ ter vrednost Somborjevega indeksa za izbrane 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. 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 začetnim drevesom, ki zadošča danim omejitvam (število vozlišč in največja stopnja), ter nato drevo postopno izboljšuje z lokalnimi spremembami (izbrali smo list - vozlišče stopnje 1, ta list priključili na drugo vozlišče katerega stopnja po priključitvi ne preseže Δ). Pri vsakem koraku se iz trenutnega drevesa generira novo drevo z majhno strukturno spremembo, pri čemer se sprememba sprejme le, če ne zmanjša vrednosti Somborjevega indeksa.

Ker je število možnih vrednosti največje stopnje Δ pri velikih drevesih zelo veliko, smo stohastično preizkusili le nekatere reprezentativne vrednosti. Izbrali smo si:

$$\Delta \in \{2, 3, 4, 5, 10, \left\lfloor \frac{n}{4} \right\rfloor, \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor, n-1\}.$$

Na primer, za drevo z $n = 60$ smo opazovali vrednost pri $\Delta \in \{2, 3, 4, 5, 10, 15, 30, 59\}$.

3.2 Psevdokoda algoritma

Za boljši pregled nad izvedbo analize smo predstavili osnovno logiko algoritma v psevdokodi.

Sistematični pregled za majhna drevesa:

```
Za n = 1 do 10:
    Generiraj vsa neizomorfna drevesa T_n
    Za vsako drevo T:
        Izracunaj najvecjo stopnjo Delta(T)
        Izracunaj SO_alpha(T) za alpha v {0.05, 0.45, 0.5, 0.55, 0.95}
    Identificiraj drevesa z najvecjim SO_alpha
```

Stohastični pristop za velika drevesa:

```
Stohastični pristop za velika drevesa:
Za dano n in alpha:
    Za več začetnih dreves (n_starts):
        Nastavi drevo T naključno
        Ponovi n_steps:
            Izberi lokalno spremembo T'
            Če SO_alpha(T') > SO_alpha(T):
                Sprejmi spremembo
    Shrani drevo z največjim SO_alpha
```

3.3 Analiza majhnih dreves

Pri analizi majhnih grafov, ki vsebujejo vse do 10 vozlišč, opazimo izrazit in stabilen trend v obnašanju splošnega 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, torej pri $\Delta = n - 1$. To pomeni, da imajo vozlišča z največjim številom povezav oziroma z največjo stopnjo ključno vlogo pri velikosti indeksa, saj bistveno zaznamujejo celotno strukturo grafa.

Pri analizi majhnih grafov smo uporabili vrednosti parametra

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

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 ter drevesa razvrstili v razrede glede na to vrednost. Znotraj vsakega razreda smo izračunali vrednost Somborjevega indeksa

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

kjer d_u in d_v označujeta stopnji krajišč povezave uv, ter določili drevo, pri katerem indeks doseže največjo vrednost za dano Δ.

Poleg tega smo za vsako izbrano vrednost parametra α določili tudi globalni maksimum Somborjevega indeksa med vsemi drevesi z n vozlišči ter identificirali vrednost največje stopnje Δ, pri kateri se ta maksimum pojavi.

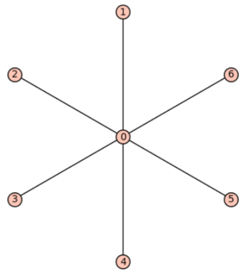
3.3.1 Primer za $n = 7$

Kot reprezentativen primer si oglejmo primer $n = 7$.

α	$\Delta = 2$	$\Delta = 3$	$\Delta = 4$	$\Delta = 5$	$\Delta = 6$
0.05	6.61	6.76	6.87	6.98	7.19
0.45	14.32	17.62	20.63	23.94	30.47
0.50	15.79	19.86	23.69	28.02	36.50
0.55	17.40	22.39	27.22	32.80	43.72
0.95	38.07	58.52	83.37	117.49	185.33

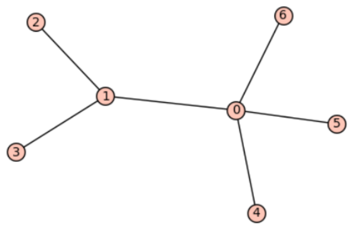
Tabela 1: Maksimalne vrednosti splošnega Somborjevega indeksa SO_α za drevesa reda $n = 7$ in vse možne maksimalne stopnje Δ.

Optimalno drevo pri fiksnem α: 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.



Slika 1: Optimalno drevo pri fiksnem α za $n = 7$ (enako za vse α).

Optimalno drevo pri fiksnem Δ: Rezultati kažejo, da je za vsako fiksno Δ vrednost Somborjevega indeksa monotono naraščajoča funkcija parametra α. Optimalno drevo za dano Δ se pri tem praviloma ne spremeni, temveč se z večanjem α povečuje zgolj absolutna vrednost indeksa. To pomeni, da parameter α ne vpliva na izbiro optimalne strukture pri fiksni Δ, temveč le poudarja prispevke povezav, ki povezujejo vozlišča z večjimi stopnjami.



Slika 2: Optimalno drevo pri fiksnem $\Delta = 4$ za $n = 7$ (enako za vse α).

Sklep: Na podlagi izčrpne računske analize majhnih grafov lahko sklenemo, da za vsako obravnavano število vozlišč $n \leq 10$ in za vsak parameter $\alpha \in (0, 1)$ 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. Poleg tega smo pri majhnih drevesih ugotovili, da je za fiksno največjo stopnjo Δ vrednost Somborjevega indeksa monotono naraščajoča funkcija parametra $\alpha \in (0, 1)$. Optimalna struktura drevesa za dano Δ se pri tem ne spreminja, temveč parameter α vpliva zgolj na absolutno velikost indeksa. Ta ugotovitev dodatno potrjuje, da ima razporeditev stopenj vozlišč ključno vlogo pri določanju optimalnih struktur, medtem ko parameter α deluje predvsem kot utež, ki poudarja prispevke posameznih povezav.

3.4 Analiza velikih dreves

Pri analizi dreves z večjim številom vozlišč se osnovne lastnosti splošnega Somborjevega indeksa v veliki meri ohranijo. Absolutne vrednosti indeksa z naraščanjem števila vozlišč pričakovano naraščajo, pri čemer se za vse obravnavane vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$ globalni maksimum še vedno doseže pri drevesih z največjo možno stopnjo, torej pri zvezdnem drevesu z $\Delta = n - 1$.

Analiza za večje vrednosti n na podlagi stohastičnega iskanja kaže, da se z naraščanjem največje dovoljene stopnje Δ vrednost Somborjevega indeksa monotono povečuje. Pri tem se struktura dreves, ki dosegajo največje vrednosti indeksa, postopno spreminja: za manjše vrednosti Δ so optimalna drevesa bolj razpršena, z več vozlišči zmernih stopenj, medtem ko se z naraščanjem Δ optimalna struktura vse bolj približuje drevesu z enim samim dominantnim vozliščem.

Rezultati stohastičnega iskanja tako potrjujejo, da tudi pri velikih drevesih zvezdno drevo doseže največjo vrednost Somborjevega indeksa za obravnavane vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$. Čeprav imajo pri vmesnih vrednostih Δ drevesa z bolj uravnoteženo porazdelitvijo stopenj relativno visoke vrednosti indeksa, te ne presežejo vrednosti, dosežene pri ekstremno razvejanih strukturah. To kaže, da je vpliv največje stopnje razvejanosti ključen tudi pri velikih grafih, pri čemer zvezdno drevo ostaja globalno optimalna struktura.

3.4.1 Primer za $n = 60$

Kot reprezentativen primer si oglejmo drevesa z $n = 60$ vozlišči. Zaradi velikega števila možnih struktur je bila analiza izvedena s stohastičnim iskanjem, pri čemer smo za različne vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$ in izbrane vrednosti največje stopnje Δ določili približne maksimalne vrednosti splošnega Somborjevega indeksa.

Rezultati so zbrani v Tabeli 2, kjer so prikazane maksimalne vrednosti indeksa za izbrane kombinacije parametrov α in Δ.

α	$\Delta = 2$	$\Delta = 3$	$\Delta = 4$	$\Delta = 5$	$\Delta = 10$	$\Delta = 15$	$\Delta = 30$	$\Delta = 59$
0.05	65.41	67.01	68.55	69.74	73.62	76.36	80.40	88.70
0.45	149.43	187.88	227.18	266.01	448.91	643.05	992.12	2315.66
0.50	165.69	212.42	267.23	319.65	554.70	810.62	1406.92	3481.50
0.55	183.73	239.82	307.23	377.35	728.17	1069.54	2017.48	5234.29
0.95	420.20	712.47	1081.62	1521.47	4408.70	9489.39	30651.90	136643.61

Tabela 2: Maksimalne vrednosti splošnega Somborjevega indeksa za drevesa reda $n = 60$ pri različnih vrednostih parametra α in maksimalne stopnje Δ.

Optimalno drevo pri fiksnem α: Podobno kot pri majhnih drevesih tudi pri $n = 60$ opazimo, da je za vsako obravnavano vrednost parametra α Somborjev indeks monotono naraščajoča funkcija maksimalne stopnje Δ. Globalni maksimum je v vseh primerih dosežen pri $\Delta = n - 1 = 59$, kar ustreza zvezdnemu drevesu z enim dominantnim vozliščem, povezanim z vsemi preostalimi vozlišči.

Čeprav pri vmesnih vrednostih Δ dobimo relativno visoke vrednosti indeksa, te ne presežejo vrednosti, dosežene pri ekstremno razvejanih strukturah. To potrjuje, da tudi pri velikih drevesih zvezdno drevo ostaja globalno optimalna struktura glede na Somborjev indeks.

Optimalno drevo pri fiksnem Δ: Pri fiksni največji stopnji Δ rezultati kažejo, da je vrednost Somborjevega indeksa monotono naraščajoča funkcija parametra α. Optimalna struktura drevesa se pri tem ne spreminja bistveno, temveč se z večanjem α povečuje predvsem absolutna vrednost indeksa.

Pri velikih drevesih optimalna drevesa za dano Δ praviloma niso enolična, vendar imajo podobno porazdelitev stopenj. Značilno je, da se z naraščanjem Δ zmanjšuje število vozlišč z maksimalno stopnjo, hkrati pa se pojavljajo vozlišča z drugo največjo stopnjo, ki pomembno prispevajo k skupni vrednosti indeksa. To kaže, da optimalne strukture pri fiksni Δ niso popolnoma centralizirane, temveč bolj razpršene.

Sklep: Primer za $n = 60$ potrjuje ugotovitve iz analize majhnih dreves. Globalni maksimum Somborjevega indeksa je za vse obravnavane vrednosti parametra $\alpha \in (0, 1)$ dosežen pri največji možni maksimalni stopnji $\Delta = n - 1$. Hkrati pa analiza pri fiksni Δ pokaže, da parameter α ne vpliva na izbiro optimalne strukture, temveč zgolj na absolutno vrednost indeksa. S tem se potrjuje, da ima razporeditev stopenj vozlišč ključno vlogo pri določanju optimalnih dreves, medtem ko parameter α deluje kot utež, ki poudarja prispevke povezav z večjimi stopnjami.

3.5 Povzetek ugotovitev

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

Vpliv največje stopnje razvejanosti Δ se pri tem izkaže kot ključen. Pri majhnih grafih je globalni maksimum Somborjevega indeksa dosežen pri drevesih z največjo možno stopnjo razvejanosti, saj vozlišče z največ povezavami prispeva največji delež k vsoti v definiciji indeksa. Analiza velikih grafov pokaže, da ta lastnost ostaja ohranjena tudi za večje vrednosti n, saj zvezdno drevo z $\Delta = n - 1$ še vedno dosega največjo možno vrednost indeksa.

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.