

Usporedba Zagrebačkih indeksa

Damir Vukičević

Matematički odjel, Prirodoslovno-Matematički Fakultet, Sveučilište u Splitu
Nikole Tesle 12, HR-21000 Split, Hrvatska

Neka je G jednostavan graf. Označimo s $V(G)$ skup njegovih vrhova, s $E(G)$ skup bridova, s $n(G)$ broj vrhova, a s $m(G)$ broj bridova. Prvi i drugi zagrebački indeks su definirani s $M_1(G) = \sum_{v \in V(G)} d(v)^2$ i $M_2(G) = \sum_{uv \in E(G)} d(u)d(v)$, gdje je $d(v) = d_G(v)$ stupanj vrha v u grafu G .

Na konferenciji Međunarodne akademije matematičke kemije (International Academy of Mathematical Chemistry) 2006 je profesor Hansen dao sljedeću slutnju:

Slutnja. Za sve jednostavne povezane grafove vrijedi:

$$M_1(G)/n(G) \leq M_2(G)/m(G).$$

Štoviše, ovo je najbolja moguća nejednakost.

Pokazat ćemo da ova slutnja općenito nije istinita, no da je ona istinita za grafove kojima je maksimalni stupanj najviše četiri (što je za kemiju značajan rezultat), da je istinita za acikličke grafove, te da je istinita i za unicikličke grafove.

Nejednakost ${}^\lambda M_1/n \leq {}^\lambda M_2/m$ koja je generalizacija od (1) je analizirana za sve grafove, za grafove maksimalnog stupnja najviše 4, te za stabla.

Istraživanja ovog tipa su nastavljena istraživanjem bridnih povezanosti. Neka je $m_{ij}(G)$ broj bridova grafa G koji povezuju vrhove stupnja i i j . Nužni i dovoljni uvjeti su dani na matricu tipa $\Delta \times \Delta$ za postojanje stabla T takvog da je $M_{ij} = m_{ij}(T)$. Ovi rezultati su korišteni u izradi softwera ChemoGraphX.