

UNIVERZA NA PRIMORSKEM
FAKULTETA ZA MATEMATIKO, NARAVOSLOVJE IN
INFORMACIJSKE TEHNOLOGIJE

ZAKLJUČNA NALOGA
INDEKS POVEZANOSTI ATOMSKE VEZI
(ABC INDEKS)

ANGELINA ČIRKOVIĆ

UNIVERZA NA PRIMORSKEM
FAKULTETA ZA MATEMATIKO, NARAVOSLOVJE IN
INFORMACIJSKE TEHNOLOGIJE

Zaključna naloga

**Indeks povezanosti atomske vezi
(ABC indeks)**

(Atom-bond connectivity index (ABC index))

Ime in priimek: Angelina Čirković

Študijski program: Matematika v ekonomiji in financah

Mentor: prof. dr. Dragan Stevanović

Koper, september 2014

Ključna dokumentacijska informacija

Ime in PRIIMEK: Angelina ĆIRKOVIĆ

Naslov zaključne naloge: Indeks povezanosti atomske vezi (ABC indeks)

Kraj: Koper

Leto: 2014

Število listov: 57

Število slik: 16

Število tabel: 3

Mentor: prof. dr. Dragan Stevanović

Ključne besede: ABC indeks, povezanost, drevo, stopnja, vozlišče

Math. Subj. Class. (2010):

Izveček: Indeks povezanosti atomske vezi (ali ABC indeks) grafa G je definiran kot vsota vseh parov sosednjih točk u, v in pogoja $\sqrt{\frac{d(u)+d(v)-2}{d(u)d(v)}}$, kjer $d(v)$ označuje stopnjo vozlišča v v grafu G . [4, 8, 10, 12, 14, 16] ABC indeks je uvedel Ernesto Estrada leta 1998. Karakterizacija oz. opredelitev grafov z najmanjšo ABC vrednostjo, kljub številnim poskusom, je še vedno odprt problem. Znano je le, da povezan graf z minimalnim ABC indeksom mora biti drevo, bile pa so še določene nekatere strukturne značilnosti teh dreves. Več domnev o strukturi minimalnih ABC dreves je bilo ovrženih s proti primeri. V zadnjih nekaj letih se je povečalo zanimanje za matematične lastnosti indeksa ABC kar je pripeljalo do tega, da je bilo objavljenih kar nekaj dokumentov. [1, 16] Obravnavan je teoretični del. Analizirani so različni viri oz. strokovni članki, ki se ukvarjajo s to tematiko s poudarkom na drevesih z minimalnim ABC indeksom. Metode raziskovanja, ki so uporabljene pri zapisovanju diplomskega dela, so analiza strokovne literature ter deskriptivna metoda.

Key words documentation

Name and SURNAME: Angelina ĆIRKOVIĆ

Title of final project paper: Atom-bond connectivity index (ABC index)

Place: Koper

Year: 2014

Number of pages: 57

Number of figures: 16

Number of tables:

3

Mentor: Prof. Dragan Stevanović, PhD

Keywords: ABC index, connectivity, tree, degree, vertex

Math. Subj. Class. (2010):

Abstract: The atom-bond connectivity index (or ABC index) of a graph G is defined as the sum over all pairs of adjacent vertices u, v of the term $\sqrt{\frac{d(u)+d(v)-2}{d(u)d(v)}}$, where $d(v)$ denotes the degree of the vertex v of the graph G . [4, 8, 10, 12, 14, 16] The ABC index was introduced by Ernesto Estrada in 1998. The characterization of the graphs with smallest ABC-value, in spite of numerous attempts, is still an open problem. What only is known is that the connected graph with minimal ABC index must be a tree, and some structural features of such trees have been determined. Several conjectures on the structure of the minimal-ABC trees, were disproved by counterexamples. In the last few years the interest in the mathematical properties of the ABC index increased, which has led to the fact that there were published several papers. [1, 16] The theoretical part is considered for the analysis. There are analyzed various sources and professional articles dealing with this topic with an emphasis on trees with a minimal ABC index. Research methods that are used in writing the thesis are the analysis of the professional literature and a descriptive method.

Zahvala

Zahvaljujem se mentorju, prof. dr. Draganu Stevanoviću, za vso strokovno pomoč, čas in trud, ki ga je vložil.

Posebno se zahvaljujem staršem in sestri za neizmerno podporo v teku mojega študija.

Kazalo vsebine

1	Uvod	1
2	Namen in cilj diplomskega dela	2
3	Vprašanja diplomskega dela	3
4	Predvidene metode raziskovanja	4
5	Predstavitev ABC indeksa	5
6	Podatkovna struktura drevesa	6
7	Spodnja meja ABC indeksa	9
8	Zgornja meja ABC indeksa	13
9	Označevanje zaporedij stopenj dreves	17
10	Drevesa z minimalnim indeksom povezanosti atomske vezi	22
11	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s stopnjo $n = 30$	28
12	Drevesa z minimalnim ABC indeksom stopnje $n > 30$	36
13	Znane strukturne lastnosti dreves z minimalnim ABC indeksom in nekateri z njimi povezani rezultati	41
14	Zaključek	44
15	Literatura	46

Kazalo tabel

1	Uspešnost algoritma za štetje zaporedja stopenj dreves. Za zaporedje stopenj dolžine n , $S(n)$ označuje število zaporedij stopenj, $T(n)$ označuje skupni čas poteka in $S(n)/T(n)$ označuje amortiziran čas izvajanja za tvorjenje zaporedja. [3]	20
2	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s stopnjo $n = 30$ [7]	28
3	Drevesa, ki imajo minimalni ABC indeks, z danim n številom točk, $n \in [7, 30]$ [7]	29

Kazalo slik

1	Oče ali prednik [31]	6
2	Sin ali naslednik [31]	7
3	Nivo vozlišča [31]	7
4	Drevesa reda n , $7 \leq n \leq 300$, z minimalnim ABC indeksom, pridobljena z računalniškim iskanjem - primeri $n \equiv 0, 1, 2(mod7)$. [3]	24
5	Drevesa reda n , $7 \leq n \leq 300$, z minimalnim ABC indeksom, pridobljena z računalniškim iskanjem - primeri $n \equiv 3, 4, 5, 6(mod7)$. [3]	25
6	Primeri dreves z minimalnim ABC indeksom, ki pripadajo <i>Domnevi</i> 10.4.. [3]	27
7	Veje, ki smo jih upoštevali pri iskanju dreves z minimalnim ABC indeksom. [17]	36
8	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 28$ točkami, za $k \geq 21$. Najmanjše tako drevo ima $n = 175$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]	37
9	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 1$ točkami, za $k \geq 9$. Najmanjše tako drevo ima $n = 64$ točk. Oblika veje B_3 je prikazana na Sliki 7. [17]	38
10	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 9$ točkami, za $k \geq 23$. Najmanjše tako drevo ima $n = 170$ točk. Oblika vej B_3 in B_3^* je prikazana na Sliki 7. [17]	38
11	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 10$ točkami, za $k \geq 10$. Najmanjše tako drevo ima $n = 80$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]	39
12	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 11$ točkami, za $k \geq 6$. Najmanjše tako drevo ima $n = 53$ točk. Oblika vej B_2 in B_3 je prikazana na Sliki 7. [13, 17]	39
13	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 19$ točkami, za $k \geq 14$. Najmanjše tako drevo ima $n = 117$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]	40

14	Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 6$ točkami, za $k \geq 8$. Najmanjše tako drevo ima $n = 62$ točk. Oblika vej B_2 in B_3 je prikazana na Sliki 7. [17]	40
15	Drevesa z minimalnim ABC indeksom reda n , $4 \leq n \leq 9$. [11]	41
16	Veje B_k . Vozlišče od veje B_k , stopnje $k + 1$, je obravnavano kot koren veje. [11]	43

Seznam kratic

t.j. to je

itd. in tako dalje

oz. oziroma

ang. v angleščini

1 Uvod

Indeks povezanosti atomske vezi (ang. Atom-bond connectivity index ali ABC index) grafa G je definiran kot vsota vseh parov sosednjih točk u, v in pogoja $\sqrt{\frac{d(u)+d(v)-2}{d(u)d(v)}}$, kjer $d(v)$ označuje stopnjo vozlišča v v grafu G . [4, 8, 10, 12, 14, 16] ABC indeks je uvedel Ernesto Estrada leta 1998. Karakterizacija oz. opredelitev grafov z najmanjšo ABC vrednostjo, kljub številnim poskusom, je še vedno odprt problem. Znano je le, da povezan graf z minimalnim ABC indeksom mora biti drevo, bile pa so še določene nekatere strukturne značilnosti teh dreves. Več domnev o strukturi minimalnih ABC dreves je bilo ovrženih s proti primeri. V zadnjih nekaj letih se je povečalo zanimanje za matematične lastnosti indeksa ABC kar je pripeljalo do tega, da je bilo objavljenih kar nekaj dokumentov. [1, 16] Zato sem se tudi odločila za obravnavo ABC indeksa, saj je to aktualna tema, ki še ni do dobra odkrita, saj se številni raziskovalci iz vseh koncev sveta ukvarjajo z njo. Obravnavala bom teoretični del. Analizirala bom različne vire oziroma strokovne članke, ki se ukvarjajo s to tematiko, še posebej pa se bom poglobila v analizo dreves z minimalnim ABC indeksom.

Kar zadeva strukturo diplomskega dela, v nadaljevanju sledijo kratka poglavja, kjer so zapisani namen in cilj diplomskega dela, vprašanja ter predvidene metode raziskovanja. Tem poglavjem sledi poglavje, kjer je predstavljen ABC indeks, nato pa še podatkovna struktura drevesa. Po tem, sta v sledečih dveh poglavjih predstavljeni spodnja in zgornja meja ABC indeksa. Tem sledi poglavje, kjer je predstavljeno označevanje zaporedij stopenj dreves, nato pa so v nadaljevanju zapisana še drevesa z minimalnim ABC indeksom, drevesa, ki imajo stopnjo največ 30 in drevesa, ki imajo stopnjo večjo od 30. Pred zalkjučkom pa so še predstavljene nekatere znane strukturne lastnosti dreves z minimalnim ABC indeksom.

2 Namen in cilj diplomskega dela

Namen diplomskega dela je poglobiti se v analizo teoretičnih vsebin ABC indeksa.

Cilj diplomskega dela je analizirati literaturo o ABC indeksu, s posebnim poudarkom na analizo dreves z minimalnim ABC indeksom.

S pomočjo različnih virov bom poskušala preučiti indeks povezanosti atomske vezi (ABC indeks).

3 Vprašanja diplomskega dela

V diplomskem delu se bom osredotočila na naslednja raziskovalna vprašanja:

- kakšne vsebine o ABC indeksu so bile do sedaj preučene,
- kaj je bilo raziskano oziroma do katere točke so se razvile analize v zvezi z drevesi z minimalnim ABC indeksom.

4 Predvidene metode raziskovanja

Metode raziskovanja, ki jih bom uporabila pri zapisovanju diplomskega dela, so:

- analiza strokovne literature,
- deskriptivna metoda.

Pri metodi raziskovanja bom uporabila deskriptivno metodo. Torej opisovala bom ter razlagala s pomočjo uporabe strokovne literature.

5 Predstavitev ABC indeksa

Molekulski deskriptorji [26] so matematične količine, ki opisujejo strukturo ali obliko molekule, ter tako pomagajo pri napovedi aktivnosti in lastnosti molekul v kompleksnih eksperimentih. Med njimi igrajo, tako imenovani topološki indeksi pomembno vlogo. Topološke indekse [18], lahko klasificiramo po strukturalni lastnosti grafov, ki se uporabljajo za njihovo izračunavanje. Na primer, Wienerjev indeks [19] in indeks Balaban J [20], ki temeljita na razdalji vozlišč v grafu, indeks Estrada [25] in energija grafa [21], ki temeljita na spektru grafa, skupina Zagreb indeksov [22] in Randićev indeks povezljivosti [23] sta odvisna od stopenj vozlišč, medtem ko je indeks Hosoya [24] izračunan s seštevanjem ne-incidenčnih robov v grafu. [1–3, 11]

Leta 1998 je Estrada predlagal nov grafični topološki indeks, ki temelji na stopnji vozlišča, tj. indeks povezanosti atomske vezi (ABC indeks) in pokazal, da je ta lahko dragoceno orodje za predvidevanje v študiji toplotne tvorbe v podobah. Deset let kasneje je Estrada izdelal novo kvantno teorijo, kot utemeljitev za topološki indeks. Po tem razkritju, je interes za ABC indeks hitro zrasel. [3, 11]

Naj bo $G = (V, E)$ preprost neusmerjen graf reda $n = |V|$ in reda $m = |E|$. Za $v \in V(G)$, stopnja od v , označena z $d(v)$, je število robov, ki so incidenčni z v . Potem je indeks povezanosti atomske vezi od G definiran kot [1–3, 9–11]

$$ABC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u)+d(v)-2}{d(u)d(v)}}$$

Kot nova invarianta grafa je indeks ABC pritegnil veliko zanimanja v zadnjih nekaj letih v matematičnih in kemijskih raziskovalnih skupinah. [3]

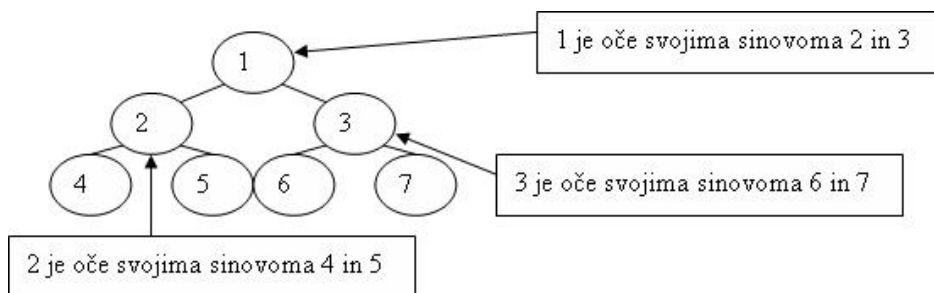
Naj bo $G = (V, E)$. Če je $V(G)$ disjunktna unija dveh nepraznih množic $V_1(G)$ in $V_2(G)$ tako, da vsaka točka v $V_1(G)$ ima stopnjo r in vsaka točka v $V_2(G)$ ima stopnjo $s(r - s)$, potem je G (r, s) - semiregularen graf. Ko je $r = s$, se ta imenuje regularen graf. Če je (r, s) - semiregularni graf drevo, potem se imenuje $(r, 1)$ - semiregularno drevo. [2]

6 Podatkovna struktura drevesa

Drevo je nelinearna podatkovna struktura. Osnovni elementi v drevesu so vozlišča. Vsako vozlišče ima lahko več naslednikov, vendar največ enega predhodnika. Koren je vrhnje vozlišče, edino vozlišče v drevesu brez prednika. [31]

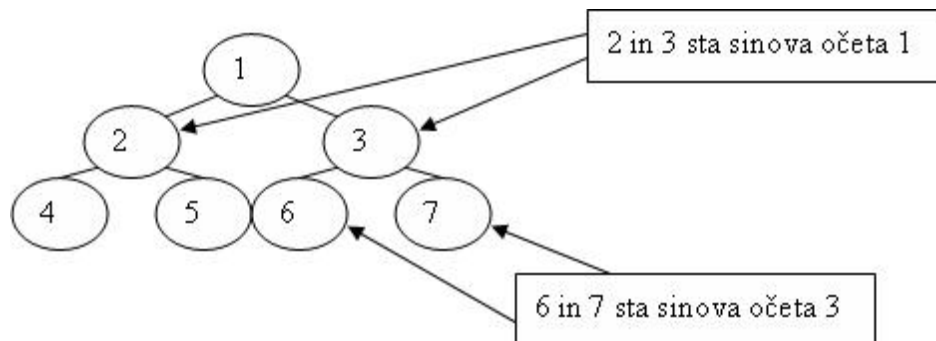
Vozlišče: je osnovni element drevesa. Vsebuje podatek in informacijo o iz njega izhajajočih poddrevesih. Ima lahko več potomcev, vendar največ enega prednika. [31]

Oče ali prednik: 1 je oče vozliščema 2 in 3. 2 je oče vozliščema 4 in 5. 3 je oče vozliščema 6 in 7. Koren drevesa je edino vozlišče brez očeta (v našem primeru je koren drevesa 1). [31]



Slika 1: Oče ali prednik [31]

Sin ali naslednik: je koren poddrevesa, ki izhaja iz njegovega očeta. [31]



Slika 2: Sin ali naslednik [31]

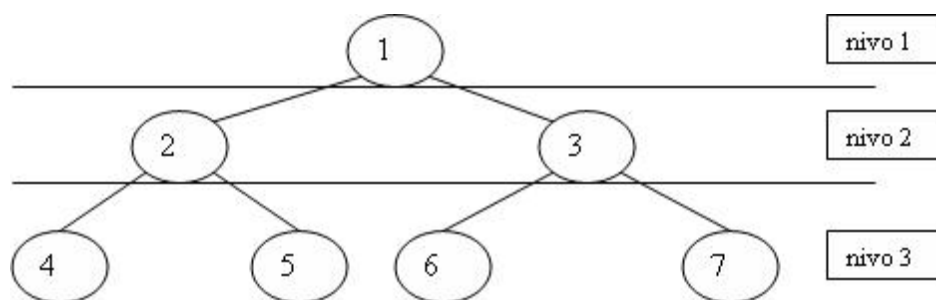
Stopnja vozlišča: je število poddreves, ki izhajajo iz vozlišča. [31]

Stopnja drevesa: je maksimalna stopnja vozlišč. [31]

List ali končno vozlišče: je vozlišče, ki nima sinov. [31]

Notranja vozlišča: so vsa vozlišča, razen listov. [31]

Nivo vozlišča: če ima oče nivo n , ima sin nivo $n + 1$. Koren ima nivo 1, njegovi sinovi nivo 2, sinovi sinov nivo 3, itd. [31]



Slika 3: Nivo vozlišča [31]

Višina drevesa: je enaka največjemu nivoju vozlišča v drevesu. [31]

Urejeno drevo: je drevo, pri katerem je vrstni red poddreves (sinov) pomemben. Pri tem nas urejenost podatkov v vozliščih ne zanima. [31]

Izrojeno drevo: je drevo, pri katerem ima vsako vozlišče (razen lista) le enega sina. [31]

Polno drevo stopnje k : je drevo, kjer ima vsako vozlišče (razen listov) natanko k sinov. Vsi listi so na istem nivoju. [31]

Prazno drevo: je drevo brez vozlišč. [31]

Gozd: množica disjunktne dreves. [31]

Drevo se imenuje ukoreninjeno drevo, če je bila ena točka imenovana *korenina*. Točka stopnje ena je pendantna točka. [3] \gg *Breadth – first search* \ll (\gg *iskanje v širino* \ll) je algoritem za iskanje v grafu, ki se začne v korenu in raziskuje vse svoje točke, ki predstavljajo otroke, začeni z najbolj desnim otrokom in se konča z najbolj levim otrokom. Nato pa za vsakega od teh otrok raziskuje svoje neraziskane točke, ki predstavljajo otroke, in tako naprej, dokler ne pride do cilja, oziroma dokler ne razišče vse točke. [3]

Naj bo $S_k = v_0v_1 \dots v_k, v_{k+1}$, $k \leq n - 3$, zaporedje točk grafa G z $d(v_0) > 2$ in $d(v_i) = 2$, $i = 1, \dots, k - 1$. [3] Če $d(v_k) = 1$, potem je S_k *pendantna pot* (*povezava*) dolžine $k + 1$. Če $d(v_k) > 2$, potem je S_k *notranja pot* (*povezava*) dolžine k . [3]

7 Spodnja meja ABC indeksa

Za povezan graf G reda n z m robovi, je najvišja točka stopnje označena z Δ , število pendantnih točk s p in število ne-pendantnih robov, ki imajo vsaj eno končno točko stopnje 2 z l . Označimo z x_{ij} število robov od grafa G , ki povezujejo točke stopnje i in j , kjer je $1 \leq i \leq j \leq \Delta$. Označimo z n_i število točk stopnje i v G za $i = 1, 2, \dots, \Delta$. Naj bo $\bar{ij} = \sqrt{\frac{i+j-2}{ij}}$. [15] Če je $V(G)$ disjunktna unija dveh nepraznih množic $V_1(G)$ in $V_2(G)$, tako da ima vsaka točka v $V_1(G)$ stopnjo r in vsaka točka v $V_2(G)$ ima stopnjo s ($r > s$), potem je G (r, s) -semiregularen graf. [15] Drugi modificiran Zagreb indeks $M_2^*(G)$, je enak vsoti produktov recipročnih stopenj parov sosednjih vozlišč osnovnega molekularnega grafa G , ki je,

$$M_2^*(G) = \sum_{v_i v_j \in E(G)} \frac{1}{d_i d_j}. \quad [15]$$

Lema 7.1. [15] Naj $\overline{xy} = \sqrt{\frac{x+y-2}{xy}} = \sqrt{\frac{1}{x} + \frac{1}{y} - \frac{2}{xy}}$, kjer je $x \geq 1$. Potem je $\overline{2x} = \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Lema 7.2. [15] Naj $\overline{xy} = \sqrt{\frac{x+y-2}{xy}}$. Če je $x \leq y$, potem je $\overline{1x} \leq \overline{1y}$.

Dokaz. [15] Če je $x \leq y$ potem $\frac{y-1}{y} - \frac{x-1}{x} = \frac{y-x}{xy} \geq 0$.

Potem $\overline{1y} - \overline{1x} = \sqrt{\frac{y-1}{y}} - \sqrt{\frac{x-1}{x}} \geq 0$. □

Lema 7.3. [27] Naj bo $f(x, y) = \sqrt{\frac{x+y-2}{xy}} = \sqrt{\frac{1}{x} + \frac{1}{y} - \frac{2}{xy}}$, kjer $x, y \geq 1$. Če je $y \geq 2$ fiksna, potem je $f(x, y)$ padajoča za x .

Posledica 7.4. [15] Naj bo $\overline{xy} = \sqrt{\frac{x+y-2}{xy}}$. Če je $y \geq 2$ fiksna, potem je $\overline{2y} \geq \overline{xy}$ za x ($x \geq 2$).

Dokaz. [15] Po Lemi 7.3, če je $y \geq 2$ fiksna, potem je \overline{xy} padajoča za x , kjer je $x \geq 2$.

Potem $\overline{2y} \geq \overline{xy}$. □

Naj bo Γ razred povezanih grafov G , katerega vsi robovi imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. [15]

Naj bo Γ^* razred povezanih grafov G , kjer je vsaj en rob, čigar stopnji dveh končnih vozlišč sta obe Δ , in vsi drugi robovi imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. [15]

Naj bo Γ^{**} razred grafov $H = (V, E)$, tako da je H povezan graf z minimalno stopnjo točke $\delta = 2$, s q robovi $v_i v_j \in E(G)$ tako, da $d_i = d_j = \Delta (\geq 3)$ in preostalimi $m - q$ robovi $v_i v_j \in E(H)$ tako, da $d_i = 2$ ali $d_j = 2$ ali $d_i = d_j = 2$, kjer je Δ najvišja stopnja vozlišča in q je definiran kot $q = \frac{m\Delta}{\Delta + 2\sqrt{\Delta - 1}}$. [15]

Izrek 7.5. [15] Naj bo G enostaven povezan graf z m robovi, najvišjo točko stopnje označeno z Δ , p pendantnimi točkami. Označimo z l ne-pendantne robove, ki imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. Potem

$$ABC(G) \geq \frac{\sqrt{2(p+l)}}{2} + (m - p - l) \frac{\sqrt{2\Delta - 2}}{\Delta}.$$

Enakost velja, če in samo, če je G regularen graf ali $G \in \Gamma$ ali $G \in \Gamma^*$ ali $G \cong C_n$ ali $G \cong P_n$.

Dokaz. [15] Po Lemi 7.1, 7.2 in 7.3 imamo

$$\begin{aligned} ABC(G) &= \sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{1i} \overline{1i} + \sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{2i} \overline{2i} + \sum_{3 \leq i \leq j \leq \Delta} x_{ij} \overline{ij} \\ &\geq (\sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{1i}) \overline{12} + (\sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{2i}) \overline{2\Delta} + (\sum_{3 \leq i \leq j \leq \Delta} x_{ij}) \overline{\Delta\Delta} \\ &= \frac{\sqrt{2(p+l)}}{2} + (m - p - l) \frac{\sqrt{2\Delta - 2}}{\Delta}. \end{aligned}$$

Sedaj upoštevajmo enakost. Enakost velja, če in samo, če je $x_{1i} = 0 (3 \leq i \leq \Delta)$, $x_{ij} = 0 (3 \leq i \leq j \leq \Delta \text{ in } (i, j) \neq (\Delta, \Delta))$.

Primer 1: $\Delta = 2$.

Če $x_{22} \neq 0$ in $x_{12} = 0$, potem $G \cong C_n$.

Če $x_{22} \neq 0$ in $x_{12} \neq 0$, potem $G \cong P_n$.

Če $x_{22} = 0$ in $x_{12} \neq 0$, potem $G \cong P_2$.

Primer 2: $\Delta \geq 3$.

Če je $x_{\Delta\Delta} = 0$ in $x_{12}, x_{22}, \dots, x_{2\Delta}$ niso vsi enaki nič, potem $G \in \Gamma$.

Če je $x_{\Delta\Delta} \neq 0$ in $x_{12} = x_{22} = \dots = x_{2\Delta} = 0$, potem je G regularen graf.

Če je $x_{\Delta\Delta} \neq 0$ in $x_{12}, x_{22}, \dots, x_{2\Delta}$ niso vsi enaki nič, potem $G \in \Gamma^*$. □

Izrek 7.6. [2] Naj bo G enostaven povezan graf stopnje n z m robovi, p pendantnimi točkami, najvišjo točko stopnje označene z Δ in minimalno stopnjo δ_1 ne-pendantne točke. Potem

$$ABC(G) \geq p\sqrt{1 - \frac{1}{\delta_1}} + \frac{\sqrt{4(m-p)(n-2M_2^*(G)-p(1-\frac{1}{\Delta}))}\sqrt{(\Delta-1)(\delta_1-1)}}{\sqrt{\Delta\delta_1(\frac{1}{\Delta}\sqrt{\Delta-1}+\frac{1}{\delta_1}\sqrt{\delta_1-1})}},$$

kjer je $M_2^*(G)$ drugi modificiran Zagreb indeks od G . Poleg tega enakost velja, če in samo, če je G izomorfen $(\Delta, 1)$ - semiregularnemu grafu ali G je izomorfen regularnemu grafu ali $G \in \Gamma^{**}$.

Opomba 7.7. [15] Izrek 7.5. je podal drugo mejo, ki je očitno boljša kot v Izreku 7.6. po parametrih in vrednostih, ki je izboljšava meje.

Posledica 7.8. [15] Naj bo G enostaven povezan graf z m robovi in najvišjo stopnjo točke označeno z Δ . Potem

$$ABC(G) \geq m\frac{\sqrt{2\Delta-2}}{\Delta}.$$

Enakost velja, če in samo, če je G regularen graf ali $G \cong C_n$ ali $G \cong P_n$.

Dokaz. [15] Po Izreku 7.5., imamo

$$ABC(G) \geq (\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{\sqrt{2\Delta-2}}{\Delta})(p+l) + m\frac{\sqrt{2\Delta-2}}{\Delta} \geq m\frac{\sqrt{2\Delta-2}}{\Delta}$$

Enakost velja, če in samo, če je G regularen graf ali $G \cong C_n$ ali $G \cong P_n$. □

Posledica 7.9. [15] Naj bo G^* enostaven povezan kemijski graf z m robovi. Potem

$$ABC(G^*) \geq \frac{\sqrt{6m}}{4}.$$

Enakost velja, če in samo, če je G^* 4-regularni graf.

Dokaz. [15] Ker je $\Delta \leq 4$, po Posledici 7.8, je očitno, da je $ABC(G^*) \geq \frac{\sqrt{6m}}{4}$. Enakost velja, če in samo, če je G^* 4-regularni graf. □

Izrek 7.10. [2] Naj bo G enostaven povezan graf z m robovi in najvišjo stopnjo točke označeno z Δ . Potem

$$ABC(G) \geq \frac{2^{\frac{7}{4}} m \sqrt{\Delta-1}}{\Delta^{\frac{3}{4}} (\sqrt{\Delta} + \sqrt{2})}.$$

Enakost velja, če in samo, če je $G \cong P_n$.

Opomba 7.11. [15] Ker

$$m \frac{\sqrt{2\Delta-2}}{\Delta} - \frac{2^{\frac{7}{4}} m \sqrt{\Delta-1}}{\Delta^{\frac{3}{4}} (\sqrt{\Delta} + \sqrt{2})} = m \sqrt{\Delta-1} \frac{\sqrt{2} (\Delta^{\frac{1}{4}} - 2^{\frac{1}{4}})^2}{\Delta (\sqrt{\Delta} + \sqrt{2})} \geq 0$$

spodnja meja za ABC indeks grafa G določena v *Posledici 7.8* je izboljšava meje podane v *Izreku 7.10.*

8 Zgornja meja ABC indeksa

Naj bo Ψ_1 razred povezanih grafov G , kjer je vsaj en rob katerega stopnji dveh končnih točk sta obe enaki 3, in vse pendantne točke so sosednje najvišji stopnji točk, in vsi drugi robovi imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. [15]

Naj bo Ψ_2 razred povezanih grafov G , čigar pendantne točke so vse sosednje najvišji stopnji točk, in vsi drugi robovi imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. [15]

Izrek 8.1. [15] *Naj bo G povezan graf z m robovi, najvišjo stopnjo vozlišča označeno z Δ , p pendantnimi točkami. Označimo z l število ne-pendantnih robov, ki imajo vsaj eno končno točko stopnje 2. Potem*

$$ABC(G) \leq p\sqrt{1 - \frac{1}{\Delta}} + \frac{\sqrt{2}}{2}l + \frac{2(m-p-l)}{3}$$

Enakost velja, če in samo, če je G izomorfen 3-regularnemu grafu ali $G \in \Psi_1$ ali $G \in \Psi_2$.

Dokaz. [15] Po Lemi 7.1, 7.2 in 7.3, imamo

$$\begin{aligned} ABC(G) &= \sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{1i} \overline{1i} + \sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{2i} \overline{2i} + \sum_{3 \leq i \leq j \leq \Delta} x_{ij} \overline{ij} \\ &\leq (\sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{1i}) \overline{1\Delta} + (\sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{2i}) \overline{2\Delta} + (\sum_{3 \leq i \leq j \leq \Delta} x_{ij}) \overline{33} \\ &= p\sqrt{1 - \frac{1}{\Delta}} + \frac{\sqrt{2}}{2}l + \frac{2(m-p-l)}{3}. \end{aligned}$$

Sedaj upoštevajmo enakost. Enakost velja, če in samo, če je $x_{1i} = 0$ ($2 \leq i \leq \Delta - 1$), $x_{ij} = 0$ ($4 \leq i \leq j \leq \Delta$) in $x_{3i} = 0$ ($4 \leq i \leq \Delta$).

Primer 1: $x_{33} \neq 0$.

Če je $x_{1\Delta} = x_{22} = \dots = x_{2\Delta} = 0$, potem dobimo, da je G izomorfen 3-regularnemu grafu.

Če $x_{1\Delta}, x_{22}, \dots, x_{2\Delta}$ niso vsi enaki nič, potem $G \in \Psi_1$.

Primer 2: $x_{33} = 0$.

Če $x_{1\Delta}, x_{22}, \dots, x_{2\Delta}$ niso vsi enaki nič, potem $G \in \Psi_2$. □

Lema 8.2. [27] Naj bodo i, j in Δ pozitivna cela števila z $i \leq j \leq \Delta$ in $\Delta \geq 3$.

Naj bo $h(i, j, \Delta) = 2(\frac{\sqrt{2}}{2} - \sqrt{1 - \frac{1}{\Delta}})(\frac{1}{i} + \frac{1}{j} - \frac{1}{2} - \frac{1}{\Delta}) + \sqrt{\frac{i+j-2}{ij}} - \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Potem $h(i, j, \Delta) < 0$ za $(i, j) \neq (1, \Delta), (2, \Delta)$.

Naj bo Ψ^{**} množica povezanih grafov, čigar robovi imajo eno končno točko stopnje Δ in druga stopnja končne točke je 1 ali 2.

Izrek 8.3. [15] Naj bo G povezan graf reda n z m robovi, najvišjo stopnjo vozlišča označeno z Δ , kjer $2 \leq \Delta \leq n - 1$. Potem

$$ABC(G) \leq \sqrt{1 - \frac{1}{\Delta}}(2n - m - \frac{2m}{\Delta}) + \sqrt{2}(m + \frac{m}{\Delta} - n)$$

Enakost velja, če in samo, če je $G \in \Psi^{**}$, z $m \equiv 0 \pmod{\Delta}$.

Dokaz. [15] Ker je G graf reda n z m robovi in največjo stopnjo Δ , imamo

$$n_1 + n_2 + \dots + n_\Delta = n$$

$$n_1 + 2n_2 + \dots + \Delta n_\Delta = 2m$$

$$\sum_{2 \leq i \leq \Delta} x_{1i} = n_1$$

$$\sum_{1 \leq j \leq \Delta, i \neq j} x_{ij} + 2x_{ii} = in_i \quad (i = 2, 3, \dots, \Delta).$$

Predpostavimo

$$w_1 = \sum_{2 \leq i \leq \Delta-1} x_{1i}$$

$$w_2 = \sum_{1 \leq j \leq \Delta-1, i \neq j} x_{2j} + 2x_{22}$$

$$w_i = \sum_{1 \leq j \leq \Delta, i \neq j} x_{ij} + 2x_{ii} \quad (i = 3, 4, \dots, \Delta)$$

$$w_\Delta = \sum_{3 \leq j \leq \Delta-1} x_{j\Delta} + 2x_{\Delta\Delta}$$

t.j.

$$w_1 = n_1 - x_{1\Delta}$$

$$w_2 = 2n_2 - x_{2\Delta}$$

$$w_i = in_i \quad (i = 3, 4, \dots, \Delta - 1)$$

$$w_{\Delta} = \Delta n_{\Delta} - x_{1\Delta} - x_{2\Delta}.$$

Potem imamo

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i \leq \Delta} w_i &= 2m - 2(x_{1\Delta} + x_{2\Delta}) \\ \sum_{1 \leq i \leq \Delta} \frac{1}{i} w_i &= n - (1 + \frac{1}{\Delta})x_{1\Delta} - (\frac{1}{2} + \frac{1}{\Delta})x_{2\Delta}. \end{aligned}$$

Iz tega sledi, da

$$\begin{aligned} x_{1\Delta} &= 2n - m - \frac{2m}{\Delta} - \sum_{1 \leq i \leq \Delta} (\frac{2}{i} - \frac{1}{2} - \frac{1}{\Delta}) w_i \\ &= 2n - m - \frac{2m}{\Delta} - \sum_{1 \leq i \leq j \leq \Delta, (i,j) \neq (1,\Delta)(2,\Delta)} (\frac{2}{i} + \frac{2}{j} - 1 - \frac{2}{\Delta}) x_{ij} \\ x_{2\Delta} &= 2m + \frac{2m}{\Delta} - 2n + \sum_{1 \leq i \leq \Delta} (\frac{2}{i} - 1 - \frac{1}{\Delta}) w_i \\ &= 2m + \frac{2m}{\Delta} - 2n + \sum_{1 \leq i \leq j \leq \Delta, (i,j) \neq (1,\Delta)(2,\Delta)} (\frac{2}{i} + \frac{2}{j} - 2 - \frac{2}{\Delta}) x_{ij}. \end{aligned}$$

Po *Lemi* 8.2, imamo

$$\begin{aligned} ABC(G) &= \sqrt{\frac{\Delta-1}{\Delta}} (2n - m - \frac{2m}{\Delta}) + \frac{\sqrt{2}}{2} (2m + \frac{2m}{\Delta} - 2n) \\ &+ \sum_{1 \leq i \leq j \leq \Delta, (i,j) \neq (1,\Delta)(2,\Delta)} h(i, j, \Delta) x_{ij} \\ &\leq \sqrt{\frac{\Delta-1}{\Delta}} (2n - m - \frac{2m}{\Delta}) + \sqrt{2} (m + \frac{m}{\Delta} - n). \end{aligned}$$

Enakost velja, če in samo, če $x_{ij} = 0$, kjer $(i, j) \neq (1, \Delta)(2, \Delta)$, potem

$$x_{1\Delta} = 2n - m - \frac{2m}{\Delta}, x_{2\Delta} = 2m + \frac{2m}{\Delta} - 2n, \text{ z } m \equiv 0(\text{mod}\Delta), \text{ t.j. } G \in \Psi^{**}. \quad \square$$

Naj bo Ψ^* razred povezanih grafov G , čigar vozlišča imajo stopnjo vsaj 2 in vsi robovi imajo vsaj eno končno točko stopnje 2.

Izrek 8.4. [2] Naj bo G enostaven povezan graf reda n z m robovi, p pendantnimi točkami, najvišjo stopnjo vozlišča označeno z Δ in minimalno stopnjo ne-pendantne točke označeno z δ_1 .

$$ABC(G) \leq p\sqrt{1 - \frac{1}{\Delta}} + \frac{m-p}{\delta_1} \sqrt{2(\delta_1 - 1)}$$

Enakost velja, če in samo, če je G izomorfen $(\Delta, 1)$ - semiregularnemu grafu ali G je izomorfen regularnemu grafu ali $G \in \Psi_2$ ali $G \in \Psi^*$.

Opomba 8.5. [15] V primerjavi z zgornjo mejo iz *Izreka 8.4.*, meja iz *Izreka 8.3.* ima manj parametrov in je včasih boljša od prejšnje.

9 Označevanje zaporedij stopenj dreves

Dejstvo, da dodajanje roba v grafu strogo poveča indeks ABC (ali dejstvo da brisanje roba v grafu strogo zmanjša indeks ABC) ima dve posledici. [3,11]

Posledica 9.1. [3, 11] *Med vsemi povezanimi grafi z n točkami, popoln graf K_n ima maksimalno vrednost indeksa ABC.*

Posledica 9.2. [3, 11] *Med vsemi povezanimi grafi z n točkami, graf z minimalnim ABC indeksom je drevo.*

Čeprav je dokaj enostavno pokazati, da je graf zvezde S_n drevo z maksimalnim ABC indeksom, kljub številnim poskusom v zadnjih letih, je zaznamovanje dreves z minimalnim indeksom ABC še vedno odprt problem. Za opravljanje te naloge, poleg teoretično dokazanih lastnosti drevesa z minimalnim indeksom ABC, računalniško podprto iskanje je lahko v neizmerno pomoč. [3,11] Dober primer za to, je delo, ki ga je opravil Furtula, kjer so bila izračunana drevesa z minimalnim indeksom ABC do velikosti 30. [3]

Tam, je bil uporabljen \gg *surov* \ll pristop generiranja vseh dreves določenega vrstnega reda, ki je bil pospešen s pomočjo porazdeljene računalniške platforme. [3]

Tukaj smo izboljšali računalniško iskanje na dva načina. Prvič, upoštevajmo le zaporedja stopenj dreves. Radi bi poudarili, da je število zaporedij stopenj dane dolžine n manjše kot število vseh dreves reda n . Na primer, število dreves s 32 točkami je 109972410221, medtem ko je število zaporedij stopenj dolžine 32 enako 5604 (glej Tabelo 1). Drugič, da bi pospešili računanje, smo generirali le zaporedja stopenj dreves, ki ustrezajo nekaterim znanim strukturnim lastnostim dreves z minimalnim ABC indeksom. Tako smo, z uporabo enega računalnika identificirali vsa drevesa z minimalnim ABC indeksom do reda 300. Dobljeni rezultati so podkrepili mnenje, da so nekatere domneve resnične in zavračajo druge domneve. [3]

V nadaljevanju bomo predstavili nekaj dodatnih rezultatov in zapisov, ki bodo uporabljeni v nadaljevanju. Točka stopnje ena je *pendantna* točka. Zaporedje vozlišč grafa G , $S_k = v_0v_1\dots v_k$, se imenuje *pendantna pot* (*povezava*), če sta vsaki dve zaporedni točki v S_k sosednji v G , $d(v_0) > 2$, $d(v_i) = 2$, za $i = 1, \dots, k-1$, in $d(v_k) = 1$.

Dolžina pendantne poti (povezave) S_k je enaka k . Zaporedje $D = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ je *grafično*, če obstaja graf čigar stopnje vozlišč so $d_i, i = 1, \dots, n$. Če je poleg tega $d_1 \geq d_2 \geq \dots, d_n$, potem je D *zaporedje stopenj*. Naj bo D_n množica vseh zaporedij stopenj dreves dolžine n . [3] Wang je definiral \gg *požrešno drevo* \ll , kot [28]:

Izrek 9.3. [28] *Recimo, da so dane stopnje od ne-pendantnih točk, \gg požrešno drevo \ll dosežemo z naslednjim algoritmom:*

1. Označimo točko, ki ima največjo stopnjo z v .
2. Označimo sosedne točke od v kot v_1, v_2, \dots , dodelimo jim največjo možno stopnjo tako, da $d(v_1) \geq d(v_2) \geq \dots$
3. Označimo sosedne točke od v_1 (razen od v) kot v_{11}, v_{12}, \dots tako, da dobijo vse največje možne stopnje in da $d(v_{11}) \geq d(v_{12}) \geq \dots$; potem naredimo enak postopek še za v_2, v_3, \dots
4. Ponovimo 3. točko za vse na novo označene točke, pri čemer vedno začnemo s sosednjimi točkami od označene točke, z največjo, katere sosedje še niso označeni.

Naslednji rezultat, ki ga je pridobil Gan, Liu in You [29] označuje drevesa z minimalnim ABC indeksom s predpisanimi zaporedji stopenj. [3]

Izrek 9.4. [3] *Glede na podano zaporedje stopenj, požrešno drevo zmanjšuje indeks ABC.*

Ker ima *Izrek 9.4.* ključno vlogo pri našem izračunu, prvo pomembno vprašanje je, kako učinkovito naštetih zaporedja stopenj dreves. Ta težava je obravnavana v nadaljevanju. [3]

Obstaja veliko algoritmov za štetje zaporedij stopenj grafov. Jasno je, da se vsak od teh algoritmov lahko uporablja za štetje zaporedij stopenj dreves le z upoštevanjem (samo) zaporedij stopenj z vsoto stopenj enako $2n - 2$, kjer je n dolžina zaporedij stopenj. [3] Vendar pa to ni učinkovit pristop, saj večina ustvarjenih zaporedij stopenj niso zaporedja stopenj dreves. Za ponazoritev, število vseh zaporedij stopenj dolžine 29 je 2022337118015338, medtem ko je število zaporedij stopenj, ki ustrezajo drevesom dolžine 29 enako 3010 (glej Tabela 1). Tako ni presenetljivo, da je največje oštevilčeno zaporedje stopenj grafov bilo le dolžine 29, z uporabljenim tekočim časom od 6733 dni, porazdeljenim na 200 osebnih računalnikov, ki imajo približno 700 jeder. [3] Ker ne

poznamo algoritma specializiranega samo za štetje zaporedja stopenj dreves, predstavljamo takšen algoritem v tem poglavju. Naš algoritem je povezan z algoritmom za štetje zaporedij stopenj grafov, ki ga je predstavil Ruskey in uporablja tako imenovano \gg nasprotno iskanje \ll , izraz, ki sta ga ustvarila Avis in Fukuda. Glavni rezultat, na katerem temelji naš algoritem, je sledeča opredelitev zaporedja stopenj dreves. [3]

Izrek 9.5. [3] *Zaporedje celih števil $D = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ z $n - 1 \geq d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{n-m} > d_{n-m+1} = \dots = d_n = 1$, je zaporedje stopenj dreves, če in samo, če je $C = (c_1, c_2, \dots, c_{n-d_{n-m+1}})$ zaporedje stopenj dreves, kjer*

$$c_i = \begin{cases} d_i & i \leq n - m - 1; \\ 1 & \text{sicer.} \end{cases}$$

Dokaz. [3] Naj bo T_C drevo z zaporedjem stopenj $C = (c_1, c_2, \dots, c_{n-d_{n-m+1}})$, z $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq c_{n-m-1} > c_{n-m} = \dots = c_{n-d_{n-m+1}} = 1$ in $c_{n-m-1} \geq d_{n-m} \geq 2$, ki zadošča zgornji enačbi. Za dokaz lažje smeri enakosti, preprosto dodajmo $d_{n-m} - 1$ pendantnih točk pendantnemu vozlišču T_C tako, da dobimo drevo T_D . Zaporedje stopenj, ki pripada T_D je $D = (d_1, d_2, \dots, d_n)$, z $n - 1 \geq d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{n-m} > d_{n-m+1} = \dots = d_n = 1$. Drugo smer enakosti dokažemo na sledeč način. Naj bo $D = (d_1, d_2, \dots, d_n)$, z $n - 1 \geq d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{n-m} > d_{n-m+1} = \dots = d_n = 1$, zaporedje stopenj od drevesa T_D . Naj bo v_{n-m} vozlišče stopnje d_{n-m} . Če ima v_{n-m} $d_{n-m} - 1$ pendantnih vozlišč, jih zberimo tako, da dobimo drevo T_C . Če to ne drži, v_{n-m} ima $d > 1$ sosednjih vozlišč stopnje večje od ena, ki sestavljajo množico $U = \{u_1, u_2, \dots, u_d\}$. Naj bo U_1 množica sosednjih vozlišč od u_1 . Najprej, obrišimo vse robove med u_1 in vozlišči v $U_1 \setminus \{v_{n-m}\}$ in dodajmo robove med vozlišči v $U_1 \setminus \{v_{n-m}\}$ in pendantnim vozliščem, čigar razdalja do u_1 je večja od njegove razdalje do nekega drugega vozlišča v U . Opazimo, da T_D ima več kot d_{n-m} pendantnih točk, potemtakem eno tako pendantno vozlišče mora obstajati. Ponovimo postopek uporabljen za u_1 še za ostala vozlišča u_2, u_3, \dots, u_d , upoštevajoč eno vozlišče po koraku dokler v_{n-m} nima $d_{n-m} - 1$ pendantnih vozlišč, da dobimo drevo T'_D . Opazimo, da ima T'_D enako zaporedje stopenj kot T_D . Na koncu ibršimo v T'_D vsa $d_{n-m} - 1$ pendantna vozlišča, ki so sosednja v_{n-m} , in tako dobimo drevo T_C . \square

Naj bo S_i množica vseh zaporedij $D_i = (d_1, d_2, \dots, d_i)$, s fiksirano dolžino i , kjer $1 < i \leq n$ in $n - 1 \geq d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{h_i} > d_{h_i+1} = \dots = d_i = 1$. [3] Opazimo, da d_{h_i} označuje najmanjšo stopnjo v D_i , ki je večja od ena. [3] Definirajmo funkcijo $f_i : S_i \times d_{h_i} \rightarrow S_{i-d_{h_i}+1} \times d_{h_i-1}$ tako, da za dan $D_i \in S_i$, in $C = (c_1, c_2, \dots, c_{i-c_{h_i}+1})$, drži, da $(C, c_{h_i-1}) = f_i(D_i, d_{h_i})$, če

$$c_k = \begin{cases} d_k & k \leq h_i - 1; \\ 1 & \text{sicer. [3]} \end{cases}$$

Po *Izreku 9.5.* in definiciji funkcije f_i , imamo sledeči posledici. [3]

Posledica 9.6. [3] Za $i > 0$ in $D_i \in S_i$, zaporedje $D_i \in D_i$, če in samo če $f_i(D_i, d_{h_i}) = (D_{i-d_{h_i}+1}, d_{h_i-1}) \in D_{i-d_{h_i}+1}$

Posledica 9.7. [3] Naj bo $C = (c_1, c_2, \dots, c_{h_i}, \dots, c_{i-z}, c_{i-z+1}) \in D_{i-z+1}$, kjer je c_{h_i} najmanjša stopnja večja od ena, in $2 \leq z \leq c_{h_i}$. Zaporedje $D_i = (d_1, d_2, \dots, d_i) \in f_i^{-1}(C, c_{h_i})$, če in samo če

$$d_k = \begin{cases} c_k & k \leq h_i; \\ z & k = h_i + 1; \\ 1 & \text{sicer. [3]} \end{cases}$$

Sledeč primer ponazarja *Posledico 9.7.* [3]:

$$f^{-1}(65111111111) \supseteq \{655111111111111, 654111111111111, 653111111111111, 652111111111111\}.$$

Možno je neposredno izpeljati *Posledico 2.3.*, s pomočjo rekurzije, za naštevaje zaporedij stopenj dreves. Izpeljava C ++ je bila izvedena z 2.3 GHz Intel Core i5 procesorjem s 4 GB 1333 MHz DDR3 RAM. Delovanje algoritma je predstavljeno v Tabeli 1. [3]

Tabela 1: Uspešnost algoritma za štetje zaporedja stopenj dreves. Za zaporedje stopenj dolžine n , $S(n)$ označuje število zaporedij stopenj, $T(n)$ označuje skupni čas poteka in $S(n)/T(n)$ označuje amortiziran čas izvajanja za tvorjenje zaporedja. [3]

n	$S(n)$	$T(n)$	$T(n)/S(n)$ [ms]	n	$S(n)$	$T(n)$	$T(n)/S(n)$ [ms]
21	490	3.031ms	0.00618571	34	8349	0.041s	0.00502455
22	627	3.989ms	0.00636204	35	10143	0.051s	0.00501538
23	792	4.875ms	0.00615530	40	26015	0.098s	0.00378359
24	1002	6.082ms	0.00606986	50	147273	0.612s	0.00415907
25	1255	7.884ms	0.00628207	60	715220	3.230s	0.00451627
26	1575	9.996ms	0.00634667	70	3087735	15.300s	0.00495518
27	1958	13.083ms	0.00668182	80	12132164	1m3s	0.00520250
28	2436	14.434ms	0.00592529	90	44108109	4m5s	0.00556759
29	3010	20.086ms	0.00667309	100	150198136	14m27s	0.00577865
30	3718	18.821ms	0.00506213	110	483502844	51m26s	0.00635496
31	4565	23.031ms	0.00504513	120	1482074143	2h39m8s	0.00647126
32	5604	29.523ms	0.00526820	130	4351078600	7h36m43s	0.00629813
33	6842	33.430ms	0.00488600	140	12292341831	21h7m44s	0.00618793

Čas, potreben za tvorjenje zaporedja stopenj nakazuje, da algoritem teče v konstantnem amortiziranem času, tako da je skupni čas delovanja celotnega programa enak $O(S(n))$. Podobno kot v primeru splošnih grafov, je precej težko določiti natančno kompleksnost algoritma kot funkcijo n , kar ostaja odprt problem. [3]

Testirali smo in analizirali algoritem naštevanja zaporedij stopenj do $n = 140$, za katerega je algoritem porabil približno 21 ur. Ker imamo vsa zaporedja stopenj določene dolžine, bomo v naslednjem poglavju nadaljevali z določanjem dreves z minimalnim indeksom ABC. [3]

10 Drevesa z minimalnim indeksom povezanosti atomske vezi

Naš algoritem za prepoznavanje dreves z minimalnim indeksom ABC je sestavljen iz naslednjih korakov [3]:

1. Oštevilčimo vsa zaporedja stopenj, kot je opisano v prejšnjem poglavju. [3]
2. Poiščimo ustrezna \gg požrešna drevesa \ll za vsako ustvarjeno zaporedje stopenj, z uporabo *Izreka 9.4.* [3]
3. Izračunajmo indeks ABC vsakega \gg požrešnega drevesa \ll in izberimo drevo z minimalno vrednostjo. [3]

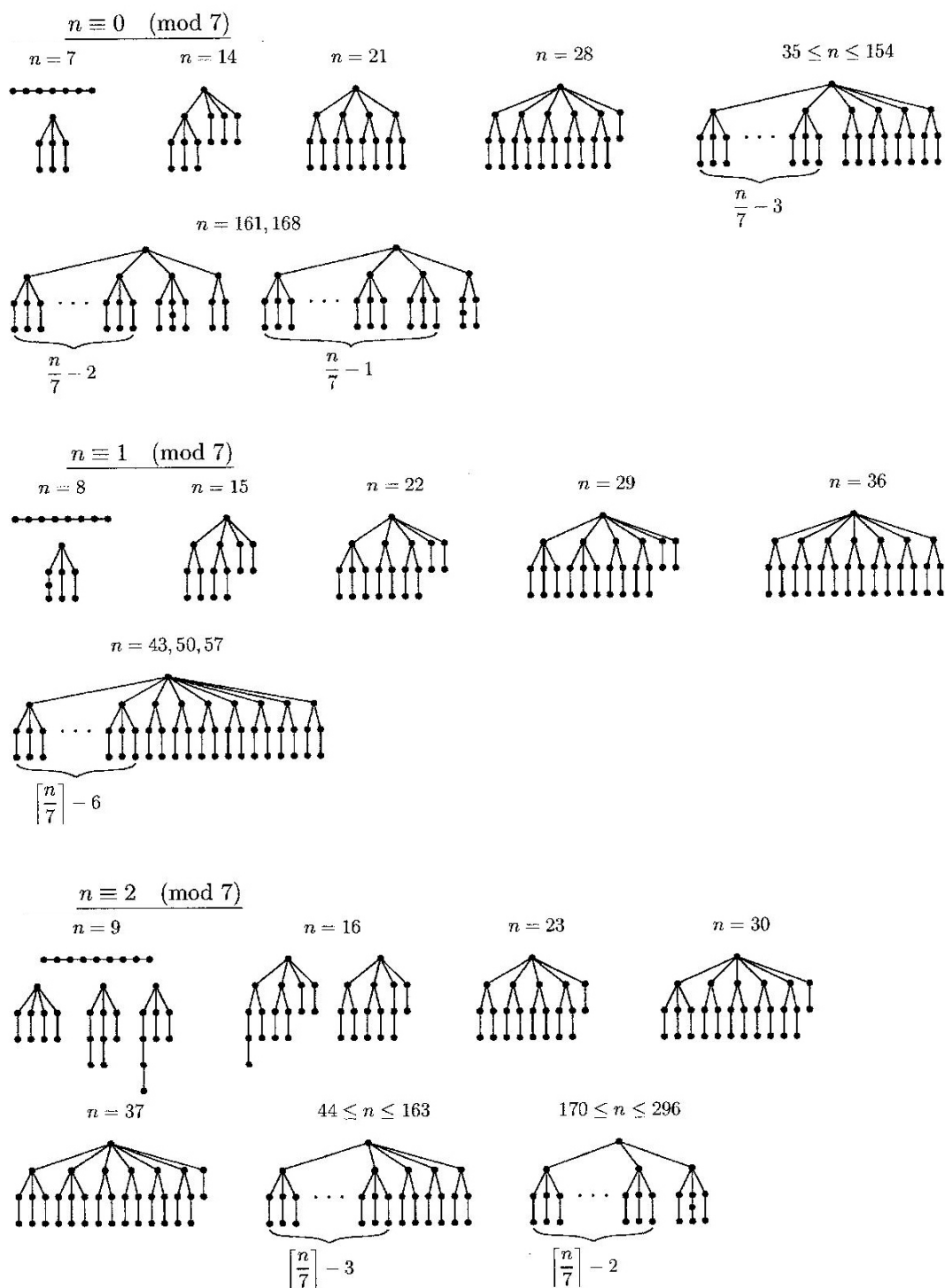
Trditev 10.1. [3] Če je $n \geq 10$, potem drevo z n vozlišči, ki ima najmanjši ABC indeks ne vsebuje pendantne povezave dolžine $k \geq 4$.

Trditev 10.2. [3] Če je $n \geq 10$, potem drevo z n vozlišči, ki ima najmanjši ABC indeks vsebuje vsaj eno pendantno povezavo dolžine $k = 3$.

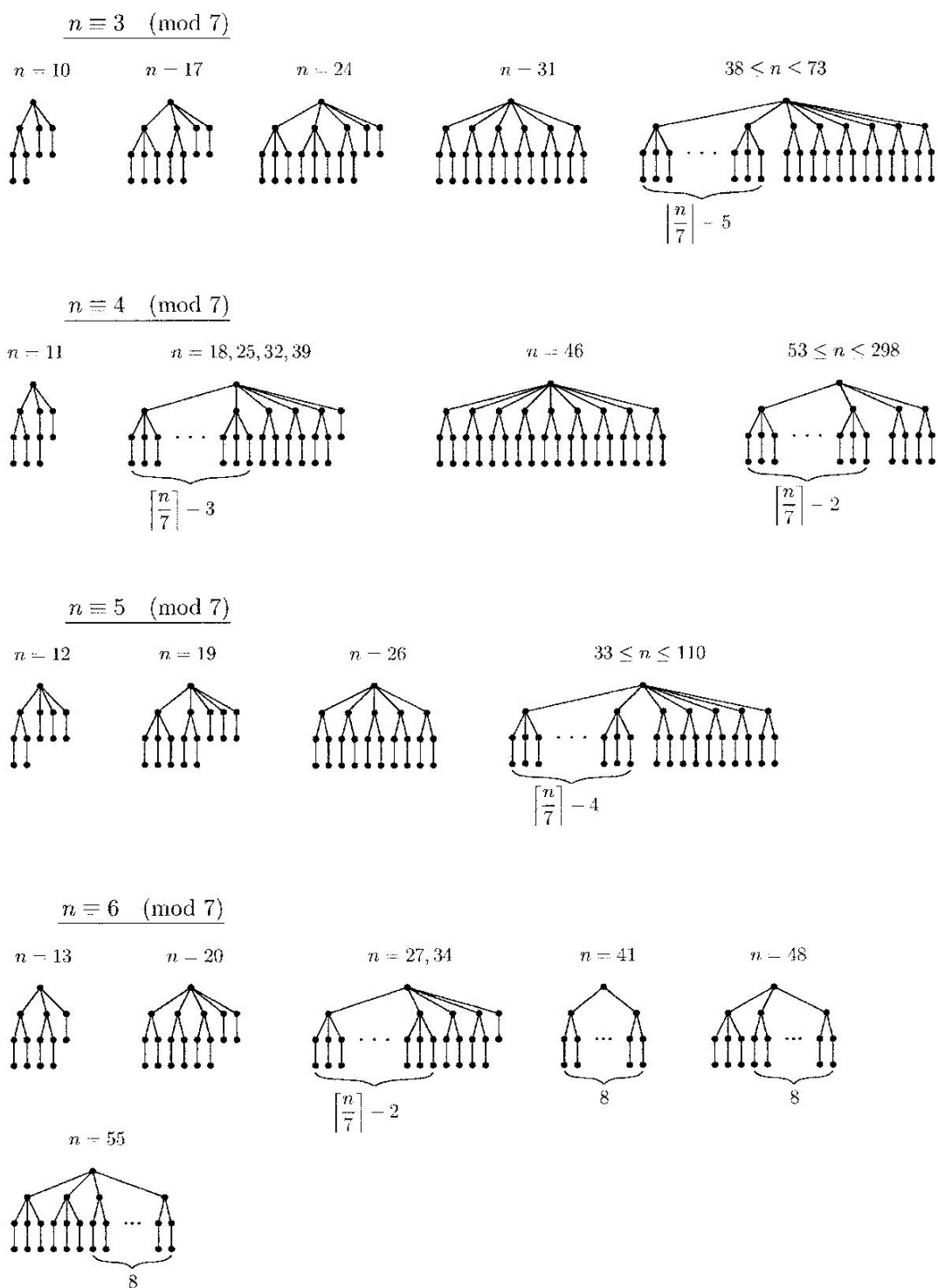
Trditev 10.3. [3] Če je $n \geq 10$, potem vsaka pendantna točka drevesa G z n vozlišči, ki ima najmanjši ABC indeks pripada pendantni povezavi dolžine k , $2 \leq k \leq 3$.

Upoštevajoč vse te rezultate, ki vidno zmanjšujejo število zaporedij stopenj, smo izvedli algoritem, ki identificira drevesa z minimalnim indeksom ABC. Na sami platformi procesorja, smo izračunali vsa drevesa z minimalnim indeksom ABC do reda 300 v približno 15 dneh. Vsa pridobljena drevesa z minimalnim indeksom ABC so povzeta na Sliki 4 in Sliki 5. Zaradi popolnosti, smo vključili tudi rezultate za $7 \leq n \leq 31$. Za $n \leq 6$, so drevesa z minimalnim ABC indeksom, poti (povezave) P_n in te so izpuščene na slikah. [3] Iz primerov na Sliki 4 in Sliki 5 lahko opazimo: Če je Δ_1 maksimalna stopnja drevesa z minimalnim ABC indeksom z n vozlišči, in Δ_2 je maksimalna stopnja drevesa z minimalnim ABC indeksom z $n + 1$ vozlišči, potem $\Delta_2 = \Delta_1 \pm 1$. Ne pozabimo, da ta ugotovitev ni nujno resnična za večja drevesa z minimalnim ABC indeksom.

Vendar z uporabo zgoraj navedenih omejitev, lahko bistveno pospešimo izračune. Na ta način nam je uspelo dobiti rezultate, ki privedejo do zavračanja nekaterih obstoječih hipotez. Verjetni strukturni računski model temelji na glavni predpostavki, da drevo z minimalnim ABC indeksom poseduje osrednje vozlišče, ali navedeno z drugimi besedami, temelji na predpostavki, da vozlišča drevesa z minimalnim ABC indeksom, ki je stopnje ≥ 3 inducirajo graf zvezde. Konfiguracija T_4 na Sliki 6, za $n \equiv 4(\text{mod}7)$ in $n \geq 312$, je protiprimer za to domnevo. [3]



Slika 4: Drevesa reda n , $7 \leq n \leq 300$, z minimalnim ABC indeksom, pridobljena z računalniškim iskanjem - primeri $n \equiv 0, 1, 2 \pmod{7}$. [3]



Slika 5: Drevesa reda n , $7 \leq n \leq 300$, z minimalnim ABC indeksom, pridobljena z računalniškim iskanjem - primeri $n \equiv 3, 4, 5, 6 \pmod{7}$. [3]

Z uporabo zgornje omejitve na maksimalni stopnji drevesa z minimalnim ABC indeksom, smo dobili tudi drug protiprimer. Namreč, konfiguracija T_2 na Sliki 6 kaže različne strukture drevesa z minimalnim ABC indeksom, v primeru, ko je $n \equiv 2 \pmod{7}$ in $n \geq 1185$. [3]

Kot posledico teh protiprimerov predstavljamo popravljeno različico domnev po Gutmanu in Furtuli [17] o drevesih z minimalnim indeksom ABC. Preden jo navedemo je vredno omeniti, da so prvotne različice domneve po Gutmanu in Furtuli, z nekoliko popravki, vendar še vedno podpirajoč idejo o obstoju osrednje točke, bile predstavljene kot resnične za tako imenovana Kragujevac drevesa [6]. [3]

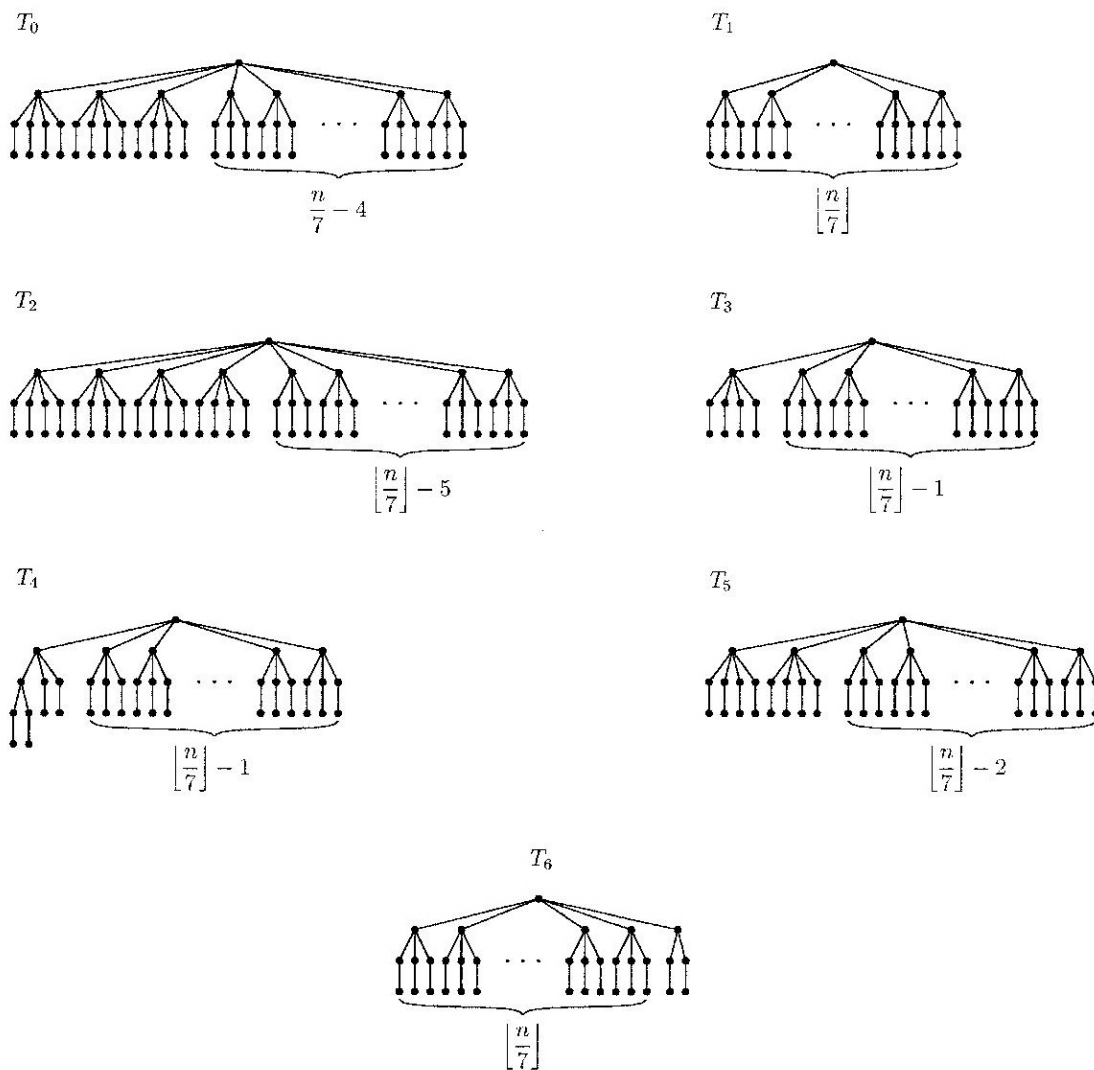
Domneva 10.4. [3, 5] *Naj bo G drevo z najmanjšim indeksom ABC med vsemi drevesi velikosti n .*

- (i) če $n \equiv 0 \pmod{7}$ in $n \geq 175$, potem ima G strukturo T_0 , prikazano na Sliki 6.
- (ii) če je $n \equiv 1 \pmod{7}$ in $n \geq 64$, potem ima G strukturo T_1 , prikazano na Sliki 6.
- (iii) če $n \equiv 2 \pmod{7}$ in $n \geq 1185$, potem ima G strukturo T_2 , prikazano na Sliki 6.
- (iv) če je $n \equiv 3 \pmod{7}$ in $n \geq 80$, potem ima G strukturo T_3 , prikazano na Sliki 6.
- (v) če $n \equiv 4 \pmod{7}$ in $n \geq 312$, potem ima G strukturo T_4 , prikazano na Sliki 6.
- (vi) če $n \equiv 5 \pmod{7}$ in $n \geq 117$, potem ima G strukturo T_5 , prikazano na Sliki 6.
- (vii) če je $n \equiv 6 \pmod{7}$ in $n \geq 62$, potem ima G strukturo T_6 , prikazano na Sliki 6.

Dobljeni računski rezultati kažejo tudi sledečo razširitev *Trditve 10.2.* . [3]

Domneva 10.5. [3] *Drevo z minimalnim ABC indeksom reda $n > 1178$ ne vsebuje pendantne poti (povezave) dolžine tri.*

Želeli bi poudariti, da izračuni kažejo le manjše kršitve domnev za središčno točko. Da bi ugotovili, kako velika je ta kršitev je še vedno odprta težava. Izračuni so tudi okrepili že obstoječe verovanje, da je drevo z minimalnim ABC indeksom edinstveno za drevesa reda večjega od 168. [3]



Slika 6: Primeri dreves z minimalnim ABC indeksom, ki pripadajo *Domnevi* 10.4.. [3]

11 Drevesa z minimalnim ABC indeksom s stopnjo $n = 30$

V tem delu bomo predstavili rezultate, pridobljene z obsežnim računalniškim iskanjem dreves z minimalnim ABC indeksom. Določili smo drevesa, ki imajo največ 30 vozlišč. Tabela 2 prikazuje število dreves z n vozlišči, ki so bila upoštevana v tem eksperimentu. [7]

Tabela 2: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s stopnjo $n = 30$ [7]

n	number of trees	n	number of trees
7	11	19	317955
8	23	20	823065
9	47	21	2144505
10	106	22	5623756
11	235	23	14828074
12	551	24	39299897
13	1301	25	104636890
14	3159	26	279793450
15	7741	27	751065460
16	19320	28	2023443032
17	48629	29	5469566585
18	123867	30	14830871802

V Tabeli 3 so upodobljena drevesa, ki imajo minimalni ABC indeks med drevesi z danim n številom točk, $n \in [7, 30]$. Za $n \in [4, 6]$, je edino drevo z n vozlišči, ki ima minimalni ABC indeks, povezava P_n . [7]

Tabela 3: Drevesa, ki imajo minimalni ABC indeks, z danim n številom točk, $n \in [7, 30]$ [7]

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
7	
8	
9	
10	
11	

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
12	
13	
14	
15	

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
16	
17	
18	
19	

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
20	
21	
22	
23	

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
24	
25	
26	
27	

# vertices	Trees with minimal <i>ABC</i> index
28	
29	
30	

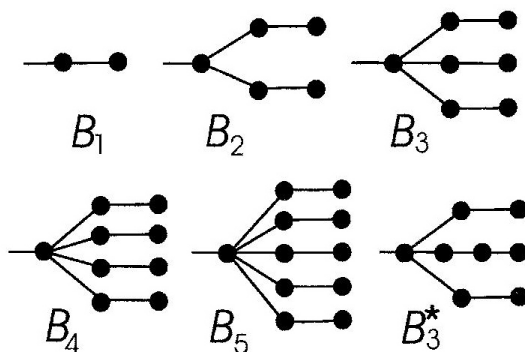
Na podlagi podatkov, prikazanih v Tabeli 3, lahko sklepamo naslednje: [7]

Ugotovitev 1: Ne obstaja edinstveno drevo z n vozlišči, ki ima minimalni ABC indeks. [7]

Ugotovitev 2: Za $n \leq 9$, drevo z n vozlišči (ali eden od dreves z n vozlišči), ki ima minimalni ABC indeks je povezava P_n . Za $n \geq 10$ se to ne more zgoditi, saj je vedno mogoče zgraditi drevo T z $ABC(T) < ABC(P_n)$. [7]

12 Drevesa z minimalnim ABC indeksom stopnje $n > 30$

Zlahka se da pokazati, da so graf z n vozlišči in drevo z n vozlišči, ki imajo maksimalen indeks ABC, popolni graf in zvezda. Po drugi strani pa, struktura drevesa z n vozlišči, ki ima minimalni ABC indeks (ki je prav tako povezan graf z n vozlišči ter minimalnim ABC indeksom) je za zdaj še nejasna. [17] V prejšnjem poglavju so bila predstavljena drevesa z minimalnim ABC indeksom in n vozlišči za $n = 30$. Z analizo strukture teh dreves lahko vidimo, da so ta sestavljena iz osrednjega vozlišča visoke stopnje za katerega so povezane veje tipa B_1 , B_2 in B_3 , glej Sliko 7. [17] Dokazano je tudi, da drevo z minimalnim ABC indeksom lahko poseduje največ eno zunanjo povezavo z (natanko) tremi vozlišči stopnje dva. [17]



Slika 7: Veje, ki smo jih upoštevali pri iskanju dreves z minimalnim ABC indeksom. [17]

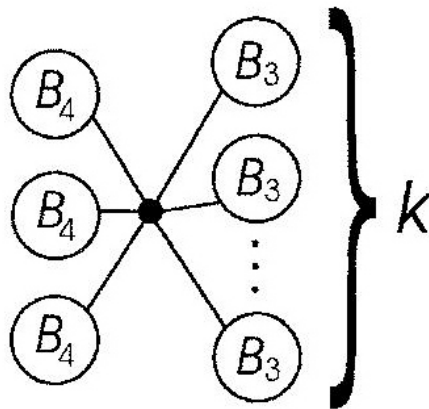
Lahko si predstavljamo, da se za $n > 30$, tudi veje podobne B_2 in B_3 lahko pojavijo v drevesih z minimalnim ABC indeksom. Zato smo upoštevali tudi veje B_4 in B_5 prikazane na Sliki 7. [17] Naj bo x_i število vej tipa B_i , $i = 1, 2, 3, 4, 5$, ki so povezane z osrednjim vozliščem, ki ima 2, 5, 7, 9 in 11 točk (vozlišč). [17] Potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom

$$n = 1 + 2x_1 + 5x_2 + 7x_3 + 9x_4 + 11x_5 + x_6 \quad (1)$$

vozlišč, kjer $x_6 \in \{0, 1\}$ vsebuje zunanje povezave treh vozlišč stopnje 2. [17] Parametri $n, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6$ v enačbi (1), so nenegativna cela števila. Posamezne ABC-vrednosti so bile izračunane in drevesa z najmanjšim ABC indeksom so bila identificirana. [17]

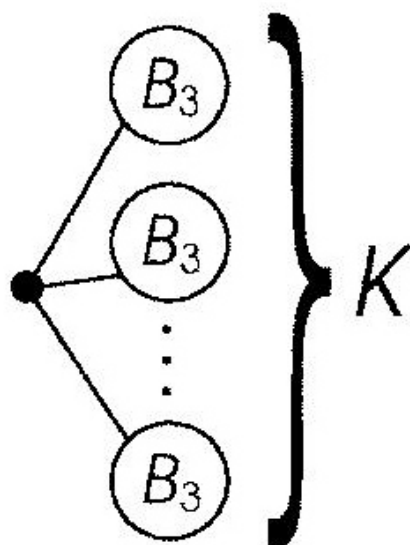
Da je bila domneva smiselna je razvidno iz dejstva, da smo za vse obravnavane vrednosti n našli $x_5 = 0$, t.j., veja B_5 nikoli ni bila prisotna. [17] Izračuni so bili narejeni do $n = 700$ in ustrezna drevesa z minimalnim ABC indeksom so bila identificirana. Ugotovljeno je bilo, da so na začetku strukture tako določenih dreves z minimalnim ABC indeksom bile dokaj neenakomerne, vendar, ko je n postal dovolj velik, so se pojavile pravilnosti. [17]

Če je $n \equiv 0 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 21$ in $n = 7k + 28$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 8. [17]



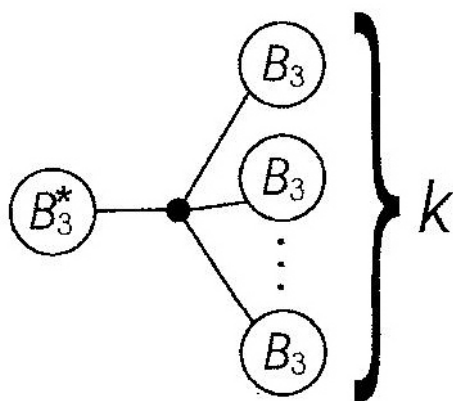
Slika 8: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 28$ točkami, za $k \geq 21$. Najmanjše tako drevo ima $n = 175$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]

Če je $n \equiv 1 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 9$ in $n = 7k + 1$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 9. [17]



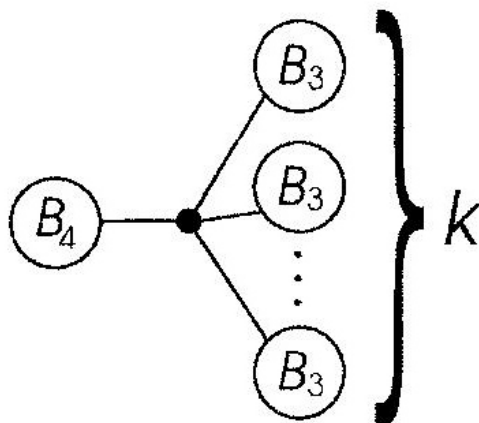
Slika 9: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 1$ točkami, za $k \geq 9$. Najmanjše tako drevo ima $n = 64$ točk. Oblika veje B_3 je prikazana na Sliki 7. [17]

Če je $n \equiv 2 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 23$ in $n = 7k + 9$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 10. [17]



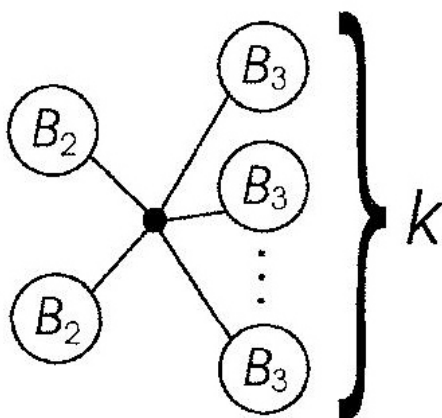
Slika 10: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k + 9$ točkami, za $k \geq 23$. Najmanjše tako drevo ima $n = 170$ točk. Oblika vej B_3 in B_3^* je prikazana na Sliki 7. [17]

Če je $n \equiv 3 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 10$ in $n = 7k + 10$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 11. [17]



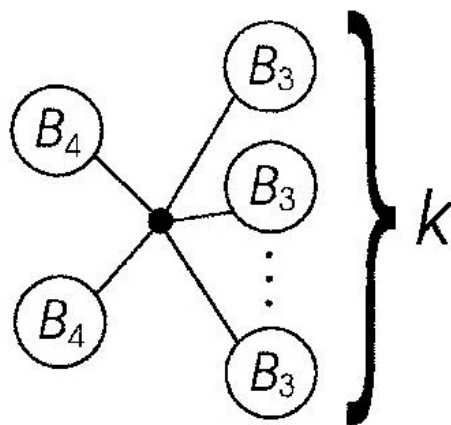
Slika 11: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k+10$ točkami, za $k \geq 10$. Najmanjše tako drevo ima $n = 80$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]

Če je $n \equiv 4 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 6$ in $n = 7k + 11$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 12. [17]



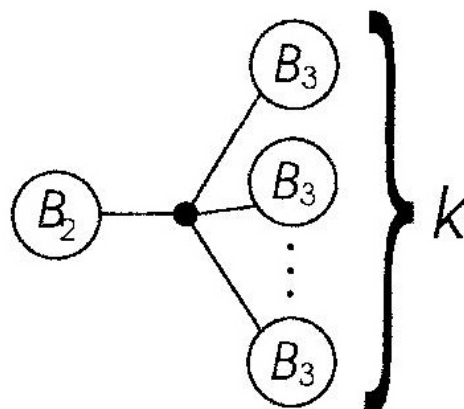
Slika 12: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k+11$ točkami, za $k \geq 6$. Najmanjše tako drevo ima $n = 53$ točk. Oblika vej B_2 in B_3 je prikazana na Sliki 7. [13, 17]

Če je $n \equiv 5 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 14$ in $n = 7k + 19$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom, strukturo kot je prikazana na Sliki 13. [17]



Slika 13: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k+19$ točkami, za $k \geq 14$. Najmanjše tako drevo ima $n = 117$ točk. Oblika vej B_3 in B_4 je prikazana na Sliki 7. [17]

Če je $n \equiv 6 \pmod{7}$, kjer je $k \geq 8$ in $n = 7k + 6$, potem ima drevo z minimalnim ABC indeksom strukturo, kot je prikazana na Sliki 14. [17]

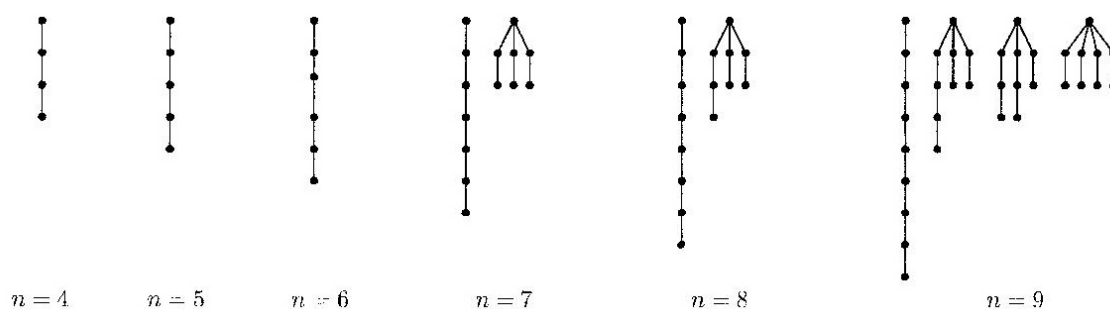


Slika 14: Drevesa z minimalnim ABC indeksom s $7k+6$ točkami, za $k \geq 8$. Najmanjše tako drevo ima $n = 62$ točk. Oblika vej B_2 in B_3 je prikazana na Sliki 7. [17]

Zgoraj navedeni rezultati veljajo ob predpostavki, da je osrednje vozlišče minimalnega ABC drevesa edinstveno. [17]

13 Znane strukturne lastnosti dreves z minimalnim ABC indeksom in nekateri z njimi povezani rezultati

Drevesa, ki imajo minimalni ABC indeks reda manj kot 10 so prikazana na Sliki 15. Za poenostavitev bomo v nadaljevanju predpostavili, da so obravnavana drevesa stopnje vsaj 10. [11]



Slika 15: Drevesa z minimalnim ABC indeksom reda n , $4 \leq n \leq 9$. [11]

Izrek 13.1. [11] Drevesa z n vozlišči z minimalnim ABC indeksom ne vsebujejo notranje poti katerekoli dolžine $k \geq 1$.

Izrek 13.2. [11] Drevesa z n vozlišči z minimalnim ABC indeksom ne vsebujejo pendantnih vozlišč dolžine $k \geq 4$.

Takojšnja, a zelo pomembna posledica *Izreka* 13.1. je sledeča. [11]

Posledica 13.3. [11] Naj bo T drevo z najmanjšim indeksom ABC. Potem podgraf induciran s točkami od T , katerega stopnje so večje od dva je tudi drevo.

Izboljšanje *Izreka* 13.2. sta podala Lin in Gao. [11]

Izrek 13.4. [11] Vsaka pendantna točka drevesa z n vozlišči, ki ima minimalni indeks ABC pripada pendantni poti (povezavi) dolžine k , $2 \leq k \leq 3$.

Izrek 13.5. [7] Drevo z n vozlišči, ki ima minimalni indeks ABC vsebuje vsaj eno pendantno pot (povezavo) dolžine 3.

Preden nevedemo naslednji pomembni rezultat, obravnavajmo definicijo \gg požrešnega drevesa \ll , ki jo je pripravil Wang [28]. [11]

Definicija 13.6. [11] Predpostavimo, da so dane stopnje ne-pendantnih točk, potem \gg požrešno drevo \ll dobimo z naslednjim \gg požrešnim algoritmom \ll :

1. Označimo točke, ki imajo največjo stopnjo z v (korenina).
2. Označimo sosedne točke od v kot v_1, v_2, \dots , dodelimo jim največjo možno stopnjo tako, da $d(v_1) \geq d(v_2) \geq \dots$
3. Označimo sosednje točke od v_1 (razen od v) kot v_{11}, v_{12}, \dots tako, da bodo zavzele največje možne stopnje in da $d(v_{11}) \geq d(v_{12}) \geq \dots$ potem naredimo enako za v_2, v_3, \dots
4. Ponovimo 3. točko za vse na novo označene točke, tako, da vedno začnemo s sosednimi točkami od označene točke, z največjo, od katere sosedje še niso označeni.

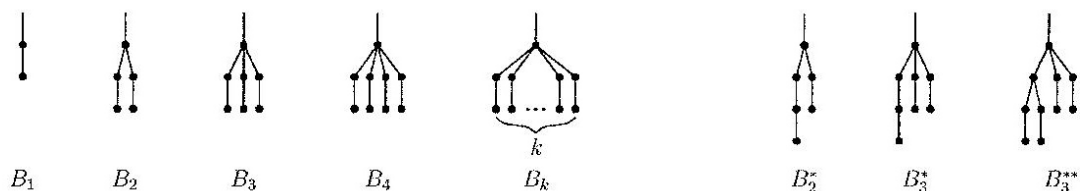
Naslednji rezultat, po Gan, Liu in You [29] označuje drevesa z minimalnim ABC indeksom s predpisanimi zaporedji stopenj.

Izrek 13.7. [11] Glede na predpisano zaporedje stopenj, \gg požrešno drevo \ll zmanjšuje indeks ABC.

Izrek 13.8. [11] Če drevo z minimalnim ABC indeksom ima tri vozlišča v_1, v_2, v_3 , ki so med sabo sosednja tako, da $d(v_1) \geq d(v_2) \geq d(v_3)$, potem v_3 ne more biti sosednji z v_1 in v_2 istočasno.

Za popolno karakterizacijo drevesa z minimalnim ABC indeksom, poleg teoretično dokazanih lastnosti, je računalniško podprto iskanje lahko v izredno pomoč. Zato bi želeli omeniti v nadaljevanju nekaj računalniških rezultatov. [11] Prvi značilni primer uporabe računalniškega iskanja imamo pri Furtuli v [30], kjer so bila izračunana drevesa z minimalnim indeksom ABC do velikosti 30, in je bila določena začetna domneva splošne strukture dreves z minimalnim ABC indeksom. Tam, je bil uporabljen \gg surovi \ll pristop generiranja vseh dreves določenega vrstnega reda, ki je bil pospešen s pomočjo porazdeljene računalniške platforme. [11] Verjetni strukturni računski model

temelji na osnovi glavne predpostavke, da drevo z minimalnim ABC indeksom poseduje enojno osrednjo točko, ali povedano z drugimi besedami, da temelji na predpostavki, da točke drevesa z minimalnim ABC indeksom stopnje ≥ 3 inducirajo graf zvezde. Ta predpostavka je preklicana s protiprimeri. V zvezi s tem je vredno omeniti, da za poseben razred dreves, tako imenovana Kragujevac drevesa [6], ki so sestavljena iz osrednje točke in B_k vej, $k \geq 1$ (glej Sliko 16 za ponazoritev), so drevesa z minimalnim ABC indeksom bila v celoti predstavljena s strani Hosseini, Ahmadi in Gutmana v [6]. [11] Z upoštevanjem samo zaporedij stopenj in nekatere znane lastnosti drevesa z minimalnim indeksom ABC je Dimitrov izračunal drevesa z minimalnim indeksom ABC do velikosti 300 [3]. [11]



Slika 16: Veje B_k . Vozlišče od veje B_k , stopnje $k + 1$, je obravnavano kot koren veje. [11]

14 Zaključek

Molekularnih deskriptorji igrajo pomembno vlogo v kemiji, farmakologiji, itd. Med njimi imajo topološki indeksi pomembno mesto. Indeks povezljivost, χ , je topološki indeks, ki ga je uvedel leta 1975 Milan Randić za odražanje molekularne razvejanosti. Vendar pa so mnoge fizikalno-kemijske lastnosti odvisne od dejavnikov dokaž različnih od razvejanosti. Da bi se to upoštevalo, in hkrati ohranil duh Randićevega indeksa, je Ernesto Estrada predlagal nov topološki indeks, imenovan indeks povezanosti atomske vezi (ABC indeks). To prikazuje odlično korelacijo s toplotno tvorbo alkanov. Indeks je definiran kot:

$$ABC(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d_u + d_v - 2}{d_u d_v}},$$

kjer je $E(G)$ množica stranic in d_u, d_v so stopnje vozlišč u in v od G . [15]

Spomnimo se, da je povezan graf znan kot molekularni graf, če je njegova največja stopnja največ štiri. [15] Furtula je določil minimalno in maksimalno vrednost tega indeksa za molekularno drevo in pokazal, da je zvezda edinstveno drevo z največjim ABC indeksom, če je dano število točk. Kinkar Ch. Das je podal zgornjo in spodnjo mejo za ABC indeks splošnih grafov z uporabo parametrov, kot so število točk, stranic, pendantnih točk in minimalnih ne-pendantnih točk. V zadnjem času je Rundan Xing pokazal zgornjo mejo za ABC indeks dreves z odličnim ujemanjem in fiksno najvišjo stopnjo. [15] Karakterizacija oz. opredelitev grafov z najmanjšim ABC indeksom je, kljub številnim poskusom, še vedno odprt problem. Znano je le, da povezan graf z minimalnim ABC indeksom mora biti drevo, bile pa so še določene nekatere strukturne značilnosti teh dreves. [16]

Poleg teoretično dokazanih lastnosti, je bilo tudi kar nekaj računalniških rezultatov. [11] Prvi značilni primer uporabe računalniškega iskanja imamo pri Furtuli v [30], kjer so bila izračunana drevesa z minimalnim indeksom ABC do velikosti 30, in je bila določena začetna domneva splošne strukture dreves z minimalnim ABC indeksom. Tam, je bil uporabljen \gg *surovi* \ll pristop generiranja vseh dreves določenega vrstnega reda, ki je bil pospešen s pomočjo porazdeljene računalniške platforme. [11] Verjetni strukturni računski model temelji na osnovi glavne predpostavke, da drevo z minimalnim ABC indeksom poseduje enojno osrednjo točko, ali povedano z drugimi

besedami, da temelji na predpostavki, da točke drevesa z minimalnim ABC indeksom stopnje ≥ 3 inducirajo graf zvezde. Ta predpostavka je preklicana s protiprimeri. V zvezi s tem je vredno omeniti, da za poseben razred dreves, tako imenovana Kragujevac drevesa [6], ki so sestavljena iz osrednje točke in B_k vej, $k \geq 1$ za ponazoritev), so drevesa z minimalnim ABC indeksom bila v celoti predstavljena s strani Hosseini, Ahmadi in Gutmana v [6]. [11] Z upoštevanjem samo zaporedij stopenj in nekatere znane lastnosti drevesa z minimalnim indeksom ABC je Dimitrov izračunal drevesa z minimalnim indeksom ABC do velikosti 300 [3]. [11]

15 Literatura

- [1] K. CH. DAS, I. GUTMAN in B. FURTULA, On atom-bond connectivity index, *Chemical Physics Letters* 511 (2011), 452-454. (*Citirano na straneh II, III, 1 in 5.*)
- [2] K. CH. DAS, Atom-bond connectivity index of graphs, *Discrete Applied Mathematics* 158 (2010), 1181-1188. (*Citirano na straneh 5, 11 in 15.*)
- [3] D. DIMITROV, Efficient computation of trees with minimal atom-bond connectivity index, *Applied Mathematics and Computation* Volume 224 (2013), 663-670. (*Citirano na straneh VI, VII, 5, 8, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 43 in 45.*)
- [4] J. CHEN in X. GUO, Extreme atom-bond connectivity index of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 65 (2011), 713-722. (*Citirano na straneh II, III in 1.*)
- [5] J. LIU in J. CHEN, Further properties of trees with minimal atom-bond connectivity index, *Abstract and Applied Analysis* Volume 2014 (2014), 10 pages. (*Citirano na strani 26.*)
- [6] S.A. HOSSEINI, M.B. AHMADI in I. GUTMAN, Kragujevac trees with minimal atom-bond connectivity index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 71 (2014), 5-20. (*Citirano na straneh 26, 43 in 45.*)
- [7] I. GUTMAN, B. FURTULA in M. IVANOVIĆ, Notes on trees with minimal atom-bond connectivity index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 67 (2012), 467-482. (*Citirano na straneh VI, 28, 29, 35 in 42.*)
- [8] R. XING, B. ZHOU in F. DONG, On atom-bond connectivity index of connected graphs, *Discrete Applied Mathematics* Volume 159, Issue 15 (2011), 1617-1630. (*Citirano na straneh II, III in 1.*)
- [9] K. CH. DAS, I. GUTMAN in B. FURTULA, On atom-bond connectivity index, *FILOMAT* Volume 25, Number 4 (2012), 733-738. (*Citirano na strani 5.*)

- [10] B. HOROLDAGVA in I. GUTMAN, On some vertex-degree-based graph invariants, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 65 (2011), 723-730. (*Citirano na straneh II, III, 1 in 5.*)
- [11] D. DIMITROV, On structural properties of trees with minimal atom-bond connectivity index, *Discrete Applied Mathematics* Volume 172 (2014), 28-44. (*Citirano na straneh VIII, 5, 17, 41, 42, 43, 44 in 45.*)
- [12] W. LIN, T. GAO, Q. CHEN in X. LIN, On the minimal ABC index of connected graphs with given degree sequence, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 69 (2013), 571-578. (*Citirano na straneh II, III in 1.*)
- [13] M. B. AHMADI, S. A. HOSSEINI in P. SALEHI NOWBANDEGANI, On trees with minimal atom bond connectivity index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 69 (2013), 559-563. (*Citirano na straneh VII in 39.*)
- [14] W. LIN, X. LIN, T. GAO in X. WU, Proving a conjecture of Gutman concerning trees with minimal ABC index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 69 (2013), 549-557. (*Citirano na straneh II, III in 1.*)
- [15] L. GAN, H. HOU in B. LIU, Some results on atom-bond connectivity index of graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 66 (2011), 669-680. (*Citirano na straneh 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16 in 44.*)
- [16] I. GUTMAN, B. FURTULA, M. B. AHMADI, S. A. HOSSEINI, P. S. NOWBANDEGANI in M. ZARRINDERAKHT, The ABC Index Conundrum, *FILOMAT* Volume 27, Number 6 (2013), 1075-1083. (*Citirano na straneh II, III, 1 in 44.*)
- [17] I. GUTMAN in B. FURTULA, Trees with smallest atom-bond connectivity index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 68 (2012), 131-136. (*Citirano na straneh VII, VIII, 26, 36, 37, 38, 39 in 40.*)
- [18] J. DEVILLERS in A T. BALABAN , *Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPR*, Gordon and Breach, Amsterdam, 1999. (*Citirano na strani 5.*)
- [19] N. S. SCHMUCK, *The Wiener index of a graph*, Diploma thesis, Graz University of Technology, 2010. (*Citirano na strani 5.*)
- [20] A. T. BALABAN, Highly discriminating distance-based topological index, *Chemical Physics Letters* Volume 89 (1982), 399-404. (*Citirano na strani 5.*)
- [21] I. GUTMAN, X. LI in Y. SHI, *Graph energy*, Springer, New York, 2012. (*Citirano na strani 5.*)

- [22] B. ZHOU in D. STEVANOVIĆ, A note on Zagreb indices, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 56 (2006), 571-578. (Citirano na strani 5.)
- [23] H. LIU, M. LU in F. TIAN, On the Randić index, *Journal of mathematical chemistry* Volume 38. Number 3 (2005), 345-354. (Citirano na strani 5.)
- [24] H. HOSOYA, Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons, *Bulletin of the chemical society of Japan* Volume 44 (1971), 2332-2339. (Citirano na strani 5.)
- [25] H. DENG, S. RADENKOVIĆ in I. GUTMAN, The Estrada index, *Zbornik radova* 13(21) (2009), 123-139. (Citirano na strani 5.)
- [26] R. TODESCHINI, V. CONSONNI, M. PAVAN, A. MAURI, D. BALLABIO in A. MANGANARO Molecular descriptors. V *Strasbourg University Louis Pasteur*, 2008, . (Citirano na strani 5.)
- [27] R. XING, B. ZHOU in Z. DU, Further results on atom-bond connectivity index of trees, *Discrete Applied Mathematics* 158 (2010), 1536-1545. (Citirano na straneh 9 in 14.)
- [28] H. WANG, Extremal trees with given degree sequence for the Randić index, *Discrete Mathematics* 308 (2008), 3407-3411. (Citirano na straneh 18 in 42.)
- [29] L. GAN, B. LIU in Z. YOU, The ABC index of trees with given degree sequence, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 68 (2012), 137-145. (Citirano na straneh 18 in 42.)
- [30] B. FURTULA, I. GUTMAN, M. IVANOVIĆ in D. VUKIČEVIĆ, Computer search for trees with minimal ABC index, *Applied Mathematics and Computation* 219 (2012), 767-772. (Citirano na straneh 42 in 44.)
- [31] *Drevo (podatkovna struktura)*,
<http://wiki.fmf.uni-lj.si/wiki/Drevo> (podatkovna struktura). (Datum ogleda: 25. 8. 2014.) (Citirano na straneh VII, 6, 7 in 8.)