

Uiterste resultate vir twee grafiekindekse

E (Elize) Swartz, T Vetrík, ECM Maritz

Departement Wiskunde en Toegepaste Wiskunde, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Elize Swartz **E-pos:** swartz1@ufs.ac.za

Extremal results for two graph indices: We determine new lower bounds on the general sum-connectivity index and an upper bound on the general Randić index for trees with a given number of vertices and maximum degree. We also present the corresponding extremal trees for the bounds given.

'n Topologiese grafiekindeks is 'n wiskundige formule wat toegepas kan word op enige grafiek wat verbindings tussen atome van 'n molekule of kristal voorstel. Sommige van die eerste topologiese indekse, ook genoem molekulêre beskrywings, is gedefinieer en gebruik deur chemici om die aard van molekulêre vertakkings te bepaal en te karakteriseer. Dié indekse is onder andere in organiese chemie gebruik om verskeie eienskappe soos kookpunte of molekulêre volumes te voorspel. Tans is daar vele meer topologiese grafiekindekse, waarvan sommige toepassings in wiskundige chemie het.

Ons bestudeer twee indekse naamlik die algemene Randić-indeks wat eerste deur Bollobás en Erdős (1998) ondersoek is en die algemene som-verbindingsindeks wat deur Zhou en Trinajstić (2010) bekendgestel is. In grafiektoerie word 'n boom gedefinieer as 'n samehangende grafiek sonder enige siklusse. 'n Uiterste-boom word gedefinieer as 'n boom waarvoor die algemene Randić-indeks of algemene som-verbindingsindeks 'n minimum of maksimum waarde het. In die literatuur is die uiterste-bome en ooreenstemmende waardes vir die algemene som-verbindingsindeks en algemene Randić-indeks vir bome met 'n gegewe aantal nodusse reeds bepaal. Ons het wel gapings vir hierdie twee indekse vir bome met 'n gegewe aantal nodusse en ander parameters geïdentifiseer.

Ons bestudeer spesifiek bome met 'n gegewe aantal nodusse en maksimum graad. Die studie word uitgevoer deur die strukturele eienskappe van die uiterste-boom te voorspel en dan, in teenstrydigheid, aan te neem dat die uiterste-boom nie aan hierdie strukturele eienskappe voldoen nie. Grafiektransformasies word dan op die boom toegepas totdat ons die gewenste struktuur bereik. As die waardes van die algemene som-verbindingsindeks (algemene Randić-indeks) van die boom voor 'n transformasie vergelyk word met die waardes van die boom na 'n transformasie, dan bestaan daar 'n teenstelling, wat tot die gevolgtrekking lei dat die uiterste-boom wel aan die voorspelde strukturele eienskappe moet voldoen.

Sodoende word ondergrense vir die algemene som-verbindingsindeks en 'n bo-grens vir die algemene Randić-indeks vir bome met 'n gegewe aantal nodusse en maksimum graad, bepaal en bewys. Die struktuur van die ooreenstemmende uiterste-bome vir die onderskeie grense word ook ondersoek en aangebied (Swartz & Vetrík, 2023). Hiermee karakteriseer ons die uiterste-bome en voltooi ons 'n paar van die vorige gapings vir die algemene som-verbindingsindeks en algemene Randić-indeks vir bome met 'n gegewe aantal nodusse en maksimum graad.

Bibliografie

- Bollobás, B., Erdős, P., 1998, Graphs of Extremal Weights, *Ars Combinatoria* 50, 225-233.
Swartz, E., Vetrík, T., 2023, General sum-connectivity index and general Randić index of trees with given maximum degree, *Discrete Mathematics Letters* 12, 181-188.
<https://doi.org/10.47443/dml.2023.140>
Zhou, B., Trinajstić, N., 2010, On general sum-connectivity index, *Journal of Mathematical Chemistry* 47(1), 210-218. <https://doi.org/10.1007/s10910-009-9542-4>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 30-31 Oktober 2024, Universiteit van die Vrystaat. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Dr Ernie Langner (Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat); Dr Wynand Nel (Departement Rekenaarwetenskap en Informatika, Universiteit van die Vrystaat) en Prof Liesl van As (Departement Dierkunde en Entomologie, Universiteit van die Vrystaat).