

1 Naloge iz molekularnih deskriptorjev

1.1. Naj bo T drevo. Pokazi, da je enakost

$$W(T) = W(L(T)),$$

izpolnjena le ko je $T = K_1$. Ali lahko sklep posplošiš na enakost

$$W(L(L(T))) = W(T)?$$

Zakaj?

1.2. Naj bo T neko drevo na $2n+1$ vozliščih in $p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_{n+1}$ poljubna izbira vozlišč.

a) Za konkretno drevo na 7 vozliščih in neko (kot zgoraj opisano) particijo vozlišč preveri neenakost

$$\sum_{i \neq j} d(p_i, p_j) + \sum_{i \neq j} d(q_i, q_j) \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n+1} d(p_i, q_j).$$

b) Dokazi zgornjo neenakost v splošnem.

1.3. Za nek graf G in vozlišče $v \in V(G)$ pravimo, da je $\epsilon(v)$ ekcentričnost vozlišča v in jo definiramo kot

$$\epsilon(v) = \max_{u \in V(G)} d(u, v).$$

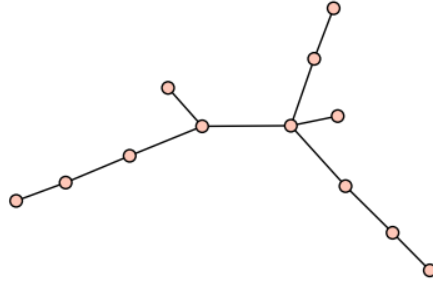
a) Za nek graf na 10 vozliščih izračunaj ekcentričnost za nekaj izbranih vozlišč.

b) Ponovi a) del za neko drevo na 12 vozliščih.

c) Naj bo T drevo. Pokazi, da je $\min_{v \in V(T)} \epsilon(v)$ dosežen v natanko eni točki (imenovani center) ali pa dveh sosednih vozliščih (bicenter) drevesa T .

1.4. Pokazi, da za ekcentričnost velja naslednji kriterij konveksnosti

$$2\epsilon(x) \leq \epsilon(z) + \epsilon(y).$$



1.5. Naj bo za nek graf G funkcija $s(x)$ definirana s predpisom

$$s(x) = \sum_{y \in V(G)} d(x, y).$$

Pokazi, da je za drevo T in vozlišča $x \in V(T)$ in $y \sim x, z \sim x$ izpolnjena naslednja neenakost

$$2s(x) < s(y) + s(z).$$

1.6. Najdi neskončno družino grafov za katere ne velja zgornja neenakost. Najdi tudi primer grafa, da bo za neka vozlišca veljala neenakost

$$2s(x) \geq s(y) + s(z)$$

1.7. Naj bo T drevo. Pokazi, da je $\min_{x \in V(T)} s(x)$ dosežen za natanko eno vozlišče T (imenovano baricenter) ali za dve sosednji vozlišči T (bibaricenter).

1.8. Za drevesi iz Slik 1 in 1 določi center, (bicenter) in baricenter (bibaricenter).

1.9. Skonstruiraj družino dreves, kjer sta center in bicenter na poljubni razdalji.

