Balada o somborskom indeksu

Ivan Gutman[*]

Sažetak

Godine 2020. predložena je u kemijskim istraživanjima primjena jednog novog topološkog indeksa kojeg je autor nazvao „somborski indeks". U kemijskoj teoriji grafova u uporabi je nekoliko desetaka ovakvih topoloških indeksa, neki već dulje od pola stoljeća. Kada se pojavio, somborski indeks je veoma brzo privukao pažnju velikog broja znanstvenika širom svijeta, a predloženo ime mu je univerzalno prihvaćeno. Nađene su brojne primjene somborskog indeksa u kemiji i farmakologiji (što je bilo za očekivati), ali i u nekim drugim područjima znanosti i inženjerstva. Objavljena su i brojna matematička istraživanja. Na taj način, ime grada Sombora postalo je znanstveni pojam, što je bila autorova želja i namjera.

U ovom članku navodimo osnovne činjenice o otkriću somborskog indeksa, izostavljajući sve matematičke i kemijske detalje. Navodimo i podatke o svjetskoj rasprostranjenosti znanstvenih istraživanja ovog indeksa, kao i nekoliko ilustrativnih primjera.

Ključne riječi: Somborski indeks, topološki indeks, kemija, matematika, kemijska teorija grafova

Uvod

Vjerojatno nitko od čitatelja ovog teksta neće znati što je „topološki indeks". Zaista, o topološkim indeksima znaju samo oni koji se bave odgovarajućim užim područjima znanosti. Međutim, neki drugi „indeksi" su svima dobro poznati. Podsjetimo se na neke od njih.

U svijetu u kojem živimo postoje razne situacije koje su veoma komplicirane i koje ovise o velikom broju, često nepredvidljivih, utjecaja. Kako bismo se u njima nekako snalazili, ovim situacijama se pridružuju brojevi koji ih djelomično odslikavaju, takozvani indeksi.

[*] Profesor emeritus, Sombor

Najviše takvih indeksa ima u svezi s burzanskim poslovanjem i trgovinom dionicama. Široj publici, najpoznatiji „burzanski indeks" je Dow Jonesov. Postoje tisuće burzanskih indeksa, među njima CROBEX na zagrebačkoj i BELEX na beogradskoj burzi.

Inteligencija se mjeri „koeficijentom inteligencije".

U zdravstvu se koristi „indeks tjelesne mase" (body mass index) kojim se uglavnom mjeri gojaznost jedne osobe.

„Indeks sreće" (world happiness index) se određuje za pojedine narode. Na primjer, za 2025. godinu najsretniji su Finci (WHI = 7,736), dok je sreća hrvatskog naroda (u Hrvatskoj) procijenjena na WHI = 5,870.

Postoje i analogni „indeks demokratičnosti" i „indeks koruptivnosti" čije detalje izostavljamo.

Uspješnost, utjecaj i učinkovitost publiciranih znanstvenih radova pojedinca mjeri „Hirschov indeks", dok za znanstvene časopise postoji „faktor utjecaja" (impact factor).

Sada će nas nešto manje zbunjivati to što se u kemiji, u svezi s često ekstremno kompleksnim molekulskim strukturama, primjenjuju „topološki indeksi". I njih ima na stotine, a prvi su se pojavili u sedamdesetim godinama prošlog stoljeća. Znanstvena disciplina koja (osim drugih tema) proučava topološke indekse danas se naziva „kemijska teorija grafova", ime koje je smislio hrvatski kemičar Nenad Trinajstić (1936. – 2021.). Somborski indeks je jedan od novijih topoloških indeksa.

Autor somborskog indeksa se dulji niz godina bavi istraživanjima u matematičkoj kemiji. Godine 1972. zajedno sa svojim mentorom Nenadom Trinajstićem otkrio je ono što se danas zove „prvi zagrebački indeks" (first Zagreb index), a godine 1974. „drugi zagrebački indeks" (second Zagreb index).[1]

Otkriće somborskog indeksa

Ivan Gutman je rođen u Somboru godine 1947. i u tom gradu je proveo svoju mladost. Kada se počeo baviti znanstvenim radom, morao je otići iz Sombora, ali se skoro svakog ljeta tamo vraćao na nekoliko tjedana. Iako nije bio građanin Sombora i iako se to kosilo s pravilima za nagrađivanje, godine 2019. dodijelili su mu Oktobarsku nagradu grada Sombora. On je to smatrao (a i sada smatra) najdražim priznanjem koje je ikada dobio i osjećao je potrebu da se svom gradu nekako oduži.

Od godine 2018. Ivan Gutman zbog bubrežne insuficijencije tri puta tjedno mora ići na dijalizu. Dijaliza traje četiri sata, tijekom kojeg vremena pacijenti moraju mirno ležati. Gutman je to vrijeme često koristio za razmišljanje o znanstvenim problemima.

[1] Zanimljivo je da se ovi indeksi ne zovu po gradu Zagrebu. U izvornim radovima, autori im nisu dali nikakvo ime. U jednom kasnijem članku drugih autora oni se spominju kao „indeksi zagrebačke grupe" (Zagreb gruop indices), što potječe od činjenice da su Trinajstić, Gutman i drugi u to vrijeme bili članovi grupe za teorijsku kemiju Instituta „Ruđer Bošković" u Zagrebu. Kasnije su drugi znanstvenici iz imena izostavili „group" i to se onda ustalilo.

U ljeto 2020. na nekoliko uzastopnih dijaliza u somborskoj bolnici, postupno se iskristalizirala ideja o jednom novom topološkom indeksu. Ne ulazeći u detalje, treba reći da se taj novi indeks izvodi iz određenih geometrijskih razmatranja. To do tada nikada nije bio slučaj, tako da je somborski indeks prvi topološki indeks zasnovan na geometriji. (Kasnije su nastali i drugi takvi topološki indeksi, očito inspirirani somborskim.)

Znanstveni rad o svom otkriću Ivan Gutman je napisao u Somboru u ranu jesen 2020. i poslao ga u časopis 29. listopada. Iz gore objašnjenih razloga odlučio je novi indeks nazvati po Somboru. Taj rad je objavljen 2021. godine i ima naslov „Geometrijski pristup na stupnjevima zasnovanim topološkim indeksima: Somborski indeksi“:

I. Gutman, Geometric approach to degree-based topological indices: Sombor indices, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* 86 (2021) 11-16.

Glede imena novog indeksa postojao je sljedeći rizik. Naime, nije bilo nikakvog jamstva da će drugi znanstvenici prihvatiti ime „somborski“. U ranijim vremenima bilo je mnogo slučajeva da ime koje je autor dao nekom pojmu nije opstalo i da je promijenjeno. Jedan ekstreman takav primjer je naziv kemijskog elementa natrija (simbol: Na), kojeg je pronalazač nazvao „Sodium“. Ono što je autor nazvao „branching index“, ubrzo je preimenovano u „connectivity index“, a danas ga znamo kao „Randić index“. Ono što je autor nazvao „Wiener polynomial“, danas se zove „Hosoya polynomial“.

Drugi rizik bio je da se ostali znanstvenici neće zainteresirati za somborski indeks i da će on pasti u zaborav i postati znanstveni fosil bez ikakvog značaja i utjecaja.

Kao što ćemo vidjeti, nijedno od ovoga se nije dogodilo. Ime „Sombor index“ je danas općeprihvaćeno (i ne postoji alternativno ime),[2] a somborskim indeksom se bave stotine kolega širom kugle zemaljske.

Postojao je i treći rizik: da građani Sombora ne budu impresionirani time što se neki (za njih potpuno nerazumljiv) znanstveni pojam zove po njihovom gradu. Za nadati se da će se tijekom vremena i ovo poboljšati.

Na koncu ovog odjeljka navodimo definiciju somborskog indeksa. To će biti jedina matematička formula u ovom članku.

$$SO = SO(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{d_u{}^2 + d_v{}^2}$$

[2] Kao kuriozitet spomenimo da su neki autori, kratko vrijeme, umjesto „Sombor“ pogrešno koristili „somber“ (= tmuran, mračan), ali je ta zabuna do danas potpuno eliminirana.

Ako nekog krajnji desni dio ove formule podsjeća na Pitagorin poučak, on/ona nije daleko od istine.

Istraživanja o somborskom indeksu (2021. – 2025.)

Već u prvom objavljenom radu o somborskom indeksu navedeno je nekoliko njegovih inačica: osim običnog, tamo se govori i o reduciranom i prosječnom somborskom indeksu. Tijekom vremena, u literaturi su predložene i mnoge druge inačice. Tako danas imamo, između ostalog, eliptični, eksponencijalni, hiperbolični, povećani, generalizirani, modificirani, beskonačni, srednji, multiplikativni, iregularni, reverzni, reformulirani, temperaturski, tangentni somborski indeks. Jedan se zove KG-somborski indeks, gdje K dolazi od Kulli, a G od Gutman.[3] U novije vrijeme mnogo se istražuje i Euler-Sombor indeks.

Od kada je 2021. godine objavljen prvi (Gutmanov) rad o somborskom indeksu, počeli su se pojavljivati radovi na istu temu i drugih znanstvenika. Točan broj tih radova bi bilo veoma teško utvrditi. Pisac ovog članka evidentirao je samo one radove koji su objavljeni, koji se mogu pronaći na Internetu, i koji u svom naslovu imaju riječ Sombor. Takvih je do sada (do travnja 2025. godine) sakupljeno 451, što znači da ih se godišnje pojavljuje nešto više od stotinu. Kompletnu bibliografiju ovih radova objavit ćemo na drugom mjestu; čekamo da ih se nakupi 500.

Po slobodnoj procjeni, znanstvenih radova koji se bave somborskim indeksom ima danas ukupno oko 1500 i taj broj stalno raste.

Izvjestan dojam o intenzitetu i raširenosti istraživanja o somborskom indeksu daje popis država iz kojih su autori tih istraživanja:

Argentina, Australija, Azerbajdžan, Bahrein, Bangladeš, Belgija, Bosna i Hercegovina, Brunej, Crna Gora, Čile, Egipat, Etiopija, Filipini, Francuska, Hrvatska, Indija, Indonezija, Irak, Iran, Irska, Italija, Jemen, Južna Afrika, Južna Koreja, Kanada, Kina, Kolumbija, Kurdistan, Kuvajt, Liban, Litva, Mađarska, Malezija, Meksiko, Mongolija, Nigerija, Nizozemska, Norveška, Oman, Pakistan, Rumunjska, Saudijska Arabija, Singapur, Sjedinjene Američke Države, Slovačka, Slovenija, Sudan, Španjolska, Šri Lanka, Tajland, Tajvan, Togo, Turska, Ujedinjeni Arapski Emirati, Velika Britanija, Vijetnam.

Daleko najveći broj radova objavljen je na engleskom jeziku, ali ima radova i na kineskom, turskom i perzijskom. Ovaj članak će biti prvi na hrvatskom jeziku. Na sljedećoj slici je naslovna strana jednog rada na kineskom jeziku; čak i oni koji ne umiju čitati kineski, prepoznat će riječ „Sombor“. Tko bude gledao pažljivije, vidjet će i riječ „Zagreb“.

[3] Veerabhadrappa Kulli je indijski znanstvenik koji je napisao najviše radova o somborskom indeksu, do sada 49.

第43卷 第2期 《新疆师范大学学报》(自然科学版) Vol.43,No.2
2024年6月 Journal of Xinjiang Normal University Jun. 2024
(Natural Sciences Edition)

几类积图的Sombor指标

阿丽米热·吐尔洪,买吐肉孜·买司地克*,刘兆志
(新疆师范大学 数学科学学院,新疆 乌鲁木齐 830017)

摘 要:Sombor指标是由Gutman在化学图论中引入的一种基于顶点度的新拓扑指标。文章讨论了路P_n与扇图F_m、轮图W_m,轮图W_n与扇图F_m、轮图W_m,扇图F_n与扇图F_m以及棒棒糖图$N_{n,k}$,杠铃图$D_{n,k,c}$和风筝图$L_{n,k}$与完全图K_n的笛卡尔积的Sombor指标,还研究了完全图、路、圈作直积、笛卡尔积、强积的Sombor指标,得出其确切的指标值以及关于积图的Sombor指标的关系式。

关键词:Sombor指标;笛卡尔积;直积;强积
中图分类号:O157.5 **文献标识码**:A **文章编号**:1008-9659(2024)02-0017-09

图的拓扑指标的研究是图论应用研究的一个热门领域,拓扑指标广泛应用于化学、物理等应用学科,它利用图的各项特性来描述及预测模型可能有的信息[1]。特别是分子拓扑指标,广泛应用于众多领域,在生物医学中,分子拓扑指标的值可以根据实际试验得出的相关结论预先确定,然后找到与指标值匹配的分子图,合成与分子图匹配的化合物。利用一些应用统计技术,通过相对应的系数、标准偏差等统计指标反映分子拓扑指标与分子物理化学性质之间的关联性,建立拓扑指标与物理化学性质之间的关系。通过研究拓扑指标可以反映化合物的内部结构,拓扑指标可用于确定化学晶体中的异构体。目前,科学家们越来越关注分子拓扑指标在制药过程中的应用。拓扑指标的种类越来越多,经常用的拓扑指标有第一、第二Zagreb指标[2-3]、Wiener指标[4]、Harary指标[5]等。目前,这些指标的研究是化学图论中比较热门的研究领域,文章将重点讨论一种基于顶点度的新的拓扑指标:Sombor指标[6]。

文章图G是具有顶点集$V(G)$和边集$E(G)$的简单图,记图$G=(V(G),E(G))$. 图G中,边数记为$e(G)$,点数(阶)记为$v(G)$,$\triangle_G$表示图G的最大度,δ_G表示图G的最小度。$d_G(v_i)$表示点v_i在图G中的度数,P_t表示阶为t的路,C_t表示阶为t的圈,K_t表示阶为t的完全图。

Sombor指标的灵感来自于边的度半径的几何解释,对于图G的Sombor指标$SO(G)$定义为

$$SO(G)=\sum_{v_iv_j\in E(G)}\sqrt{\left(d_G(v_i)\right)^2+\left(d_G(v_j)\right)^2}$$

Sombor指标自提出以来,学者们取得了很多新的成果。Singh等人主要研究了m-分裂图和正则图的m-影子图的Sombor指标[7];Cruz等人确定了至多有三个分支顶点的树的Sombor指标的极值[8];Tamás等人得出了Sombor指标的一些界,并通过利用已有的结果建立了附加界,刻画出了新的图,它具有最大的Sombor指标,并提出了一个关于高圈度图的最大Sombor指标的猜想[9];Milovanovic等人确定了有关Sombor指标的一些新的界以及它们与其他基于顶点度的指标关系,证明了Sombor指标的两个Nordhaus-Gaddum型不等式[10];Cruz等人用Sombor指标在连通的化学图、化学树和六边形系统上刻画图的极值[11]。这种新的拓扑指标引起了化学图论研究人员的兴趣。

[收稿日期]2023-08-08 [修回日期]2023-10-29
[基金项目]国家自然科学基金项目(11961070);新疆少数民族科技人才特殊培养计划科研项目(2022D03002)。
[作者简介]阿丽米热·吐尔洪(1998-),女,硕士研究生,主要从事组合图论方面研究,E-mail:3189957608@qq.com.
*[通讯作者]买吐肉孜·买司地克(1979-),男,副教授,主要从事组合图论方面研究,E-mail:metrose@163.com.

(C)1994-2024 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

Slika 1. Rad na kineskom jeziku u kojem se prepoznaje riječ „Sombor“.

Čemu služi somborski indeks

Najveći broj radova o somborskom indeksu razmatra njegova matematička svojstva i kemijske primjene. Pretpostavljajući da čitatelje ovog članka to ne bi interesiralo, o tome ovdje ne govorimo.

Pomoću topoloških indeksa moguće je približno predvidjeti svojstva različitih kemijskih spojeva. Od tih spojeva naročitu pozornost zaslužuju oni koji imaju farmakologijski značaj, to jest, od kojih se mogu spravljati lijekovi. Nije nikakvo iznenađenje da su i somborski indeks isprobavali na takvim, za medicinu važnim, kemikalijama. Navodimo, kao primjere, naslove nekih takvih radova, u slobodnom prijevodu na hrvatski jezik.

1. Dekodiranje nesteroidnih protu-upalnih lijekova sa somborskim invarijantama: Kvantni skok u QSPR modeliranju.
2. Somborski indeksi zasnovani na otvorenom susjedstvu za lijekove protiv gljivičnih infekcija.
3. Primjena strojnog učenja za analizu sličnosti između lijekova pomoću somborskih invarijanti.
4. QSPR analiza svojstava protu-virusnih lijekova za majmunske boginje pomoću somborskih topoloških deskriptora.

Ono što bi se moglo smatrati iznenađenjem su neke neočekivane primjene somborskog indeksa u područjima koja su daleka od kemije i potpuno nepovezana s njom.

Evo nekih primjera (opet naslovi članaka u slobodnom prijevodu):

1. Neke operacije nad intuističkim fazi grafovima pomoću novih verzija somborskog indeksa za povezivanje preko Interneta (internet routing).
2. Indeksi somborskog tipa za neka mrežna povezivanja.
3. Izbor mjesta za gradnju termoelektrana zasnovan na somborskom indeksu neutrosofnih grafova.
4. Intuistički fazi somborski indeksi: Nov pristup poboljšanju učinkovitosti vakcinacijskih centara.

Ne treba posebno isticati da je autoru somborskog indeksa i ovoga rada bilo iznimno drago vidjeti do kakvih neobičnih i neočekivanih primjena je dovelo njegovo otkriće. Sve ovo se dogodilo za samo pet godina. O tome što će biti kasnije, možemo samo maštati.

Zaključak

Iz podataka navedenih u ovom članku, može se s potpunom sigurnošću tvrditi da je glavna namjera Ivana Gutmana ostvarena i da je ime grada Sombora postalo znanstveni pojam.

Summary

The Ballad of the Sombor Indeks

In 2020, the application of a new topological index in chemical research was suggested. Its author named it the „Sombor index". In chemical graph theory, several dozen such topological indices have been in use, some for more than half a century. After its appearance, the Sombor index rapidly attracted the attention of many scholars around the world, and its name was universally accepted. Numerous applications of the Sombor index have been found in chemistry and pharmacology, as well as in some other areas of science and engineering. Numerous mathematical studies of the Sombor index have also been published. As a result, the name of the city of Sombor has become a scientific concept, which was the author's wish and intention. In this article, we outline the basic facts about the discovery of the Sombor index, avoiding all mathematical and chemical details. We also present the global research on this index, as well as a few illustrative examples.

Keywords: Sombor index, topological index, chemistry, mathematics, chemical graph theory