



UNIVERSIDAD DE  
GUANAJUATO

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO  
DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y  
EXACTAS

# Índices Topológicos y Espectrales para Gráficas

**TESIS**

Para obtener el grado de Licenciada en Matemáticas.

**Presenta:**

Victoria de Jesús Terrones Segura.

**Director de Tesis:**

Dr. Octavio Arizmendi Echegaray.



# Agradecimientos

Quiero agradecer primeramente a mis padres que desde pequeña me han apoyado y creído en mí, así como todo el esfuerzo que han hecho para permitirme estudiar y estar donde estoy ahora, además de ser mi guía para el día a día. También quiero agradecer a mi hermana que me ayudó a acercarme al área de las matemáticas desde pequeña; a mi hermano, que de distintas maneras me ha motivado a seguir y no rendirme; a mi asesor de tesis por su guía y consejo, así como su ayuda para mi desarrollo académico y toda la paciencia que tuvo durante el desarrollo de esta tesis; a mi tutor de carrera que me guió y recordó durante mis estudios no dejar de lado partes importantes para tener un buen desarrollo tanto académico como personal; a mis amigos y compañeros que me motivaron durante los años de carrera, especialmente en los últimos de la misma.



# Índice

<b>Agradecimientos</b>	<b>3</b>
<b>Introducción</b>	<b>7</b>
<b>1 Preliminares en gráficas</b>	<b>9</b>
1.1 Inicios en gráficas . . . . .	9
1.2 Definiciones básicas . . . . .	10
1.3 Ejemplos . . . . .	13
<b>2 Teoría espectral</b>	<b>19</b>
2.1 Teoría espectral de matrices . . . . .	19
2.2 Teoría espectral de gráficas . . . . .	22
2.3 Ejemplos . . . . .	33
<b>3 Energía de gráficas</b>	<b>39</b>
3.1 Motivación Química . . . . .	39
3.2 Ejemplos . . . . .	40
3.3 Desigualdades . . . . .	46
3.4 Fórmula Integral de Coulson . . . . .	49
3.5 Árboles . . . . .	52
<b>4 Índice de Randić</b>	<b>55</b>
4.1 Índice de Randić . . . . .	55
4.2 Índice de Randić y relación química . . . . .	56
4.3 Ejemplos . . . . .	60
4.4 Desigualdades . . . . .	64
4.5 Índice de Randić en árboles . . . . .	69
4.5.1 Árboles con mínimo índice de Randić . . . . .	69
4.5.2 Árboles con máximo índice de Randić . . . . .	76
<b>5 Índice de Wiener</b>	<b>91</b>
5.1 Índice de Wiener . . . . .	91
5.2 El índice de Wiener y relaciones químicas . . . . .	91
5.3 Ejemplos . . . . .	98
5.4 El Índice de Wiener en Árboles . . . . .	99

<b>6</b>	<b>Índice de Estrada</b>	<b>105</b>
6.1	Relación Química . . . . .	106
6.2	Ejemplos . . . . .	107
6.3	Desigualdades . . . . .	108
<b>7</b>	<b>Otros Índices y medidas de centralidad</b>	<b>113</b>
7.1	Otros índices topológicos . . . . .	113
7.1.1	Índice de Hosoya . . . . .	113
7.1.2	Índice de hiper-Wiener . . . . .	115
7.1.3	Índice de Zagreb . . . . .	117
7.1.4	Índice de Padmakar-Ivan e Índice de Szeged . . . . .	118
7.2	Medidas de centralidad . . . . .	120
7.2.1	Centralidad de grado . . . . .	120
7.2.2	Centralidad de eigenvector . . . . .	121
7.2.3	Centralidad de Katz . . . . .	122
7.2.4	PageRank . . . . .	122
7.2.5	Centralidad de cercanía . . . . .	123
7.2.6	Centralidad de intermediación . . . . .	124
7.2.7	Centralidad de subgráfica . . . . .	126
7.2.8	Energía de vértices . . . . .	128

# Introducción

La química matemática es el área de investigación dedicada a estudiar las aplicaciones de matemáticas en la química y se ocupa principalmente del modelado de fenómenos químicos. Entre sus diferentes áreas y metodologías de investigación, en esta tesis nos interesa como se usa la teoría de gráficas en química matemática. Particularmente como tratar la combinatoria de la gráfica así como con el estudio matemático de los isómeros y el desarrollo de descriptores topológicos.

Dentro de la química matemática existen indicadores estructurales llamados índices. Dichos indicadores son valores obtenidos a partir de la gráfica de un compuesto molecular (la gráfica obtenida al considerar los átomos de una molécula como vértices y los enlaces como aristas ignorando los átomos de hidrógeno). Los distintos índices topológicos de una molécula se relacionan fuertemente con distintas de sus propiedades químicas, por ejemplo, con el punto de ebullición. El estudio de estos índices puede desarrollarse desde un ámbito meramente matemático, esto es, desde la teoría de gráficas.

Existen índices basados en propiedades topológicas o combinatorias como los índices de Randić [7, 9, 43, 28, 29, 35, 17, 8] y Wiener [44], y otros basados en propiedades espectrales (relacionados con los valores propios de la matriz de una gráfica) como la energía de gráficas [33, 39, 21, 1] y el índice de Estrada [25, 18, 36, 14, 45]. En esta tesis se hace un estudio sistemático de los índices más usados, específicamente de la energía de gráficas, el índice de Randić, el índice de Wiener y el índice de Estrada. Para cada uno de éstos se dan ejemplos y se muestran los resultados más importantes. Se recolectó un compendio de resultados y demostraciones ya conocidas.

En 1975, Milan Randić [43] propuso dos índices,  $R_1 = \sum_{i \sim j} (d_i d_j^{-\frac{1}{2}})$  y  $R_2 = \sum_{i \sim j} (d_i d_j)^{-1}$  para medir el grado de ramificación del esqueleto de átomos de los hidrocarburos saturados llamandolos índices de ramificación. Fue en 1998 que Bollobás y Erdős generalizan este índice al sustituir el exponente  $-\frac{1}{2}$  por cualquier número real. El índice de Wiener fue definido en 1947 por Harry Wiener [44] con el nombre de “path number” como la suma de las distancias entre los pares de vértices. Wiener mostró que dicho índice está estrechamente relacionado con los puntos de ebullición de los alcanos así como de otras propiedades físicas de los compuestos químicos que dependen del número, tipo y arreglo estructural de los átomos en las moléculas. El índice de Estrada fue introducido para caracterizar el grado de doblamiento de una proteína por Ernesto Estrada en 2000 [18], aunque no fue hasta el 2007 que fue llamado de esta forma por de la Peña [14].

Hoy en día, existen muchos índices literatura además de los descritos ante-

riormente. En esta tesis trataremos brevemente, en particular, los siguientes: índice de Hosoya [26], el índice de Hiper-Wiener [32, 22], el índice de Zagreb [20, 23, 13, 11, 12], el índice de Padmakar-Ivan [42] y el índice de Szeged [24, 16]. Varios de estos índices se relacionan con algunas medidas de centralidad, al final de esta tesis se presenta un breve resumen de dichas medidas; específicamente de la centralidad de eigenvector, la centralidad de Katz, PageRank, la centralidad de cercanía, la centralidad de intermediación, la centralidad de subgráfica y la energía de vértices.

La tesis está dividida en ocho capítulos. En las primeras dos capítulos se muestran un compendio de las definiciones básicas y teoremas que se usarán. Este compendio está dividido en dos partes. En el primer capítulo presentamos los temas referentes a Teoría de gráficas. Por otra parte, en el segundo capítulo, presentamos, la Teoría Espectral (de Matrices y de Gráficas).

En los siguientes capítulos, 3, 4, 5 y 6, se describen con detalles los principales índices topológicos y medida espectrales que se consideran en esta tesis.

En el capítulo 3, primero, se describe la energía de gráficas y se muestra brevemente la relación que guarda dentro de la química con el modelo de Huckel(HMO). Luego, se dan algunos ejemplos, se describe la fórmula de Coulson que se usa para demostrar algunas desigualdades y se presentan algunas desigualdades generales y otras aplicadas solamente a árboles.

En el capítulo 4 se describe el índice de Randić. Se menciona como surgió este índice y su uso para medir el grado de ramificación de una molécula. Se dan varios ejemplos así como algunas desigualdades. Como último, se muestra dentro de los árboles cuáles gráficas maximizan o minimizan el índice de Randić,  $R_\alpha$ , según el parámetro  $\alpha$  dado.

En el capítulo 5 se desarrolla el índice de Wiener. Se explica un poco su relación con el punto de ebullición de los alcanos. Después, se dan algunos ejemplos y se muestra un método para calcular este índice en árboles.

El capítulo 6 trata sobre el índice de Estrada. Se menciona como fue introducido para describir el doblamiento de las proteínas, se dan ejemplos y se muestran algunas cotas para este índice. Dentro de las cotas mostradas se hacen dos correcciones, una pequeña corrección en la demostración de de la Peña que sin más inconveniente mantiene el mismo resultado y otra en la demostración de Jian-Ping Liu y Bo-lian Liu en la que no fue posible arreglar la prueba para mantener el mismo resultado, quedando este como conjetura. Sin embargo, al tratar de evadir el paso incorrecto en la demostración se obtuvo una nueva cota.

Finalmente, en el capítulo 7 se exponen de forma breve otros índices topológicos como el índice de Hosoya, el índice de Hiper-Wiener, el índice de Zagreb, el índice de Padmakar-Ivan y el índice de Szeged. En este mismo capítulo se presentan además otro tipo de medidas que sirven también para describir una gráfica, llamadas medidas de centralidad. Se da su definición y se muestra la relación que tienen con algunos de los índices mencionados en los capítulos anteriores.



# Capítulo 1

## Preliminares en gráficas

En este capítulo se introduce la teoría de gráficas, un tema clásico y bien conocido. Para el lector interesado en el tema se sugiere consultar el libro de Diestel [15], de donde se tomaron la mayoría de las definiciones.

En la primera sección se da una breve introducción al surgimiento de la teoría de gráficas. Por ser un tema bien conocido no se dan demostraciones. Finalmente en la tercer sección se muestran varios ejemplos de gráficas.

### 1.1 Inicios en gráficas

La teoría de gráficas tiene sus inicios con el problema de los puentes de Königsberg, que fue formulado en el siglo XVIII. La ciudad de Königsberg estaba separada por el río de Pregel que al bifurcarse separaba el terreno en cuatro regiones distintas que a su vez estaban unidas por siete puentes. Se decía que la gente de la ciudad se entretenía tratando de formar una ruta alrededor de la ciudad que cruzara cada uno de los siete puentes solamente una vez. Fue en 1736 que Euler demostró que no es posible hacer dicho recorrido. Euler trató este problema por medio de dos pasos generales. Primero reemplazó el mapa de la ciudad por un diagrama que mostraba las principales características. Denotó a las cuatro áreas de tierra por puntos  $A, B, C, D$  y los siete puentes que unían a las porciones de tierra correspondientes por líneas  $a, b, c, d, e, f, g$ . A estos puntos se les llama vértices o nodos y a las líneas que los unen aristas.

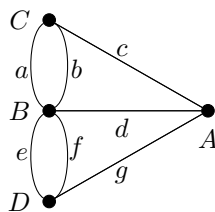


Figura 1.1: Diagrama del problema de los siete puentes de Königsberg.

Euler determinó que los puntos intermedios de un recorrido posible debían estar conectados por un número par de líneas. Esta abstracción del problema fue la que dió origen a la noción de gráfica.

Más adelante, en 1847, la teoría de gráficas sería usada para otros fines, como el análisis de redes eléctricas por Kirchoff, quien publicaría sus leyes para calcular el voltaje y la corriente en los circuitos eléctricos. En 1857, Caley resolvió el problema de enumeración de isómeros representando cada compuesto como un árbol (una gráfica conexa sin ciclos) usando los vértices como átomos y las aristas como enlaces químicos. En el libro de Norman L. Biggs, E. Keith Lloyd y Robin J. Wilson [6] se puede ver más a detalle la historia de la teoría de gráficas.

## 1.2 Definiciones básicas

Sin más preámbulos comenzaremos con una serie de definiciones básicas sobre teoría de gráficas. Estas se brindan en cualquier curso elemental de matemáticas discretas por lo que el lector conocedor puede omitir esta sección. Los conceptos y exposiciones fueron tomadas del Diestel [15].

**Definición 1.2.1 (Gráfica)** Una gráfica  $G$  consta de un par ordenado  $(V(G), E(G))$  donde los elementos de  $E(G)$  son pares  $(v, w)$  (por simplicidad escribimos  $vw$ ), con  $v, w \in V(G)$ . Los elementos de  $V(G)$  reciben el nombre de vértices y a los elementos de  $E(G)$  se les llama aristas. El tamaño de una gráfica se denota por  $|G|$  y está dado por el tamaño del conjunto  $V(G)$ . Consideraremos solamente gráficas simples y no dirigidas, esto es, las aristas de la forma  $vv$  no son válidas y no hay diferencia entre la arista  $uv$  y la arista  $vu$ .

**Definición 1.2.2 (Vértices vecinos y aristas incidentes)** Dado dos vértices  $u, v$  de una gráfica, decimos que son vecinos o que están conectados si existe una arista que los contiene y lo denotamos por  $u \sim v$ . De forma similar decimos que dos aristas son incidentes si ambas aristas contienen a un mismo vértice. También decimos que dos aristas son independientes si no son incidentes.

**Definición 1.2.3 (Grado)** El grado de un vértice  $v$  es la cantidad de vecinos que tiene y se denota por  $d(v)$ .

**Definición 1.2.4 (Grado promedio)** El grado promedio de una gráfica  $G$  es el promedio de los grados de sus vértices y se denota por  $d(G)$ .

**Teorema 1.2.1** En una gráfica  $G$ , la suma de los grados de los vértices es igual a dos veces la cantidad de aristas.

$$2|E(G)| = \sum_{i=1}^n d(v_i).$$

Equivalentemente,  $d(G) = 2|E(G)|/n$ .

**Definición 1.2.5 (Emparejamientos)** Dado una gráfica  $G$ , un  $k$ -emparejamiento es un conjunto de  $k$  aristas de  $G$  que son independientes. A la cantidad de  $k$ -emparejamientos de  $G$  se le denota como  $m(G, k)$ . En general cualquier  $k$ -emparejamiento es llamado un emparejamiento.

**Definición 1.2.6 (Camino)** Dado dos vértices  $v, w \in V(G)$ , un camino de tamaño  $n$  de  $v$  a  $w$  es una sucesión de vértices  $v = v_0, v_1, \dots, v_n = w$  tales que  $v_i \sim v_{i+1}$ . Si existe un camino entre dos vértices entonces decimos que dichos vértices están conectados.

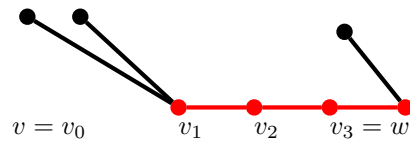


Figura 1.2: Camino de tamaño 3.

**Definición 1.2.7 (Ciclo)** *Un ciclo de tamaño  $n$  es un camino de tamaño  $n$  con  $v_0 = v_n$ .*

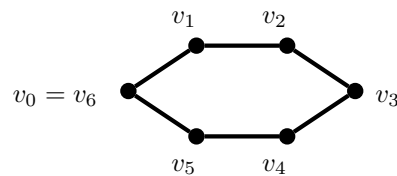
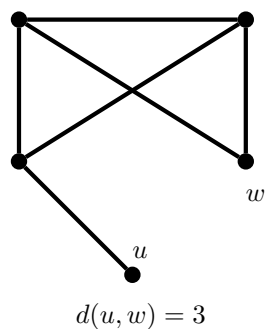


Figura 1.3: Ciclo de tamaño 6.

**Definición 1.2.8 (Distancia entre dos vértices)** *En una gráfica, la distancia entre dos vértices  $v, w$  conectados es el mínimo de los tamaños entre los caminos que van de  $v$  a  $w$ . Generalmente se denota por  $d(v, w)$ .*

Figura 1.4: Distancia entre  $u$  y  $w$ .

**Definición 1.2.9 (Triángulos)** *En una gráfica  $G$ , un triángulo es un conjunto de tres vértices  $\{v_1, v_2, v_3\}$  que forman un camino cerrado. Notemos que todos*

los distintos ciclos que involucran a  $v_1, v_2, v_3$  definen al mismo triángulo. De esta forma por cada triángulo de  $G$  existen seis ciclos de tamaño tres.

**Definición 1.2.10 (Cuadrángulos)** En una gráfica  $G$  un cuadrángulo es un conjunto ordenado de cuatro vértices  $\{v_1, v_2, v_3, v_4\}$  tal que  $(v_1, v_2, v_3, v_4, v_1)$  es un camino cerrado; y que además cumple una relación cíclica ( $\{v_1, v_2, v_3, v_4\} = \{v_4, v_1, v_2, v_3\} = \{v_3, v_4, v_1, v_2\} = \{v_2, v_3, v_4, v_1\}$ ) y simétrica ( $\{v_1, v_2, v_3, v_4\} = \{v_4, v_3, v_2, v_1\}$ ).

**Definición 1.2.11 ((n-m)-gráficas)** Se le nombra  $(n-m)$ -gráfica a una gráfica con  $n$  vértices y  $m$  aristas.

**Definición 1.2.12 (Isomorfismo de gráficas)** Dos gráficas  $G$  y  $G'$  son isomorfas si existe una biyección entre sus vértices,  $\phi : V(G) \rightarrow V(G')$ , tal que  $\phi(u)\phi(v) \in E(G') \iff uv \in E(G)$ .

**Definición 1.2.13 (Subgráfica)** Una gráfica  $H$  es subgráfica de  $G$  si  $V(H) \subset V(G)$  y  $E(H) \subset E(G)$ .

**Definición 1.2.14 (Gráfica inducida)** Dada una gráfica  $G$  y un subconjunto de sus vértices  $W \subset V(G)$ , se define la gráfica inducida por  $W$  en  $G$  como la gráfica  $G[W]$  que tiene como conjunto de vértices a  $W$  y que para cada par de vértices  $u, v \in W$   $uv \in E(G[W]) \iff uv \in E$ .

**Definición 1.2.15 (Resta de vértices, aristas y subgráficas)** Dada una gráfica  $G$ ,  $e \in E(G)$ ,  $u, v \in V(G)$ , y  $H$  una subgráfica de  $G$ , podemos definir las siguientes restas para dar lugar a nuevas gráficas.

- $G - e$ : la gráfica con vértices  $V(G)$  y aristas  $E(G) \setminus \{e\}$ .
- $G - v$ : la gráfica con vértices  $V(G) \setminus \{v\}$  y aristas  $E(G) \setminus \{a \in E(G) | v \in a\}$ .
- $G - H$ : la gráfica con vértices  $V(G) \setminus V(H)$  y aristas  $E(G) \setminus \{a \in E(G) | w \in a \text{ para algún } w \in V(H)\}$ .

**Definición 1.2.16 (Complemento de una gráfica)** El complemento de una gráfica  $G$  es una gráfica  $\bar{G}$  con el mismo conjunto de vértices  $V(G)$  y conjunto de arista  $E(\bar{G}) = \{uv | u, v \in V(G), uv \notin E(G)\}$ .

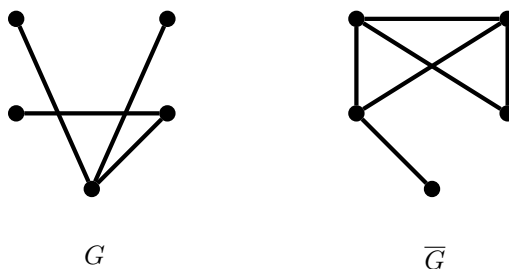


Figura 1.5: Complemento de una gráfica

**Definición 1.2.17 (Conexidad)** Decimos que una gráfica es conexa si entre cualquier par de vértices  $u, v$  existe un camino de  $u$  a  $v$ .

**Definición 1.2.18 (Componente conexa)** En una gráfica  $G$ , llamamos componente conexa a cada una de las subgráficas conexas maximales de  $G$ .

**Definición 1.2.19 (Excentricidad)** La excentricidad de un vértice  $v \in V(G)$  se define como la mayor de las distancias entre  $v$  y cualquier otro vértice de  $G$ .

$$\xi(v) = \max \{d(v, w) : w \in V(G)\}.$$

**Definición 1.2.20 (Diámetro)** El diámetro de una gráfica  $G$  es el valor máximo de las excentricidades de sus vértices, es decir, la distancia mayor entre los pares de vértices de  $G$

$$\text{diam}(G) = \max \{\xi(v) : v \in V(G)\}.$$

**Definición 1.2.21 (Radio)** El radio de una gráfica se define como la menor de las excentricidades de sus vértices,

$$r(G) = \min \{\xi(v) : v \in V(G)\}.$$

**Definición 1.2.22 (Centro)** Un vértice  $v \in V(G)$  se dice ser centro de  $G$  si su excentricidad es igual al radio de  $G$ , esto es,

$$\xi(v) = r(G).$$

### 1.3 Ejemplos

Ahora es momento de introducir algunas ejemplos y tipos de gráficas con las que trabajaremos posteriormente. Comenzaremos con gráficas que se conocen como árboles y uniones de estos.

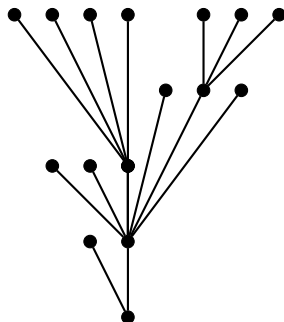


Figura 1.6: Ejemplo de un árbol

**Definición 1.3.1 (Árboles y bosques)** Una gráfica  $T$  es un árbol si es conexa sin ciclos. Un bosque es una gráfica donde cada componente conexa es un árbol.

**Teorema 1.3.1** Para una gráfica  $T$  son equivalentes los siguientes incisos:

- a)  $T$  es un árbol.

- b) Cualesquiera dos vértices de  $T$  están unidos por un único camino.
- c)  $T$  es conexa minimal, es decir,  $T - e$  es desconexa para cualquier arista  $e$ .
- d)  $T$  es maximal acíclica, es decir,  $T$  no contiene ciclos y  $T + uv$  contiene un ciclo para cualquier par de vértices  $u, v$  no adyacentes.
- e)  $T$  es conexa y  $|E(T)| = n - 1$  con  $n = |T|$ .

**Definición 1.3.2 (Hoja)** Llamamos hojas o vértices extremos a los vértices de un árbol que tienen grado uno. Notemos que todo árbol tiene por lo menos dos hojas.

**Definición 1.3.3 (Gráfica bipartita)** Una gráfica  $G$  es bipartita si sus vértices pueden separarse en dos conjuntos disjuntos  $V_1, V_2$ , tales que si  $v, w \in V_i$  entonces  $vw \notin E(G)$ . En otras palabras, si  $vw \in E(G)$  entonces  $v \in V_1$  y  $w \in V_2$  ó  $w \in V_1$  y  $v \in V_2$ .

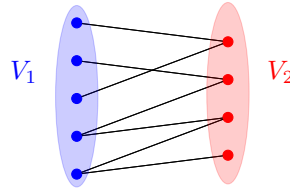


Figura 1.7: Ejemplo de una gráfica bipartita

**Teorema 1.3.2** Todo árbol es una gráfica bipartita.

**Definición 1.3.4 (Producto cartesiano de gráficas)** Sean  $G_1 = (V_1, E_1)$  y  $G_2 = (V_2, E_2)$  dos gráficas. El producto cartesiano de  $G_1$  y  $G_2$ , es denotado por  $G_1 \times G_2$  y lo conforma la gráfica con conjunto vértices  $V_1 \times V_2$  tal que  $(x_1, x_2), (y_1, y_2) \in V(G_1 \times G_2)$  son vecinos si

$$(x_1, y_1) \in E(V_1) \quad y \quad x_2 = y_2,$$

o bien si

$$(x_2, y_2) \in E(V_2) \quad y \quad x_1 = y_1.$$

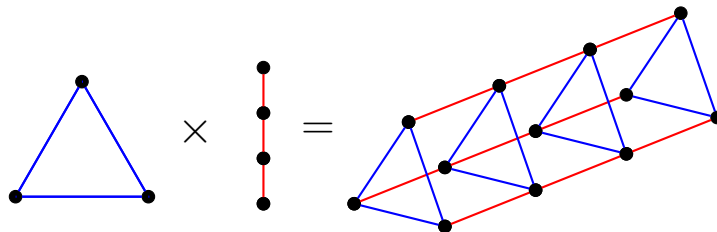


Figura 1.8: Producto de  $C_3$  y  $P_4$

Este es el único producto que consideraremos en la tesis por lo que no habrá confusión en usar notación como  $\underbrace{G \times G \cdots \times G}_n$  o  $G^n$ .

**Definición 1.3.5 (Producto tensorial de matrices)** Sean  $A \in \mathcal{M}_{n,m}$ ,  $B \in \mathcal{M}_{r,s}$ . El producto tensorial de  $A = \{a_{i,j}\}_{i,j}$  con  $B$  se define como la matriz  $A \otimes B \in \mathcal{M}_{nr,ms}$  formada por

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{1,1}B & a_{1,2}B & \dots & a_{1,m}B \\ a_{2,1}B & a_{2,2}B & \dots & a_{2,m}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}B & a_{n,2}B & \dots & a_{n,m}B \end{pmatrix}$$

Algunas propiedades del producto tensorial se enlistan a continuación.

Si  $A, B, C$  son matrices con las dimensiones necesarias para que puedan realizarse las operaciones siguientes y  $k \in \mathbb{C}$ , entonces se cumple:

- i)  $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$  y  $(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C$ .
- ii)  $(kA) \otimes B = A \otimes (kB) = k(A \otimes B)$ .
- iii)  $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$ .
- iv)  $(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$ .

La importancia para nosotros del producto tensorial radica en que la matriz de adyacencia del producto cartesiano de dos gráficas  $G_1$  y  $G_2$  puede obtenerse usando las respectivas matrices de adyacencia  $A_1$ ,  $A_2$  y el producto tensorial de la siguiente forma:

$$A_{G_1 \times G_2} = (A_1 \otimes I_{n_2}) + (I_{n_1} \otimes A_2),$$

donde  $I_n$  es la matriz identidad de tamaño  $n$  y  $n_i$  el tamaño de  $G_i$ .

Se muestran a continuación algunas familias de gráficas bien conocidas y usadas.

- **Ejemplo 1.3.1 (Gráfica estrella)** La estrella,  $S_n$ , consta de un árbol formado de un vértice central con  $n - 1$  vecinos.

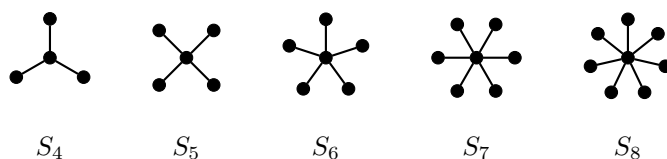


Figura 1.9: Gráfica estrella.  $S_4$ ,  $S_5$ ,  $S_6$ ,  $S_7$ ,  $S_8$ .

- **Ejemplo 1.3.2 (Camino)** El camino,  $P_n$ , está formado por  $n$  vértices consecutivos unidos, con cada vértice de grado dos a excepción de los vértices extremos que tienen grado uno.

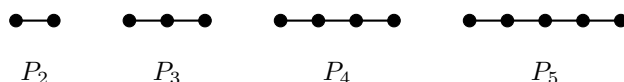


Figura 1.10: Gráfica camino.  $P_2$ ,  $P_3$ ,  $P_4$ ,  $P_5$ .

- **Ejemplo 1.3.3 (Gráfica completa)** La gráfica completa,  $K_n$ , se conforma por  $n$  vértices donde todos los pares de vértices son aristas de  $K_n$ .

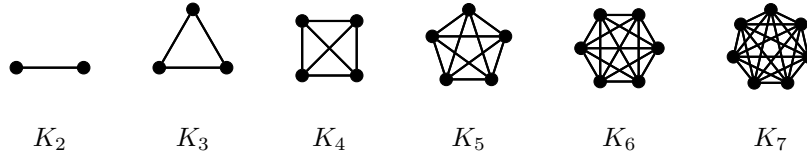


Figura 1.11: Gráfica completa.  $K_2, K_3, K_4, K_5, K_6, K_7$ .

- **Ejemplo 1.3.4 (Gráfica bipartita completa)** La gráfica bipartita completa,  $K_{n,m}$ , tiene como vértices la union de dos conjuntos  $V(K_{n,m}) = V_1 \cup V_2$  con  $|V_1| = n, |V_2| = m$  y para cualquier par de vértices  $v_1, v_2$ , se tiene que  $v_1 v_2 \in E(K_{n,m}) \iff v_1 \in V_1$  y  $v_2 \in V_2$ .

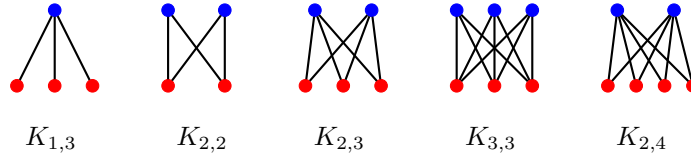


Figura 1.12: Gráficas bipartitas completas.  $K_{1,3}, K_{2,2}, K_{2,3}, K_{3,3}, K_{2,4}$ .

- **Ejemplo 1.3.5 (Gráfica regular)** Una gráfica regular es tal que todos sus vértices tienen el mismo grado. Si  $d$  es el grado común de sus vértices, entonces es llamada  $d$ -regular.

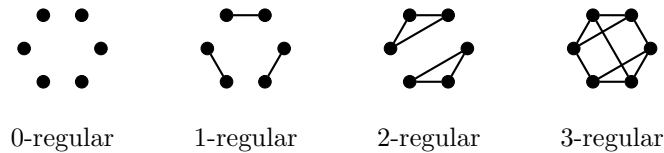
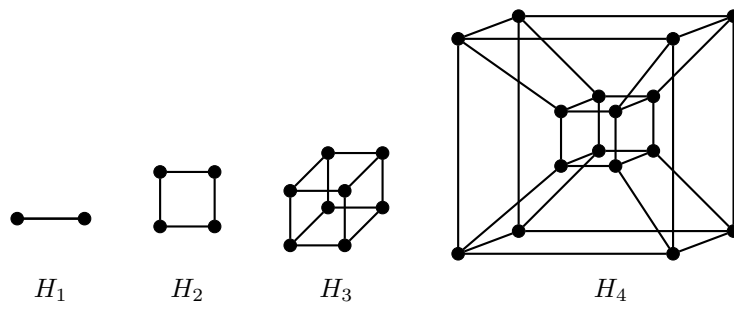


Figura 1.13: Gráficas 0,1,2,3-regular de seis vértices.

- **Ejemplo 1.3.6 (Gráfica fuertemente regular)** Una gráfica  $G$  es fuertemente regular de parámetros  $(n, k, e, f)$  si  $G$  es  $k$ -regular de tamaño  $n$  y además cualquier par de vértices vecinos tienen exactamente  $e$  vecinos en común y cualquier par de vértices no adyacentes tienen exactamente  $f$  vecinos en común.
- **Ejemplo 1.3.7 (Hiper cubo)** El hiper cubo,  $H_n$ , se conforma por  $2^n$  vértices que pueden ser representados por los subconjuntos de un conjunto de  $n$  elementos. Dos vértices  $u, v \in V(H_n)$  comparten una arista si y sólo si  $u$  puede obtenerse de  $v$  agregando o eliminando un solo elemento. También puede obtenerse de hacer  $n$  veces el producto cartesiano de  $P_2$  con él mismo, es decir,  $H_n = P_2^n$ .



Figura 1.14: Hipercubo.  $H_1$ ,  $H_2$ ,  $H_3$  y  $H_4$ .



## Capítulo 2

# Teoría espectral

En este capítulo abordaremos la teoría espectral de ciertas matrices como matrices positivas y autoadjuntas, y después se verá específicamente la teoría espectral de gráficas, donde se mencionan relaciones entre las gráficas y sus valores propios así como el espectro de varias familias de gráficas. Esto será de utilidad en los próximos capítulos donde se exploran los temas de energía de gráficas, energía de vértices y el índice de Randić. Aunque existen libros como “An introduction to the theory of graph spectra” de Dragos M. Cvetkovic y Rowlinson [10], donde se pueden ver las demostraciones, preferimos dar demostraciones a la mayoría de los resultados, en particular porque muestran diversas técnicas que se usan en este tema que combinan argumentos combinatorios con otros de álgebra lineal. Esperamos que este capítulo sea útil para lectores interesados en el tema de Teoría Espectral de gráficas.

### 2.1 Teoría espectral de matrices

Ya que el espectro de un gráfica es precisamente el espectro de su matriz de adyacencia, es necesario conocer la teoría espectral de matrices en general. En esta sección se mostrarán algunas herramientas de la que nos apoyaremos para encontrar el espectro de ciertas matrices y relaciones con sus valores propios. Comenzaremos por algunas definiciones.

**Definición 2.1.1 (Matriz autoadjunta)** *Una matriz  $M$  es autoadjunta si es igual a su transpuesta conjugada, donde denotamos a la transpuesta conjugada de  $M$  por  $M^* = \overline{M^t}$ .*

**Definición 2.1.2 (Polinomio característico)** *Dada una matriz  $A \in \mathcal{M}_n$ , se define su polinomio característico como*

$$P_A(x) = \det(xI_n - A).$$

**Definición 2.1.3 (Espectro de una matriz)** *Dada una matriz  $M \in \mathcal{M}_n$ , su espectro está dado por las soluciones a  $P_M(x) = 0$ . Estos valores reciben el nombre de valores propios de  $M$ . Si  $M$  es autoadjunta los valores propios de  $M$  son reales.*

Vamos a trabajar con matrices autoadjuntas.

**Teorema 2.1.1 (Teorema de entrelazamiento de Cauchy)** Sea  $A$  una matriz autoadjunta de tamaño  $n$  y  $B$  una submatriz principal de  $A$  de tamaño  $n-1$ . Si  $\lambda_n \leq \lambda_{n-1} \cdots \leq \lambda_1$  son los valores propios de  $A$  y  $\mu_{n-1} \leq \mu_{n-2} \cdots \leq \mu_1$  son los valores propios de  $B$ , entonces

$$\lambda_n \leq \mu_{n-1} \leq \lambda_{n-1} \leq \cdots \mu_1 \leq \lambda_1.$$

**Definición 2.1.4 (Matriz definida positiva)** Una matriz  $A \in \mathcal{M}_n$  es positiva si cumple:

- i)  $A = BB^*$  para alguna matriz  $B \in \mathcal{M}_n$ ,
- ii) o bien, todos los valores propios de  $A$  son no negativos.

**Definición 2.1.5 (Valor absoluto de una matriz)** El valor absoluto de una matriz  $A$  se define como

$$(AA^*)^{1/2},$$

donde para una matriz positiva  $C$ ,  $C^{1/2}$  denota a la única matriz positiva  $B$  tal que  $B^2 = C$ .

**Teorema 2.1.2 (Diagonalización)** Si  $A \in \mathcal{M}_n$  es una matriz autoadjunta, entonces existen matrices  $D, U \in \mathcal{M}_n$  tal que  $A = UDU^t$  donde  $D$  es una matriz diagonal con los valores propios de  $A$  sobre su diagonal,  $U$  tiene como columnas a una base ortonormal formada por vectores reales propios de  $A$  y  $U^t = U^{-1}$

Este teorema nos permite hacer la siguiente definición que nos ayuda a tratar a una matriz autoadjunta de forma similar a una matriz diagonal.

**Definición 2.1.6** Sea  $f$  una función real, para una matriz autoadjunta definimos  $f(A)$  como

$$U \begin{pmatrix} f(D_{11}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & f(D_{nn}) \end{pmatrix} U^{-1},$$

con  $U$  y  $D$  como en el teorema anterior.

**Lema 2.1.1** Si  $f$  es una función real positiva y  $A$  una matriz positiva, entonces  $f(A)$  es positiva.

**Demostración:** Como  $A$  es positiva, entonces es autoadjunta. Luego, de la diagonalización de  $A$  y la definición de  $f(A)$  se sigue que  $f(A)$  es diagonalizable y tiene valores propios  $f(\lambda_i) > 0$ .

**Teorema 2.1.3** Si  $f$  es una función real y  $A$  autoadjunta, entonces se cumple que

- i) si  $f$  es un polinomio  $f(A)$  coincide con evaluar  $f$  en  $A$  como variable.
- ii) si  $f(x) = x^{1/k}$  es la función que consiste en tomar la raíz  $k$ -ésima, y  $A$  es positiva, entonces  $f(A)$  es la raíz  $k$ -ésima de  $A$  es decir, la única matriz positiva  $B$  tal que  $B^k = A$ .

iii) si  $f$  es la función valor absoluto, entonces  $f(A)$  es la función valor absoluto  $|A| = (AA^*)^{1/2}$ .

**Demostración:** i) Sea  $f(x) = \sum_{i=0}^k a_i x^i$  y  $U$  como en el Teorema 2.1.2, entonces

$$\begin{aligned} f(A) &= U \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^k a_i \lambda_1^i & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{i=0}^k a_i \lambda_n^i \end{pmatrix} U^t \\ &= \sum_{i=0}^k a_i U \begin{pmatrix} \lambda_1^i & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n^i \end{pmatrix} U^t \\ &= \sum_{i=0}^k a_i A^i. \end{aligned}$$

ii) Notemos que si  $f(x) = x^{1/k}$  para  $x \geq 0$

$$\begin{aligned} f(A)^k &= \left( U \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/k} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n^{1/k} \end{pmatrix} U^t \right)^k \\ &= U \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/k} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n^{1/k} \end{pmatrix}^k U^t \\ &= U \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} U^t = A. \end{aligned}$$

Por el lema anterior  $f(A)$  es positiva y por tanto es la matriz que buscamos.

iii) por ser  $A$  autoadjunta

$$A = A^* = UDU^t.$$

Luego tomando  $f(x) = |x|$  podemos ver que

$$f(A) = U \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_n| \end{pmatrix} U^t = (UD^2U^t)^{1/2} = |A|.$$

**Lema 2.1.2** Para una función real  $f$  y  $A \in \mathcal{M}_n$  una matriz autoadjunta tenemos que

$$f(A)_{ii} = \sum_{j=0}^n p_{ij} f(\lambda_j),$$

donde  $p_{ij} > 0$ ,  $\sum_{j=1}^n p_{ij} = 1$  y  $\sum_{i=1}^n p_{ij} = 1$ , y  $\lambda_j$  son los valores propios de  $A$ .

**Demostración del lema:** De la definición de  $f(A)$  tenemos que

$$f(A)_{ii} = \sum_{j=0}^n u_{ij} f(\lambda_j) u_{ij} = \sum_{j=1}^n u_{ij}^2 f(\lambda_j),$$

donde  $U = \{u_{ij}\}_{ij}$  tiene por columnas a una base ortonormal y  $U^{-1} = U^t$  según el teorema de diagonalización 2.1.2. Así para  $p_{ij} = u_{ij}^2$ ,  $\sum_{j=1}^n p_{ij} = 1$  y  $\sum_{i=1}^n p_{ij} = 1$ .

Consideremos una matriz  $A$  autoadjunta y sea  $\phi_i$  el funcional lineal definido por  $\phi_i(A) = A_{ii}$ . Para este funcional podemos extender la desigualdad de Hölder como a continuación se muestra.

**Teorema 2.1.4 (Desigualdad de Hölder para  $\phi_i$ )** *Para funciones reales positivas  $f, g$  y  $A$  una matriz autoadjunta, tenemos que*

$$\phi_i(f(A)g(A)) \leq \phi_i(f(A)^q)^{1/q} \phi_i(g(A)^p)^{1/p}.$$

**Demostración** Una de las presentaciones más sencillas de la desigualdad de Hölder nos dice que para  $a_i, b_i$  números reales y  $p, q > 0$  con  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$  se cumple que

$$\sum_{i=1}^n a_i b_i \leq \left( \sum_{k=1}^n |a_k|^p \right)^{1/p} \left( \sum_{i=1}^n |b_i|^q \right)^{1/q}.$$

Aplicando la desigualdad a  $a_j = p_{ij}^{1/p} f(\lambda_j)$  y  $b_j = p_{ij}^{1/q} g(\lambda_j)$  obtenemos

$$\sum_{j=1}^n p_{ij} f(\lambda_j) g(\lambda_j) \leq \left( \sum_{j=1}^n p_{ij} f(\lambda_j)^p \right)^{1/p} \left( \sum_{j=1}^n p_{ij} g(\lambda_j)^q \right)^{1/q}$$

Notemos que  $\sum_{j=1}^n p_{ij} f(\lambda_j) g(\lambda_j) = \phi_i(f(A)g(A))$  con lo que

$$\phi_i(f(A)g(A)) \leq \phi_i(f(A)^p)^{1/p} \phi_i(g(A)^q)^{1/q}.$$

■

## 2.2 Teoría espectral de gráficas

La teoría espectral de gráficas se encarga del estudio de los valores propios de las gráficas y como estos se pueden entender a partir de propiedades estructurales. Dada una gráfica se contruye su matriz de adyacencia  $A = a_{ij}$ , donde cada entrada  $a_{ij}$  nos indican con un 1 si el  $i$ -ésimo vértices es vecino del  $j$ -ésimo, y con un 0 si no. En este capítulo se enlistarán y demostrarán propiedades del espectro de distintas gráficas que serán de utilidad en los próximos dos capítulos para el cálculo de la energía y el índice de Estrada de una gráfica.

A continuación presentamos las definiciones de los tres objetos que serán de nuestro interés: La matriz de adyacencia, su espectro y el polinomio característico de la gráfica.

**Definición 2.2.1 (Matriz de Adyacencia)** Dada una gráfica  $G$ , con  $|G| = n$  con vértices  $v_1 \dots v_n$ , se define su matriz de adyacencia como la matriz  $\{A_{ij}\}_{ij} \in \mathcal{M}_{n \times n}$ , tal que

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } v_i v_j \in V(G), \\ 0 & \text{si } v_i v_j \notin V(G). \end{cases}$$

**Definición 2.2.2 (Polinomio característico)** Dada una gráfica  $G$  de tamaño  $n$ , se define su polinomio característico por

$$P(G, x) = \det(xI_n - A_G),$$

donde  $I_n$  es la matriz identidad de tamaño  $n$  y  $A_G$  es la matriz de adyacencia de  $G$ .

**Definición 2.2.3 (Espectro)** Dada una gráfica  $G$ , su espectro es el conjunto de soluciones a  $P(G, x) = 0$ . Es decir, el conjunto de valores propios de la matriz de adyacencia de  $G$  (También llamados valores propios de  $G$ ).

Ya que la matriz de adyacencia de una gráfica simple es simétrica, sus valores propios son reales y suelen denotarse por  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  con  $\lambda_i \geq \lambda_j$  para  $i < j$ . Otra representación usada para denotar el espectro de una gráfica es mediante un vector de números  $\lambda_i$  con un exponente  $\mu_i$

$$S(G) = (\lambda_1^{(\mu_1)}, \dots, \lambda_r^{(\mu_r)}),$$

donde  $\lambda_i$  es un valor propio de  $G$  y  $\mu_i$  su respectiva multiplicidad.

Como primer resultado vemos como entender la matriz de adyacencia y sus potencias a partir de información combinatoria de la gráfica, esto es, el número de caminatas entre vértices dados.

**Teorema 2.2.1** Consideremos  $A = \{a_{i,j}\}_{i,j}$  la matriz de adyacencia de una gráfica  $G$ . Sea  $A^k = \{a_{i,j}^{(k)}\}_{i,j}$ , para  $k$  un entero positivo. Entonces  $a_{i,j}^{(k)}$  denota la cantidad de caminos de tamaño  $k$  que van del vértice  $v_i$  al vértice  $v_j$ .

**Demostración** Sea  $n = |G|$ . Notemos que

$$\begin{aligned} a_{i,j}^{(k)} &= \sum_{l_1=1}^n \cdots \sum_{l_{k-1}=1}^n a_{i,l_1} a_{l_1,l_2} \cdots a_{l_{k-1},j} \\ &= \sum_{l_1=1}^n \cdots \sum_{l_{k-1}=1}^n \mathbf{1}_{\{v_i \sim v_{l_1}\}} \mathbf{1}_{\{v_{l_1} \sim v_{l_2}\}} \cdots \mathbf{1}_{\{v_{l_{k-1}} \sim v_j\}} \\ &= \sum_{l_1=1}^n \cdots \sum_{l_{k-1}=1}^n \mathbf{1}_{\{v_i \sim v_{l_1} \sim v_{l_2} \cdots \sim v_{l_{k-1}} \sim v_j\}} \\ &= \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{k-1}} \mathbf{1}_{\{v_i \sim v_{l_1} \sim v_{l_2} \cdots \sim v_{l_{k-1}} \sim v_j\}} \\ &= \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{k-1}} \mathbf{1}_{\{(v_i, v_{l_1}, v_{l_2}, \dots, v_{l_{k-1}}, v_j) \text{ es un camino entre } v_i \text{ y } v_j\}} \\ &= \#\{\text{Caminos entre } i \text{ y } j\}. \end{aligned}$$

**Corolario 2.2.1** Si  $A$  es la matriz de adyacencia de una gráfica  $G$ , entonces  $Tr(A^k)$  denota la cantidad de caminos cerrados de tamaño  $k$ .

Este corolario es muy útil pues recordemos que para matrices autoadjuntas la traza de las potencias de una matriz se puede escribir en terminos de sus valores propios.

$$Tr(A^k) = \sum_i \lambda_i^k.$$

Así, hemos encontrando una relación entre el espectro y el número de caminos cerrados de la matriz. Lo anterior motiva las siguiente definición.

**Definición 2.2.4 (Momentos espectrales)** El  $k$ -ésimo momento espectral de una gráfica  $G$  está dado por

$$M_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k,$$

con  $\lambda_i$  los valores propios de  $G$ .

**Teorema 2.2.2** Dada una  $(n - m)$ -gráfica  $G$  y sus momentos espectrales  $M_k$ ,  $k \in \{1, 2, \dots\}$  se tiene que:

- a)  $M_0 = n$ .
- b)  $M_1 = 0$ .
- c)  $M_2 = 2m$ .
- d)  $M_3 = 6t$  donde  $t$  es la cantidad de triángulos de  $G$ .
- e)  $M_4 = 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8q$  con  $q$  la cantidad de cuadrángulos de  $G$  y  $d_i$  denota el grado de los vértices de  $G$ .
- f)  $M_i > 0$  para  $i$  par, si  $m \neq 0$ , y  $M_4 \geq 2m$ .

**Demostración:** Sea  $A$  la matriz de adyacencia de  $G$ , luego para  $k > 0$ ,

$$M_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k = Tr(A^k) = \#\{\text{Caminos de tamaño } k\}.$$

Entonces:

- a) Calculando directamente tenemos:

$$M_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^0 = \sum_{i=1}^n 1 = n.$$

- b) Ya que tratamos con una gráfica simple, no existen caminos de tamaño uno en  $G$ ,

$$M_1 = \#\{\text{caminos cerrados de tamaño } 1\} = 0.$$



- c) Por cada arista  $uv$  de  $G$  se tienen los dos caminos cerrados  $(u, v, u)$  y  $(v, u, v)$ . y es la única forma que puede tener un camino de tamaño 2. Es decir, por cada arista hay 2 caminos de tamaño 2. Con esto

$$M_2 = \#\{\text{Caminos cerrados de tamaño 2}\} = 2m.$$

- d) Por cada triángulo  $v_1, v_2, v_3$  de  $G$  al permutar los vértices obtenemos los seis caminos cerrados de tamaño tres relacionados a dichos vértices. Así

$$M_3 = \#\{\text{Caminos cerrados de tamaño 3}\} = 6\#\{\text{Triángulos de } G\} = 6t.$$

- e) Notemos que podemos separar los caminos de tamaño cuatro de la siguiente manera: Primero, los caminos de la forma  $(v_i, v_j, v_i, v_k, v_i)$ . Para  $v_i$  fijo, podemos elegir  $v_j$  y  $v_k$  de  $d_i^2$ . Segundo, caminos de la forma  $(v_i, v_j, v_k, v_j, v_i)$ . con  $v_i \neq v_k$ . Fijando  $v_j$  hay  $d_j(d_j - 1)$  formas de elegir  $v_i$  y  $v_k$ . Tercero, los ciclos  $(v_i, v_j, v_k, v_l, v_i)$  con  $v_i, v_j, v_k$  y  $v_l$  distintos entre sí. Hay 8 caminos de este tipo por cada cuadrángulo de  $G$ . De esta forma,

$$\begin{aligned} M_4 &= \sum_{i=1}^n d_i^2 + \sum_{i=1}^n d_i(d_i - 1) + 8q \\ &= 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - \sum_{i=1}^n d_i + 8q \\ &= 2 \sum_{i=1}^n d_i^2 - 2m + 8q. \end{aligned}$$

- f) Notemos que cualquier camino cerrado de tamaño dos define un camino cerrado de tamaño  $2k$  al recorrerlo  $k$  veces. De esta forma

$$M_{2k} = \#\{\text{Caminos cerrados de tamaño } 2k\} \geq \#\{\text{Caminos de tamaño 2}\} = 2m,$$

si  $m \neq 0$ , entonces

$$M_{2k} \geq 2m > 0.$$

En particular, al tomar  $k = 2$  tenemos que

$$M_4 \geq 2m.$$

Los valores propios de una gráfica nos dan información sobre esta misma, tal es el caso de la relación que guardan el valor propio más grande y el grado promedio.

**Teorema 2.2.3** *Si  $\lambda_1$  es el valor propio más grande de una gráfica  $G$ , entonces  $\lambda_1$  es mayor o igual al grado promedio.*

$$d(G) \leq \lambda_1.$$

Además,  $\lambda_1 = d(G)$  si y sólo si  $G$  es regular.

**Demostración:** Sea  $A$  la matriz de adyacencia de  $G$ . Vamos a usar la siguiente caracterización de valor propio más grande de una matriz,

$$\lambda_1 = \sup \{x^T Ax, \quad \|x\| = 1\}.$$

Esto se sigue al considerar una base ortogonal de vectores propios  $\{x_1, \dots, x_n\}$  y  $x = \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_n x_n$  con  $\alpha_1^2 + \dots + \alpha_n^2 = 1$  con lo que

$$x^T Ax = \lambda_1 \alpha_1^2 + \dots + \lambda_n \alpha_n^2,$$

ya que  $Ax_i = \lambda_i x_i$  para  $i = 1, \dots, n$ . Notemos que  $\lambda_1 \alpha_1^2 + \dots + \lambda_n \alpha_n^2$  toma su valor máximo cuando  $\alpha_1 = 1$  y  $\alpha_i = 0$  para  $i \neq 1$ . Es decir, cuando  $Ax = \lambda_1 x$ . De aquí que  $x^T Ax \leq \lambda_1$  cuando  $\|x\| = 1$ . Esto es conocido como la propiedad de Rayleigh, más detalles pueden verse en [10]. Usando ahora el vector  $\frac{1}{\sqrt{n}}(1, 1, \dots, 1)$  obtenemos que

$$\lambda_1 \leq \frac{1}{n}(d_1 + \dots + d_n),$$

donde  $d_i$  son los grados de los vértices de  $G$ . Por otro lado, como la igualdad se obtiene si y sólo si  $Ax = \lambda_1 x$ , es decir si  $x$  es un vector propio de  $G$ , como  $(1, \dots, 1)$  es vector propio de  $G$  si y sólo si  $G$  es regular tenemos que  $d(G) = \lambda_1$  si y sólo si  $G$  es regular. ■

**Teorema 2.2.4** *Una gráfica conexa no completa es fuertemente regular (ejemplo 1.3.6) si y sólo si tiene tres distintos valores propios.*[10]

Otro resultado muy interesante y muy útil es el teorema de Sachs, que nos dice como calcular explícitamente el polinomio característico de una matriz contando un tipo particular de subgráficas de  $G$ .

**Teorema 2.2.5 (Teorema de Sachs)** *Sea  $G$  una gráfica y  $P(G, x) = \sum_{j=0}^n b_j x^{n-j}$  su polinomio característico. Entonces, para  $j \geq 1$*

$$b_j = \sum_{S \in L_j} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)},$$

donde  $L_j$  denota el conjunto de subgráficas de  $G$  con  $j$  vértices tales que sus componentes conexas son  $K_2$  o un ciclo (a este tipo de gráficas se les llama gráficas de Sachs);  $w(S)$  es la cantidad de componentes conexas de  $S$ ; y  $c(S)$  es el número de ciclos que tiene  $S$ . Además  $b_0 = 1$ .

**Demostración:** Sea  $A = \{a_{ij}\}$  la matriz de incidencia  $G = (V, E)$ , con  $|V| = n$ . El polinomio característico de  $G$  está dado por

$$P(G, x) = \text{Det}(Ix - A) = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} \text{sgn}(\sigma) b_{1, \sigma(1)} b_{2, \sigma(2)} \dots b_{n, \sigma(n)},$$

donde  $\mathcal{S}_n$  es el conjunto de permutaciones de  $n$  elementos y

$$b_{i,j} = \begin{cases} x & \text{si } i = j, \\ -1 & \text{si } i \neq j, \end{cases}$$

es la entrada  $ij$  de la matriz  $Ix - A$ . Para  $\sigma \in \mathcal{S}_n$ , notemos que

$$b_{1,\sigma(1)}b_{2,\sigma(2)} \cdots b_{n,\sigma(n)} = 0$$

si para algún  $i$  que no es punto fijo de  $\sigma$ , la arista  $(i, \sigma(i))$  no está en  $E(G)$ . Consideremos  $G_\sigma$  una gráfica dirigida sobre los vértices de  $G$  que no son puntos fijos de  $\sigma$  y que tiene conjunto de aristas

$$E(G_\sigma) = \{(i, \sigma(i)) : i \text{ no es punto fijo de } \sigma\}.$$

Escribiendo a  $\sigma$  como producto de ciclos disjuntos podemos ver que las componentes conexas de  $G_\sigma$  están formadas precisamente por los ciclos de la factorización de  $\sigma$ . Por lo que estas componentes son  $K_2$ 's o ciclos. Así  $G_\sigma$  es una gráfica de Sachs (dirigida). Para que

$$b_{1,\sigma(1)}b_{2,\sigma(2)} \cdots b_{n,\sigma(n)} \neq 0,$$

se necesita que para toda arista de  $G_\sigma$  exista su arista (sin dirección) correspondiente en  $G$ . Si esto se cumple decimos que  $G_\sigma$  tiene como soporte a  $G$ . Si  $k$  es el número de puntos fijos de  $\sigma$ , entonces

$$\text{sgn}(\sigma)b_{1,\sigma(1)}b_{2,\sigma(2)} \cdots b_{n,\sigma(n)} = x^k(-1)^{n-k}(\text{sgn}(\sigma)).$$

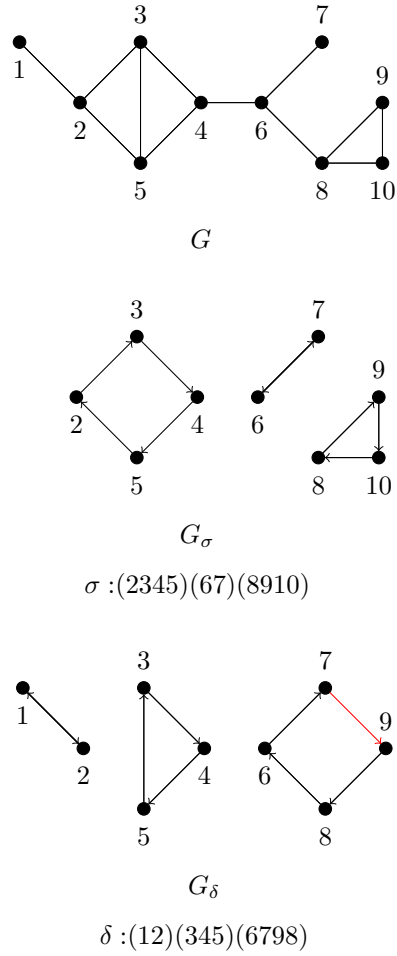


Figura 2.1: Gráficas asociadas a dos permutaciones,  $G_\sigma$ , que tiene a  $G$  como soporte. Y  $G_\delta$ , que no tiene a  $G$  como soporte.

Recordemos que el signo de una permutación es igual al producto del signo de cada uno de los ciclos de su factorización en ciclos y que un ciclo de tamaño  $r$  tiene signo  $(-1)^{r-1}$ . Si  $C$  es el conjunto de las componentes conexas de  $G_\sigma$ , entonces

$$\begin{aligned}
 x^k (-1)^{n-k} \operatorname{sgn}(\sigma) &= x^k (-1)^{n-k} \prod_{c \in C} (-1)^{(|c|-1)} \\
 &= x^k (-1)^{n-k} (-1)^{\sum_{c \in C} (|c|-1)} \\
 &= x^k (-1)^{n-k} (-1)^{(n-k - \sum_{c \in C} 1)} \\
 &= x^k (-1)^{\sum_{c \in C} 1} \\
 &= x^k (-1)^{|C|} \\
 &= x^k (-1)^{w(G_\sigma)},
 \end{aligned}$$

con  $w(G_\sigma)$  el número de componentes conexas de  $G_\sigma$ . Notemos ahora que para

cada subgráfica  $S$  de  $G$  que es gráfica de Sachs (no dirigida) existen varias permutaciones  $\sigma$ , tales que  $S$  (y por tanto  $G$ ) es soporte de  $G_\sigma$ . Al considerar una dirección en cada ciclo de  $S$  definimos a  $\sigma$ , por lo que hay  $2^{c(S)}$  permutaciones distintas que tienen a  $S$  como soporte, donde  $c(S)$  es el número de ciclos de  $S$ .

De esta forma sumando sobre las permutaciones con  $k$  puntos fijos tenemos

$$\begin{aligned} P(G, x) &= \sum_{S \in L_{n-k}} x^k (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} \\ &= \sum_{S \in L_j} x^{n-j} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)}, \end{aligned}$$

donde  $L_j$  denota el conjunto de subgráficas de Sachs de  $G$  con  $j$  vértices. Considerando el coeficiente de cada grado obtenemos

$$b_j = \sum_{S \in L_j} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)},$$

y además,

$$b_0 = \sum_{S \in L_0} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} = 1.$$

■

**Teorema 2.2.6** Sean  $G_1, G_2, \dots, G_k$  las componentes conexas de una gráfica  $G$ . Entonces

$$P(G, x) = \prod_{i=1}^k P(G_i, x).$$

**Demostración:** Consideremos a la matriz de adyacencia de  $G$  y la matriz de cambio de base  $B$ , que ordena a los vértices de  $G$  poniendo primero a los vértices de  $G_1$ , luego los de  $G_2$  y así sucesivamente.

De esta forma tenemos que el polinomio característico de  $G$  es

$$\begin{aligned} P(G, x) &= \text{Det}(Ix - A) \\ &= \text{Det}(B(Ix - A)B^{-1}) \\ &= \text{Det}(Ix - BAB^{-1}) \end{aligned}$$

Notemos que  $Ix - BAB^{-1}$  es una matriz diagonal por bloques, con bloques  $Ix - A_i$ , donde  $A_i$  es la matriz de adyacencia de la componente  $G_i$ . De las propiedades de los determinantes tenemos que

$$\begin{aligned} P(G, x) &= \text{Det}(Ix - BAB^{-1}) \\ &= \prod_i^k \text{Det}(Ix - A_i) \\ &= \prod_i^k P(G_i, x). \end{aligned}$$

■

**Teorema 2.2.7** *Dada una gráfica  $G$  y  $uv \in E(G)$ . Podemos escribir el polinomio característico de  $G$  como:*

$$P(G, x) = P(G - uv, x) - P(G - u - v, x) - 2 \sum_{C \in \mathcal{C}(uv)} P(G - C, x), \quad (2.1)$$

donde  $\mathcal{C}$  es el conjunto de ciclos que contienen a  $uv$ . En particular, si  $uv$  es una arista con algún vértice extremo, digamos  $v$ , entonces

$$P(G, x) = xP(G - v, x) - P(G - u - v, x).$$

**Demostración:** Sean

$$\begin{aligned} P(G, x) &= \sum_{j=0}^n b_j x^{n-j}, \\ P(G - uv, x) &= \sum_{j=0}^n a_j x^{n-j}, \\ P(G - u - v, x) &= \sum_{j=0}^{n-2} d_j x^{n-2-j}, \\ P(G - C, x) &= \sum_{j=0}^{n-|C|} c_j^{(C)} x^{n-|C|-j}. \end{aligned}$$

Sustituyendo en (2.1) tenemos

$$\sum_{j=0}^n b_j x^{n-j} = \sum_{j=0}^n a_j x^{n-j} - \sum_{j=0}^{n-2} d_j x^{n-2-j} - 2 \sum_{C \in \mathcal{C}(uv)} \sum_{j=0}^{n-|C|} c_j^{(C)} x^{n-|C|-j}.$$

Lo cual se cumple si y sólo si

$$b_j = a_j - d_{j-2} - 2 \sum_{C \in \mathcal{C}(uv)} c_{j-|C|}^{(C)}.$$

Para  $j > 0$  donde consideramos  $d_i = 0$  y  $c_i^{(C)} = 0$  si  $i < 0$ .

Para demostrar esta igualdad haremos uso del Teorema de Sachs. Consideremos  $S \in L_j^{(G)}$  una subgráfica de Sachs de  $G$  con  $j$  vértices. Existen varias opciones para la arista  $uv$ .

- i)  $uv \notin E(S)$ . En este caso  $S \in L_j^{(G-uv)}$  si y sólo si  $S \in L_j^{(G)}$  y  $u, v$  no pertenecen a  $S$ .
- ii)  $uv \in E(S)$  y  $u, v$  forman una componente conexa de  $S$  isomorfa a  $K_2$ . Sea  $K$  la gráfica formada por  $u, v$  y la arista  $uv$ . Notemos que si  $S = S' \cup K$  entonces  $S' \in L_{j-2}^{(G-u-v)}$  si y sólo si  $S \in L_j^{(G)}$  y  $u, v$  forma una componente conexa de  $S$ . Notemos además que  $S$  tiene una componente conexa más que  $S'$  y la misma cantidad de ciclos.
- iii)  $uv \in E(S)$  y  $u, v$  son parte de una componente conexa de  $S$  que es un ciclo. Si  $C$  es un ciclo de  $G$  que contiene a  $uv$ , y  $S = S'' \cup C$  entonces  $S'' \in L_{j-|C|}^{(G-C)}$  si y sólo si  $S \in L_j^{(G)}$  y  $C$  es una componente conexa de  $S$ . Además  $S$  tiene un ciclo y una componente conexa más que  $S''$ .

Del Teorema de Sachs considerando los casos anteriores tenemos que

i)

$$\sum_{\substack{S \in L_j^{(G)} \\ uv \notin E(S)}} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} = \sum_{S \in L_j^{(G-uv)}} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} = a_j.$$

ii)

$$\sum_{\substack{S \in L_j^{(G)} \\ K \text{ componente de } S}} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} = \sum_{S' \in L_{j-2}^{(G-u-v)}} (-1)^{w(S')+1} 2^{c(S')} = -d_j.$$

iii) Para  $C \in \mathcal{C}(uv)$

$$\sum_{\substack{S \in L_j^{(G)} \\ C \text{ ciclo de } S}} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)} = \sum_{S'' \in L_{j-2}^{(G-u-v)}} (-1)^{w(S'')+1} 2^{c(S'')+1} = -2c_j^{(C)}.$$

Nuevamente, por el Teorema de Sachs tenemos que

$$b_j = \sum_{S \in L_j^{(G)}} (-1)^{w(S)} 2^{c(S)}.$$

Finalmente, separando la suma sobre los elementos de  $L_j^{(G)}$  en los casos anteriores obtenemos.

$$b_j = a_j - d_{j-2} - 2 \sum_{C \in \mathcal{C}(uv)} c_j^{(C)}.$$

■

**Corolario 2.2.2** *Sea  $G$  un bosque, y  $e = (u, v) \in E(G)$ . Entonces el polinomio característico de  $G$  cumple*

$$P(G, x) = xP(G - e, x) - P(G - u - v, x).$$

**Teorema 2.2.8** *(Teorema de Sachs para bosques) Sea  $G$  un bosque con  $|G| = n$ , entonces*

$$P(G, x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k m(G, k) x^{n-2k},$$

donde  $m(G, k)$  es la cantidad de  $k$ -emparejamientos de  $G$ .

**Demostración:** Ya que un bosque no contiene ciclos, toda subgráfica de Sachs de  $G$  está formada por uniones de  $K_2$ 's, y por tanto sólo hay subgráficas de Sachs de  $G$  con una cantidad par de vértices. De esta forma, por el teorema de Sachs, tenemos que el coeficiente de  $x^{n-j}$  para  $j$  impar es cero y para  $j = 2k$  es

$$\begin{aligned} b_{2k} &= \sum_{S \in L_{2k}} (-1)^{w(S)} \\ &= \sum_{S \in L_{2k}} (-1)^k \\ &= (-1)^k \sum_{S \in L_{2k}} 1. \end{aligned}$$

Ya que un  $k$ -emparejamiento es un conjunto de  $k$  aristas independientes, cada gráfica de Sachs con  $2k$  vértices nos da un  $k$ -emparejamiento dado por las aristas que la conforman. Así

$$b_{2k} = (-1)^k m(G, k)$$

y por lo tanto

$$P(G, x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^k m(G, k) x^{n-2k}.$$

■

**Teorema 2.2.9** *Si  $G$  es una gráfica bipartita, entonces su polinomio característico tiene la forma*

$$P(G, x) = \sum_{k \geq 0} (-1)^k b_{2k} x^{n-2k},$$

con  $b_{2k} \geq 0$ .

**Demostración:** Ya que  $G$  es una gráfica bipartita, existen dos conjuntos de vértices  $U_1$  y  $U_2$  tal que para cada par de elementos dentro de cada  $U_i$ , no existen aristas entre ellos. De esta forma con un cambio de base, se puede escribir la matriz de adyacencia de  $G$  como la matriz por bloques

$$A = \begin{pmatrix} 0 & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix},$$

con  $B \in \mathcal{M}_{n_2 n_1}$  donde  $n_i$  son el tamaño de  $U_i$ . Notemos que para  $\lambda$  un valor propio de  $A$  podemos representar su vector propio asociado como el vector por bloques  $V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}$ , donde  $V_i \in \mathcal{M}_{n_i, 1}$ . Ya que  $V$  es vector propio con valor propio  $\lambda$ , se sigue que

$$B^T V_2 = \lambda V_1$$

y

$$B V_1 = \lambda V_2.$$

De esta forma

$$\begin{aligned} A \begin{pmatrix} -V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} B^T V_2 \\ -B V_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda V_1 \\ -\lambda V_2 \end{pmatrix} \\ &= -\lambda \begin{pmatrix} -V_1 \\ V_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto  $-\lambda$  es valor propio de  $A$  con la misma multiplicidad que  $\lambda$ . De aquí se sigue que el polinomio característico de  $G$  se puede escribir como

$$P(G, x) = x^r \prod_i (x^2 - \lambda_i).$$



Donde  $r$  es la multiplicidad del cero, De esta forma al expandir tenemos el coeficiente de  $x^{n-2k}$ , para  $n - 2k \geq r$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{i_1, \dots, i_k} (-\lambda_{i_1}^2)(-\lambda_{i_2}^2) \dots (-\lambda_{i_k}^2) \\ &= (-1)^k \sum_{i_1, \dots, i_k} (\lambda_{i_1}, \dots, \lambda_{i_k})^2 \\ &= (-1)^k b_{2k}, \end{aligned}$$

con  $b_{2k} \geq 0$ . En otros casos el coeficiente es cero. Tomando  $b_{2k} = 0$  cuando  $n - 2k < r$  obtenemos:

$$P(G, x) = \sum_{k \geq 0} (-1)^k b_{2k} x^{n-2k}.$$

■

## 2.3 Ejemplos

Terminamos mostrando el espectro de algunas familias de gráficas conocidas.

- $S(K_n) = \left( (n-1)^{(1)}, 1^{(n-1)} \right)$ .
- $S(S_n) = \left( -\sqrt{n-1}^{(1)}, 0^{(n-2)}, \sqrt{n-1}^{(1)} \right)$ .
- $S(C_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right) : j = \{0, 1, \dots, n-1\} \right\}$ .
- $S(P_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) : j = \{1, 2, \dots, n\} \right\}$ .
- $S(H_n) = \left( (-n)^{\binom{n}{0}}, (-n+2)^{\binom{n}{1}}, \dots, (n-2)^{\binom{n}{n-1}}, n^{\binom{n}{n}} \right)$ .

**Teorema 2.3.1** *El espectro del hipercubo  $H_n$  está formado por los valores propios  $\lambda_k = -n + 2k$  con multiplicidad  $\binom{n}{k}$ .*

Antes de esto probemos el siguiente resultado.

**Teorema 2.3.2** *(Espectro del producto cartesiano de gráficas) Sean  $G_1$  y  $G_2$  dos gráficas, con valores propios  $\lambda_i, i = 1, \dots, n_1$  y  $\mu_j, j = 1, \dots, n_2$  respectivamente. El espectro de  $G_1 \times G_2$  está formado por los valores propios  $\lambda_i + \mu_j, i = 1, \dots, n_1, j = 1, \dots, n_2$ .*

**Demostración:** Si  $A$  y  $B$  son las matrices de adyacencia de  $G_1$  y  $G_2$  respectivamente, notemos que la matriz de adyacencia de  $A_{G_1 \times G_2}$  está dada por

$$A_{G_1 \times G_2} = (A \otimes I_{n_2}) + (B \otimes I_{n_1}).$$

Notemos además que para cualquier matriz diagonal  $D$ , la matriz  $D \otimes I_n$  es diagonal con los mismos valores propios de  $D$  repetidos  $n$  veces. Así, si  $A = V^*DV$  tenemos que

$$\begin{aligned} A \otimes I_{n_2} &= V^*DV \otimes I_{n_2} \\ &= (V^* \otimes I_{n_2})(D \otimes I_{n_2})(V \otimes I_{n_2}). \end{aligned}$$

Notemos que  $D \otimes I_{n_2}$  es diagonal y así  $A \otimes I_{n_2}$  tiene los mismos valores que  $A$  pero con multiplicidad  $n_2$ . De forma similar  $B \otimes I_{n_1}$  tiene los mismo valores propios que  $B$  pero con multiplicidad  $n_1$ .

Para calcular los valores propios de  $A_{G_1 \times G_2}$  veremos que  $A \otimes I_{n_2}$  y  $B \otimes I_{n_1}$  son simultáneamente diagonalizables. Sean  $V \in \mathcal{M}_{n_1}$  unitaria tal que diagonaliza a  $A$  y  $U \in \mathcal{M}_{n_2}$  unitaria tal que que diagonaliza a  $B$ . Luego

$$\begin{aligned} (V \otimes U)(A \otimes I_{n_2})(V \otimes U)^* &= (V \otimes U)(A \otimes I_{n_2})(V^* \otimes U^*) \\ &= (VA \otimes UI_{n_2})(V^* \otimes U^*) \\ &= VAV^* \otimes UI_{n_2}U^* \\ &= VAV^* \otimes I_{n_2}. \end{aligned}$$

Por otro lado

$$\begin{aligned} (V \otimes U)(I_{n_1} \otimes B)(V \otimes U)^* &= (V \otimes U)(I_{n_1} \otimes B)(V^* \otimes U^*) \\ &= (VI_{n_1} \otimes UB)(V^* \otimes U^*) \\ &= VI_{n_1}V^* \otimes UBU^* \\ &= VI_{n_1}V^* \otimes UBU^*. \end{aligned}$$

Con lo que ambas matrices son simultáneamente diagonalizables, y por tanto su espectro es la suma de los valores propios en el mismo orden que aparecen en la diagonal.

Notemos que los valores propios de  $VAV^* \otimes I_{n_2}$  aparecen en su diagonal en el orden siguiente:

$$\lambda_1, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_2, \dots, \lambda_{n_1}, \dots, \lambda_{n_1}$$

y los valores propios de  $I_{n_1} \otimes UBU^*$  en el orden:

$$\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n_2}, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n_2}, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n_2}.$$

Por lo tanto los valores propios de  $A_{G_1 \times G_2}$  son el conjunto de números  $\lambda_i + \mu_j$  con  $i = 1, \dots, n_1$ ,  $j = 1, \dots, n_2$ . ■

**Demostración del Teorema 2.3.1** Ya que  $H_n = P_2^n$  y  $P_2$  tiene como espectro  $(1, -1)$ . Del Teorema 2.3.2. Los valores propios de  $H_n$  son sumas de  $n$  términos tomados de  $\{1, -1\}$ . Si  $k$  de estos términos son 1's entonces los valores propios de  $H_n$  tienen la forma

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \underbrace{-1 - 1 \cdots - 1}_{n-k \text{ veces}} + \underbrace{1 + 1 \cdots 1}_k \\ &= -(n-k) + k \\ &= -n + 2k, \end{aligned}$$

y hay exactamente  $\binom{n}{k}$  formas de sumar  $\lambda_k$ . ■

**Teorema 2.3.3** *El espectro de la estrella  $S_n$  se encuentra formado por los valores*

$$S(S_n) = \left( (-\sqrt{n-1})^{(1)}, 0^{(n-2)}, \sqrt{n-1}^{(1)} \right).$$

**Demostración:** Usando el teorema de Sachs para bosques (Teorema 2.2.8), basta encontrar los  $k$ -emparejamientos de  $S_n$  para encontrar su polinomio característico. Observemos que no es posible formar ningún  $k$ -emparejamiento de  $S_n$  para  $k \geq 2$ , debido a que cualquier par de aristas son incidentes. Luego, para  $k = 1$ , cada una de las  $n - 1$  aristas de  $S_n$  forma un 1-emparejamiento y para  $k = 0$  solamente tenemos el emparejamiento vacío. De esta forma el polinomio característico de  $S_n$  es

$$P(S_n, x) = x^n - (n - 1)x^{(n-2)}.$$

Factorizando obtenemos

$$P(S_n, x) = x^{n-2}(x^2 - (n - 1)) \quad (2.2)$$

$$= x^{n-2}(x - \sqrt{n-1})(x + \sqrt{n-1}). \quad (2.3)$$

De aquí tenemos los valores propios de  $S_n$  con sus multiplicidades.

**Teorema 2.3.4** *El espectro de  $P_n$  lo conforman el conjunto de valores:*

$$S(P_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) : j = \{1, 2, \dots, n\} \right\}.$$

En [38] es demostrado este hecho haciendo uso de una recursión sobre el polinomio característico de  $P_n$ . A continuación se muestra a detalle este procedimiento.

**Demostración.** Usamos la fórmula para el polinomio característico de bosques que se encuentra en el Corolario 2.2.2 y lo aplicamos a  $P_n$  usando una de las aristas que inciden con una hoja para obtener de esta forma una fórmula recursiva

$$P(P_n, x) = xP(P_{n-1}, x) - P(P_{n-2}, x). \quad (2.4)$$

Resolvemos la recursión  $a_n = P(P_n, x)$  para un  $x$  fijo. El polinomio característico de la recursión anterior está dada por

$$f(y) = y^2 - xy + 1,$$

que tiene soluciones  $y_1 = \frac{x + \sqrt{x^2 - 4}}{2}$  y  $y_2 = \frac{x - \sqrt{x^2 - 4}}{2}$ . De donde

$$a_n = c_1 y_1^n + c_2 y_2^n.$$

Resolviendo con los valores iniciales  $a_1 = P(P_1, x) = x$  y  $a_2 = P(P_2, x) = x^2 - 1$ , tenemos que

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 4}} \left( \frac{x + \sqrt{x^2 - 4}}{2} \right), \quad c_2 = -\frac{1}{\sqrt{x^2 - 4}} \left( \frac{x - \sqrt{x^2 - 4}}{2} \right),$$

con lo que

$$P(P_n, x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 4}} \left[ \left( \frac{x + \sqrt{x^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} - \left( \frac{x - \sqrt{x^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} \right].$$

Luego, si  $\lambda$  es un valor propio de  $P_n$ ,  $\lambda$  cumple

$$0 = P(P_n, \lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 - 4}} \left[ \left( \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} - \left( \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} \right],$$

y así

$$\begin{aligned} \left( \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \right)^{n+1} &= \left( \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \right)^{n+1}, \text{ es decir} \\ \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} &= \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \cdot \mathcal{E} \end{aligned}$$

para algún  $\mathcal{E}$  con  $\mathcal{E}^{n+1} = 1$ . Despejando  $\lambda^2$ , y como  $\lambda$  es real, tenemos que

$$\lambda^2 = \frac{(1 + \mathcal{E})^2}{\mathcal{E}} = |1 + \mathcal{E}|^2,$$

de donde

$$\lambda = \pm |1 + \mathcal{E}| = \pm \sqrt{2 + \cos \frac{2k\pi}{n+1}} = \pm 2 \cos \frac{kn}{n+1}$$

con  $k = 0, \dots, n$ . ■ Para encontrar el espectro del ciclo usaremos el siguiente lema.

**Lema 2.3.1** *Si  $A$  es una matriz invertible con valores propios  $\lambda_i$  con su respectivo vector propio asociado  $v_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Entonces  $\frac{1}{\lambda_i}$  es un vector propio de  $A^{-1}$  con vector propio asociado  $v_i$ .*

**Teorema 2.3.5** *El espectro del ciclo  $C_n$  está dado por*

$$S(C_n) = \left\{ 2 \cos \left( \frac{\pi j}{n} \right) : j = 0, 1, \dots, n-1 \right\}.$$

**Demostración.** Para  $n \geq 3$ , sea

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ 1 & & & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

la matriz de incidencia de  $C_n$ .

Consideremos la matriz cíclica  $B \in \mathcal{M}_n$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & 0 & 1 & \\ 1 & & & & 0 \end{pmatrix},$$

y su inversa

$$B^{-1} = B^{n-1} = \begin{pmatrix} 0 & & & 1 \\ 1 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

De esta manera  $A = B + B^{-1}$  luego si  $\lambda_i$  es un valor propio de  $B$  con vector propio  $v_i$ , por el lema anterior tenemos

$$\begin{aligned} (B + B^{-1})v_i &= Bv_i + B^{-1}v_i \\ &= \lambda_i v_i + \frac{1}{\lambda_i} v_i \\ &= \left(\lambda_i + \frac{1}{\lambda_i}\right)v_i. \end{aligned}$$

Por lo tanto los valores propios de  $A$  son de la forma  $\lambda_i + \frac{1}{\lambda_i}$  con  $\lambda_i$  valor propio de  $B$ . Para calcular los valores propios de  $B$  consideramos su polinomio característico

$$\begin{aligned} P(B, x) &= \text{Det}(I_n x - B) \\ &= \text{Det} \begin{pmatrix} x & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & x & -1 \\ -1 & & & x \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Considerando la primer columna para calcular el determinante de la matriz por medio de sus menores, tenemos que

$$P(B, x) = x \cdot \text{Det} \begin{pmatrix} x & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & x & -1 \\ & & & x \end{pmatrix} + (-1)^n \cdot \text{Det} \begin{pmatrix} -1 & & & \\ x & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & x & -1 \end{pmatrix}.$$

Considerando la primer fila de las matrices anteriores para calcular sus determinantes tenemos

$$\begin{aligned} P(B, x) &= x \cdot x^{n-1} + (-1)^n \cdot (-1)^{n-1} \\ &= x^n - 1. \end{aligned}$$

Y por tanto los valores propios de  $B$  son las raíces de la unidad, esto es

$$\mu_k = \exp \left\{ \frac{2\pi i k}{n} \right\}.$$

$k = 0, 1, \dots, n-1$ . Finalmente, de la relacion entre  $B$  y  $A$ , los valores propios

de  $C_n$  son

$$\begin{aligned}\lambda_k &= \mu_k + \frac{1}{\mu_k} \\ &= \mu_k + \overline{\mu_k} \\ &= 2\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right).\end{aligned}$$

■

**Teorema 2.3.6** *El espectro de  $K_n$  está dado por*

$$S(K_n) = (n-1, -1^{(n-1)}).$$

**Demostración** Sea  $A$  la matriz de adyacencia de  $K_n$  y  $J \in \mathcal{M}_n$  la matriz llena de 1's y sea  $I \in \mathcal{M}$  la matriz identidad. Entonces

$$\begin{aligned}A &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} \\ &= J - I.\end{aligned}$$

Como  $IJ = J = JI$ , entonces  $I$  y  $J$  son simultáneamente diagonalizables y el espectro de  $J - I$  está formado por la suma de los valores propios correspondientes de  $J$  y de  $-I$ . Como  $J$  tiene rango 1 y

$$J \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n \\ \vdots \\ n \end{pmatrix},$$

el espectro de  $J$  está dado por  $(0^{(n-1)}, n)$ . Luego, la identidad tiene espectro  $(1^{(n)})$ . Por lo tanto el espectro de  $K_n$  es

$$S(K_n) = (-1^{(n-1)}, n-1).$$

■

## Capítulo 3

# Energía de gráficas

Este capítulo está dedicado a energía de gráficas. La energía de una gráfica  $G$  está definida como la suma del valor absoluto de sus valores propios  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ .

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|. \quad (3.1)$$

Esta cantidad fue estudiada para gráficas que vienen de moléculas pero su estudio fue generalizado a partir de los trabajos de Gutman [30].

Este capítulo se compone de cinco secciones. En la primera daremos una breve motivación química. Después, en la segunda sección presentamos el cálculo de la energía para algunos ejemplos y continuamos en la Sección 3.4 con desigualdades básicas. Seguido de esto en la Sección 3.4 presentamos la fórmula integral de Coulson, la cual será usada posteriormente en la Sección 3.5 para hacer un estudio de la energía de árboles.

### 3.1 Motivación Química

La definición de energía de gráfica guarda una relación desde su definición con la química. Pues tiene sus orígenes entre los años 1930 y 1940 con el modelo molecular orbital de Hückel (HMO). Éste fue desarrollado para encontrar un método para aproximar la ecuación de Schrödinger en ciertos tipos de sistemas moleculares. La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial de segundo orden y para puede expresarse como

$$\mathcal{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$$

Donde  $\Psi$ ,  $\mathcal{H}$  y  $\mathcal{E}$  son llamados la función de onda, la matriz Hamiltoniana y la energía, respectivamente, del sistema considerado. El modelo HMO permite describir de forma aproximada el comportamiento de los  $\pi$ -electrones en una molécula conjugada, especialmente en los hidrocarburos conjugados. En el modelo HMO para hidrocarburos conjugados se considera la función de onda expandida en un espacio de dimensión  $n$  de funciones ortogonales y donde  $H \in \mathcal{M}_n$  con

$$H = \alpha I_n + \beta A_G,$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son ciertas constantes y  $A_G$  es la matriz de adyacencia de una gráfica que corresponde a la llamada gráfica molecular del compuesto, es decir el esqueleto de enlaces de carbón de la molécula. (Aunque en ese tiempo no fue expresada así, si no hasta 1956.) Como consecuencia, los niveles de energía  $\mathcal{E}$  de los  $\pi$ -electrones, están relacionados con los valores propios  $\lambda_i$  por  $\mathcal{E}_j = \alpha + \beta\lambda_j$ . En el modelo HMO la energía total está dada por

$$\mathcal{E} = \sum_{j=1}^n g_j \lambda_j,$$

donde  $g_j$  es el número de ocupación. Para la mayoría de casos relevantes en química

$$g_j = \begin{cases} 2 & \text{si } \lambda_j > 0, \\ 0 & \text{si } \lambda_j < 0. \end{cases}$$

De esta forma

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(G) = 2 \sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k,$$

Donde  $n_+$  es la cantidad de valores propios  $\lambda_k > 0$ .

Ya que la matriz de adyacencia de toda gráfica tiene solamente ceros en su diagonal tenemos que

$$0 = \text{Tr}(A_G) = \sum_{k=1}^n \lambda_k = \sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k + \sum_{k=n_++1}^n \lambda_k.$$

Así

$$\sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k = - \sum_{k=n_++1}^n \lambda_k,$$

con lo que la energía se puede escribir como

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(G) = 2 \sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k = \sum_{j=1}^n |\lambda_k|$$

Coincidiendo con la definición dada al comienzo del capítulo.

De esta forma podemos definir la energía para cualquier gráfica en general como en (3.1).

## 3.2 Ejemplos

Para tomar un poco de intuición presentamos la energía de varios tipos de gráficas usando el hecho de que conocemos los valores del espectro que se encuentran en el Ejemplo 2.3.

**Ejemplo 3.2.1 (Gráfica completa)** Recordemos del Teorema 2.3.6 que la gráfica  $K_n$  tiene eigenvalores  $n-1$  con multiplicidad 1 y 1 con multiplicidad  $n-1$ , de donde podemos calcular

$$\mathcal{E}(K_n) = (n-1) + 1(n-1) = 2n-2.$$



**Observación:** A las gráficas con energía mayor que la de la gráfica completa  $K_n$  son llamadas gráficas hiper-energéticas.

**Ejemplo 3.2.2 (Estrella)** En el Teorema 2.3.3 se vió que la estrella  $S_n$  tiene como valores propios a  $\sqrt{n-1}$  con multiplicidad uno, a  $-\sqrt{n-1}$  con multiplicidad uno y a 0 con multiplicidad  $n-2$ . Con eso podemos calcular su energía.

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(S_n) &= |-\sqrt{n-1}| + |0|(n-2) + |\sqrt{n-1}| \\ &= 2\sqrt{n-1}.\end{aligned}$$

**Ejemplo 3.2.3 (Ciclo)** Para el ciclo  $C_n$ , se mostró en el Teorema 2.3.5 que su espectro está formado por

$$S(C_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{\pi j}{n}\right) : j = 0, 1, \dots, n-1 \right\}.$$

De esta forma podemos calcular su energía.

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(C_n) &= \sum_{j=0}^{n-1} \left| 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right) \right| \\ &= \begin{cases} \frac{4\cos\frac{\pi}{n}}{\sin\frac{\pi}{n}} & \text{si } n \equiv 0 \pmod{4} \\ \frac{4}{\sin\frac{\pi}{n}} & \text{si } n \equiv 2 \pmod{4} \\ \frac{2}{\sin\frac{\pi}{2n}} & \text{si } n \equiv 1 \pmod{2} \end{cases}\end{aligned}$$

Veremos ahora el comportamiento de  $\mathcal{E}(C_n)$  cuanto  $n \gg 0$ . Ya que para  $x$  muy cercano a cero  $\cos(x) \sim 1$  y  $\sin(x) \sim x$ , sustituyendo para  $n \gg 0$  a  $x$  por  $\frac{\pi}{n}$  o  $\frac{\pi}{2n}$  según la congruencia de  $n$ , obtenemos en cualquiera de los casos

$$\mathcal{E}(C_n) \sim \frac{4n}{\pi}.$$

**Ejemplo 3.2.4 (Camino)** En el Teorema 2.3.4 se muestra que el espectro de  $P_n$  está dado por

$$S(P_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) : j = \{1, 2, \dots, n\} \right\}. \quad (3.2)$$

Sumando estos valores obtenemos la energía de  $P_n$ .

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(P_n) &= \sum_{j=1}^n \left| 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) \right| \\ &= \begin{cases} \frac{2}{\sin\frac{\pi}{2(n+1)}} - 2 & \text{si } n \equiv 0 \pmod{2} \\ \frac{2\cos\frac{\pi}{2(n+1)}}{\sin\frac{\pi}{2(n+1)}} - 2 & \text{si } n \equiv 1 \pmod{2} \end{cases}\end{aligned}$$

Al igual que para el camino  $C_n$  veremos el comportamiento de  $\mathcal{E}(P_n)$  cuando  $n \gg 0$ . Usamos nuevamente que  $\cos(x) \sim 1$  y  $\sin(x) \sim x$  cuando  $x$  es muy cercano a cero y sustituimos esta vez a  $x$  por  $\frac{\pi}{2(n+1)}$ . Obtenemos de esta forma independientemente de la congruencia de  $n$ ,

$$\mathcal{E}(P_n) \sim \frac{2 \cdot 2(n+1)}{\pi} - 2 = \frac{4n}{\pi} + \frac{4}{\pi} - 2 = \frac{4n}{\pi} + c,$$

dónde  $c$  es una constante.

Vemos así que tanto la energía de  $C_n$  como la de  $P_n$ , tienen un comportamiento similar a  $\frac{4n}{\pi}$ .

Para calcular ahora la energía del hipercubo vamos a necesitar del siguiente lema.

**Lema 3.2.1** Para  $n \geq 0$ , se cumple que

$$i) \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} = n2^{2n-1}.$$

$$ii) \sum_{k=0}^n k \binom{2n+1}{k} = (2n+1)2^{2n-1} - \frac{2n+1}{2} \binom{2n}{n}.$$

**Demostración.** Veamos primero que para  $n \geq 0$  fijo, i) se cumple si y sólo si se cumple ii) para el mismo  $n$ . Por un lado tenemos que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n k \binom{2n+1}{k} &= \sum_{k=1}^n k \left( \binom{2n}{k} + \binom{2n}{k-1} \right) \\ &= \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} + \sum_{k=1}^n k \binom{2n}{k-1} \\ &= \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} + \sum_{k=1}^n (k-1) \binom{2n}{k-1} + \sum_{k=1}^n \binom{2n}{k-1} \\ &= \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} + \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} - n \binom{2n}{n} + \sum_{k=1}^n \binom{2n}{k-1} \\ &= 2 \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} + \left[ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{k} + \frac{\binom{2n}{n}}{2} \right] - n \binom{2n}{n} - \frac{\binom{2n}{n}}{2}. \end{aligned}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} (2n+1)2^{2n-1} - \frac{2n+1}{2} \binom{2n}{n} &= 2(n2^{2n-1}) + 2^{2n-1} - \frac{2n+1}{2} \binom{2n}{n} \\ &= 2(n2^{2n-1}) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n} \binom{2n}{k} - \frac{2n+1}{2} \binom{2n}{n} \\ &= 2(n2^{2n-1}) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n} \binom{2n}{k} - n \binom{2n}{n} - \frac{\binom{2n}{n}}{2}. \end{aligned}$$

Comparando ambas expresiones vemos que i) se cumple si y sólo si

$$2 \sum_{k=0}^n k \binom{2n}{k} + \left[ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{k} + \frac{\binom{2n}{n}}{2} \right] = 2(n2^{2n-1}) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n} \binom{2n}{k}.$$

De la simetría de los coeficiente binomiales sabemos que

$$\sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{k} + \frac{\binom{2n}{n}}{2} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n} \binom{2n}{k}.$$

Con lo que se cumple i) si solo si ii) se cumple.

Veamos ahora que si *ii)* se cumple para algún  $n \leq 0$  entonces *i)* se cumple para  $n + 1$ . Tenemos que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{n+1} k \binom{2(n+1)}{k} &= \sum_{k=1}^{n+1} k \left( \binom{2n+1}{k} + \binom{2n+1}{k-1} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} k \binom{2n+1}{k} + \sum_{k=1}^{n+1} k \binom{2n+1}{k-1} \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} k \binom{2n+1}{k} + \sum_{k=1}^{n+1} (k-1) \binom{2n+1}{k} + \sum_{k=1}^{n+1} \binom{2n+1}{k-1} \\ &= 2 \sum_{k=0}^n k \binom{2n+1}{k} + (n+1) \binom{2n+1}{n+1} + \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{k} \end{aligned}$$

Nuevamente por la simetría de los coeficientes binomiales sabemos que

$$\sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{k} = 2^{2n}.$$

Con esto y ya que se cumple ii) obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{n+1} k \binom{2(n+1)}{k} &= 2 \left[ (2n+1)2^{2n-1} - \frac{2n+1}{2} \binom{2n}{n} \right] + (n+1) \binom{2n+1}{n+1} + 2^{2n} \\ &= (2n+2)2^{2n} - (2n+1) \binom{2n}{n} + (n+1) \binom{2n+1}{n+1} \\ &= (n+1)2^{2(n+1)-1} - (2n+1) \binom{2n}{n} + (n+1) \binom{2n+1}{n+1}. \end{aligned}$$

Notemos que los últimos dos terminos se cancelan pues

$$\begin{aligned} (n+1) \binom{2n+1}{n+1} &= (n+1) \binom{2n}{n} + (n+1) \binom{2n}{n+1} \\ &= (n+1) \binom{2n}{n} + (n+1) \frac{(2n)!}{(n+1)!(n-1)!} \\ &= (n+1) \binom{2n}{n} + n \frac{(2n)!}{n!n!} \\ &= (2n+1) \binom{2n}{n}. \end{aligned}$$

■

**Ejemplo 3.2.5 (Hiper cubo)** Del Teorema 2.3.1 sabemos que el espectro de  $H_n$  está dado por los valores  $\lambda_k = -n + 2k$  cada uno con multiplicidad  $\binom{n}{k}$ ,  $k = 0, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ . Con esto podemos ver que la energía del hiper cubo es

$$\mathcal{E}(H_n) = 2 \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil \binom{n}{\lceil \frac{n}{2} \rceil}. \quad (3.3)$$

Para calcular la energía del hiper cubo primero notemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(H_n) &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} | -n + 2k | \\ &= \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (n - 2k) + \sum_{k=\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}^n \binom{n}{k} (-n + 2k) \\ &= \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (n - 2k) + \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-n + 2k) - \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (-n + 2k) \\ &= 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (n - 2k) - n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} + 2 \sum_{k=0}^n k \binom{n}{k} \\ &= 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (n - 2k) - n 2^n + 2n 2^{n-1} \\ &= 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} (n - 2k). \end{aligned}$$

Dividimos ahora en los siguientes casos: Cuando  $n$  es par, digamos  $n = 2r$ , del lema anterior tenemos que  $\sum_{k=0}^{2r} \binom{2r}{k} k = r 2^{2r-1}$ . Con lo que

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(H_n) &= 2 \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} (2r - 2k) \\ &= 2 \left[ 2r \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} - 2 \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} k \right] \\ &= 2 \left[ 2r \left( 2^{2r-1} + \frac{1}{2} \binom{2r}{r} \right) - 2(r 2^{2r-1}) \right] \\ &= 2r \binom{2r}{r}. \end{aligned}$$

En el caso cuando  $n$  es impar, digamos  $n = 2r + 1$  usando el inciso ii) del lema

anterior, tenemos que  $\sum_{k=0}^r k \binom{2r+1}{k} = (2r+1)2^{2r-1} - \frac{2r+1}{2} \binom{2r}{r}$ . Luego

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(H_n) &= 2 \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} (2r+1-2k) \\
 &= 2 \left[ (2r+1) \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} - 2 \sum_{k=0}^r \binom{2r}{k} k \right] \\
 &= 2 \left[ (2r+1) (2^{2r}) - 2 \left( (2r+1)2^{2r-1} - \frac{2r+1}{2} \binom{2r}{r} \right) \right] \\
 &= 2 \left[ (2r+1)(2^{2r} - 2^{2r}) + (2r+1) \binom{2r}{r} \right] \\
 &= 2(2r+1) \binom{2r}{r} \\
 &= 2 \frac{(r+1)(2r+1)}{r+1} \frac{(2r)!}{r!r!} \\
 &= 2(r+1) \binom{2r+1}{r+1}
 \end{aligned}$$

Con esto, para  $n$  en general, la energía del  $H_n$  está dada por

$$\mathcal{E}(H_n) = 2 \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil \binom{n}{\lceil \frac{n}{2} \rceil}.$$

En la tabla siguiente se calcularon la energía de varias gráficas

No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	4.000	2.828	4.000	2.828
4	6.000	3.464	4.000	4.472
5	8.000	4.000	6.472	5.464
6	10.000	4.472	8.000	6.988
7	12.000	4.899	8.988	8.055
8	14.000	5.292	9.657	9.518
9	16.000	5.657	11.518	10.628
10	18.000	6.000	12.944	12.053
11	20.000	6.325	14.053	13.192
12	22.000	6.633	14.928	14.592
13	24.000	6.928	16.592	15.750
14	26.000	7.211	17.976	17.134
15	28.000	7.483	19.134	18.306
16	30.000	7.746	20.109	19.676
17	32.000	8.000	21.676	20.860
18	34.000	8.246	23.035	22.219
19	36.000	8.485	24.219	23.412

A continuación presentamos la energía del hipercubo  $H_n$  (con  $2^n$  vértices)

n	No. vértices	$H_n$
1	2	2
2	4	4
3	8	12
4	16	24
5	32	60
6	64	120
7	128	280
8	256	560
9	512	1260
10	1024	2520

### 3.3 Desigualdades

Una de las primeras cotas para la energía de una  $(n-m)$ -gráfica  $G$  fue encontrada por McClellan en [39], donde se establece que

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2nm}.$$

**Demostración:** Dada una  $(n-m)$ -gráfica  $G$  y  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  sus valores propios. Consideramos los vectores  $(1, 1, \dots, 1)$ ,  $(|\lambda_1|, |\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$ . Por la desigualdad de Cauchy-Schwarz tenemos

$$\begin{aligned} |\langle (1, \dots, 1), (|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|) \rangle| &\leq \left( \sum_{k=1}^n 1^2 \right) \left( \sum_{k=1}^n \lambda_k^2 \right), \\ \left( \sum_{k=1}^n |\lambda_k| \right)^2 &\leq n \sum_{k=1}^n \lambda_k^2. \end{aligned}$$

Por otro lado

$$\sum_k^n \lambda_k^2 = \text{Tr}(A^2) = 2m.$$

De esta forma

$$\left( \sum_{k=0}^n |\lambda_k| \right)^2 \leq 2nm.$$

Es decir,

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{2nm}.$$

Donde la igualdad se obtiene cuando  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_n|$ .

■

Después de esto otras cotas han sido encontradas. Algunas cotas superiores se muestran en [1]. Por citar algunas comenzaremos por una cota dada por Koolen y Moulton en [33].

**Teorema 3.3.1** *Dada una gráfica  $G$  de tamaño  $n$  y  $\lambda_1$  su valor propio más grande, entonces*

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

**Demostración:** Sabemos que

$$2m = \text{Tr}(A_G^2) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2.$$

Con lo que

$$\sum_{i=2}^n \lambda_i^2 = 2m - \lambda_1^2.$$

Usando ahora la desigualdad de Cauchy-Schwartz con los vectores  $(1, 1, \dots, 1)$  y  $(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$ , tenemos

$$\sum_{i=2}^n |\lambda_i| \leq \sqrt{(n-1) \sum_{i=2}^n \lambda_i^2} = \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

Así

$$\mathcal{E}(G) \leq \lambda_1 + \sqrt{(n-1)(2m - \lambda_1^2)}.$$

■

**Teorema 3.3.2** *Dada una  $(n-m)$ -gráfica  $G$  tenemos que*

$$\mathcal{E}(G) \leq \frac{2m}{n} + \sqrt{(n-1) \left( 2m - \left( \frac{2m}{n} \right)^2 \right)}. \quad (3.4)$$

*Y que la igualdad se da cuando  $G$  es la unión de  $K_2$ 's, cuando  $G$  es la gráfica completa  $K_n$  o cuando  $G$  es una gráfica conexa no completa fuertemente regular con un de sus valores propios igual a  $\frac{2m}{n}$  y los otros dos con valor absoluto igual a  $\sqrt{(2m - (2m/n)^2)/(n-1)}$ .*

**Demostración:** Sabemos que el valor propio más grande de una gráfica es mayor o igual que su grado promedio, así

$$\lambda_1 \geq d(G) = \sum_{i=1}^n \frac{2m}{n}. \quad (3.5)$$

Usando el hecho de que la función  $F(x) = x + \sqrt{(n-1)(2m - x^2)}$  es decreciente en el intervalo  $\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq x \leq \sqrt{2m}$  y por (3.5)  $\sqrt{\frac{2m}{n}} \leq \frac{2m}{n} \leq \lambda_1$ , al considerar la desigualdad del teorema anterior  $F(\lambda_1)$  alcanza su máximo cuando  $\lambda_1 = \frac{2m}{n}$ . Obtenemos de esta manera la desigualdad buscada. Para ver ahora que gráficas hacen que se alcance la igualdad, notemos primero que  $\lambda_1 = \frac{2m}{n} = d(G)$ , por lo que  $G$  debe ser regular. Además debe lograrse la igualdad en la desigualdad de Cauchy-Swartz del teorema. Por lo tanto  $\lambda_i = \sqrt{(2m - \frac{2m}{n})/(n-1)}$  para todo  $i \geq 2$ . Esto se reduce a los siguientes casos. Primero si  $G$  tiene dos valores propios con mismo valor absoluto. Con lo que  $G$  solo pueden ser copias de  $K_2$ . Segundo, si  $G$  tiene dos valores propios con valor absoluto distintos. Con lo que  $G$  es la gráfica completa  $k_n$ . Tercero, cuando  $G$  tiene tres valores propios distintos, en tal caso  $G$  debe ser una gráfica conexa no completa fuertemente regular (Teorema 2.2.4) con valores propios que tengan valor absoluto  $\frac{2m}{n}$  o  $\sqrt{(2m - \frac{2m}{n})/(n-1)}$ . ■

**Teorema 3.3.3** Si  $G$  es una  $(n-m)$ -gráfica con por lo menos  $n_1$  valores propios nulos, entonces

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{(n-n_1)2m}. \quad (3.6)$$

**Demostración:** Sean  $\mu_1, \dots, \mu_n$  los valores propios de  $G$  con  $\mu_n, \mu_{n-1}, \mu_{n-n_1+1}$  los valores propios de  $G$  que sabemos que son cero.

Entonces,  $\sum_{i=1}^{n-n_1} \mu_i = \text{Tr}(A_G^2) = 2m$ . Usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz con los vectores  $(1, 1, \dots, 1)$  y  $(\mu_1, \dots, \mu_{n-n_1})$  obtenemos

$$\sum_{i=1}^{n-n_1} |\mu_i| \leq \sqrt{(n-n_1) \sum_{i=1}^{n-n_1} \mu_i^2} = \sqrt{(n-n_1)2m}.$$

■

**Proposición 3.3.1** En una gráfica bipartita se cumple la desigualdad

$$\mathcal{E}(G) \leq \sqrt{(n-n_1)2m}, \quad (3.7)$$

considerando  $U_1, U_2$  una partición de vértices independientes con  $U_2 > U_1$  y  $n_1 = |U_2| - |U_1|$ .

**Demostración:** Notemos que la matriz de adyacencia de  $G$  tiene la forma por bloques siguiente:

$$A_G = \begin{pmatrix} 0 & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix},$$

dónde  $B \in \mathcal{M}_{|U_1|, |U_2|}$ . Notemos además que la nulidad de  $B$  es por lo menos  $U_2 - U_1$ . Luego, ya que el bloque inferior izquierdo es un bloque de ceros, la nulidad de  $A_G$  cumple  $\text{null}(A_G) \geq \text{null}(B) \geq U_2 - U_1$ . La forma de ver esto es que el proceso para llevar a  $B$  a su forma triangular superior indica el proceso para llevar a  $A_G$  a una matriz similar con sus últimas  $\text{null}(B)$  filas nulas. Más aún, no es necesario que se trate de una gráfica bipartita, basta con que exista un conjunto de vértices  $U$  independientes con  $(n - |U|) - |U| > 0$ . ■

**Ejemplo 3.3.1 (Energía de la estrella  $S_n$ )** Como sabemos, la estrella  $S_n$  es una gráfica bipartita con conjuntos de vértices independientes de tamaño 1 y  $n-1$ , por la proposición anterior tenemos que  $n_1 = (n-1) - 1$  y así se cumple

$$\mathcal{E}(S_n) \leq \sqrt{(n-n_1)2m} = \sqrt{(n-(n-2))2m} = 2\sqrt{m}.$$

También es posible acotar la energía de una gráfica por abajo, una cota muy sencilla es la siguiente

**Teorema 3.3.4** Si  $\lambda_1$  es el valor mayor propio de una gráfica  $G$ , entonces

$$\mathcal{E}(G) \geq 2\lambda_1.$$

**Demostración:** Ya que  $\sum_{k=1}^n \lambda_k = 0$  se sigue que

$$\lambda_1 = \left| \sum_{k=2}^n \lambda_k \right| \leq \sum_{k=2}^n |\lambda_k|.$$



Con lo que

$$\mathcal{E}(G) = \lambda_1 + \sum_{k=2}^n |\lambda_k| \geq 2\lambda_1.$$

Otra cota más sofisticada es la siguiente.

**Teorema 3.3.5** *Si  $G$  es una  $(n - m)$ -gráfica y  $A$  su matriz de adyacencia, entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq \sqrt{2m + n(n - 1)|\det A|^{2/n}}.$$

**Demostración:** Tenemos que

$$\left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + \sum_{i \neq j} |\lambda_i| |\lambda_j|.$$

Acotamos ahora por abajo el segundo sumando con la desigualdad entre la media aritmética y la media geométrica. Notemos que

$$\frac{\sum_{i \neq j} |\lambda_i| |\lambda_j|}{n(n - 1)} \geq \prod_{i \neq j} (|\lambda_i| |\lambda_j|) = \prod_{i=1}^n |\lambda_i|^{2/n} = |\det(A)|^{2/n},$$

por lo tanto

$$\mathcal{E}(G)^2 \geq \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + n(n - 1)|\det A|^{2/n}.$$

Como  $\sum_{k=1}^n \lambda_k^2 = \text{Tr}(A^2) = 2m$ , sacando la raíz cuadrada de la ecuación anterior, obtenemos la desigualdad deseada. ■

### 3.4 Fórmula Integral de Coulson

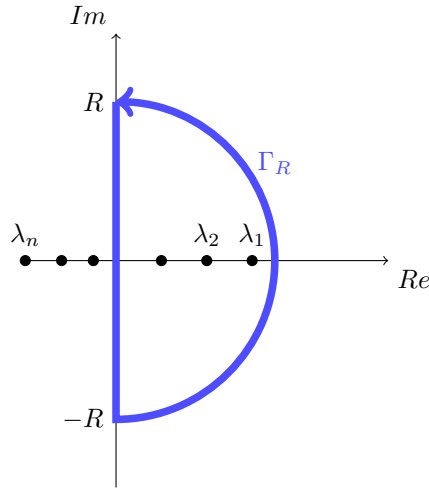
Un resultado muy útil para calcular la energía de una gráfica es la Fórmula Integral de Coulson que se presenta a continuación.

**Teorema 3.4.1 (Fórmula Integral de Coulson)** *En una gráfica  $G$  podemos calcular su energía por medio de la siguiente integral*

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ n - x \frac{d}{dx} \ln P(G, ix) \right] dx,$$

dónde  $P(G, x)$  es el polinomio característico de  $G$ .

**Demotración:** Sea a  $\Gamma_R$  La curva cerrada simple (con orientación positiva) formada por el contorno de de un semicirculo de radio  $R$  centrado en el origen cuya parte plana descansa sobre el eje imaginario. Tal como se muestra a continuación.

Figura 3.1: Contorno  $\Gamma_R$ ,  $R > \lambda_1$ .

Vamos a considerar solamente a  $R > \lambda_1$  para que de esta forma todos los valores propios positivos de  $P(G, z)$  se encuentren en el interior de  $\Gamma_R$ .

Consideraremos la integral siguiente y calcularemos de dos maneras su valor cuando  $R \rightarrow \infty$ .

$$\int_{\Gamma_R} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz. \quad (3.8)$$

Primero, ya que el polinomio característico de  $G$  se puede expresar por medio de sus raíces como

$$P(G, z) = \prod_{k=1}^n (z - \lambda_k),$$

su derivada está dada por

$$\begin{aligned} P'(G, z) &= (z - \lambda_2)(z - \lambda_3) \cdots (z - \lambda_n) + (z - \lambda_1)(z - \lambda_3) \cdots (z - \lambda_n) \\ &\quad + \cdots + (z - \lambda_1)(z - \lambda_2) \cdots (z - \lambda_{n-1}) \\ &= \sum_{k=1}^n \frac{P(G, z)}{(z - \lambda_k)}. \end{aligned}$$

Y así

$$\begin{aligned} \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} &= \sum_{k=1}^n \frac{z}{z - \lambda_k} = \sum_{k=1}^n \frac{z - \lambda_k + \lambda_k}{z - \lambda_k} \\ &= \sum_{k=1}^n \left( 1 + \frac{\lambda_k}{z - \lambda_k} \right) = n + \sum_{k=1}^n \frac{\lambda_k}{z - \lambda_k}. \end{aligned}$$

Para integrar sobre  $\Gamma_R$  hacemos uso de la fórmula integral de Cauchy, recordando que

$$\int_{\Gamma_R} \frac{1}{z - \lambda_k} dz = \begin{cases} 2\pi i & \text{si } \lambda_k \in \text{int}(\Gamma_R) \\ 0 & \text{si } \lambda_k \notin \text{int}(\Gamma_R) \end{cases}$$

De esta forma, siempre que  $R > \lambda_1$ ,

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_R} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz &= \sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k \int_{\Gamma_R} \frac{1}{z - \lambda_k} dz \\ &= \sum_{n=1}^k \lambda_k \cdot 2\pi i \cdot \mathbb{1}_{\{\lambda_k \in \text{int}\Gamma\}} \\ &= 2\pi i \sum_{k=1}^{n_+} \lambda_k = \pi i \cdot \mathcal{E}(G), \end{aligned}$$

dónde  $n_+$  es la cantidad de valores propios positivos de  $P(G, z)$ . Por lo tanto la integral no depende de  $R$  y así

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_R} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz = \pi i \cdot \mathcal{E}(G). \quad (3.9)$$

Por otro lado, si consideramos la forma expandida del polinomio característico

$$P(G, z) = \sum_k^n b_k x^{n-k},$$

tenemos que  $b_0 = 1$ . Además, como la matriz de adyacencia de  $G$  contiene solamente ceros en su diagonal,  $b_1 = \sum_{k=1}^n \lambda_k = \text{Tr}(A_G) = 0$ . De esta forma

$$\begin{aligned} \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n &= \frac{nx^n + \sum_{k=2}^n (n-k)b_k z^{n-k}}{x^n + \sum_{k=2}^n b_k z^{n-k}} - n \\ &= \frac{nx^n + \sum_{k=2}^n (n-k)b_k z^{n-k} - nx^n - n \sum_{k=2}^n b_k z^{n-k}}{x^n + \sum_{k=2}^n b_k z^{n-k}} \\ &= \frac{\sum_{k=2}^n (-k)b_k z^{n-k}}{x^n + \sum_{k=2}^n b_k z^{n-k}} \\ &= \frac{Q(z)}{P(G, z)}, \end{aligned}$$

dónde  $Q(z)$  es un polinomio de grado a lo más  $n-2$  y  $P(G, z)$  es un polinomio de grado  $n$ .

Al integrar separamos  $\Gamma_R$  en dos partes, la primera formada por la parte que está en el eje vertical y la segunda la parte restante de la curva. De esta forma

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_R} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz &= \int_{\text{vertical}} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz + \int_{\Gamma_R \setminus \text{vertical}} \frac{Q(z)}{P(G, z)} dz \\ &= \int_R^{-R} \left[ \frac{(iy)P'(G, iy)}{P(G, iy)} - n \right] idy + \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{Q(Re^{i\theta})(Re^{i\theta})}{P(G, Re^{i\theta})} d\theta. \end{aligned}$$

Notemos que  $zQ(z)$  es un polinomio de grado a lo más  $n-1$  y  $P(G, z)$  es un polinomio de grado  $n$ . Además, cuando  $R \rightarrow \infty$  también  $|Re^{i\theta}| \rightarrow \infty$ . De aquí

se sigue que la segunda integral tiende a cero cuando  $R$  tiende a infinito. Así,

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_R} \left[ \frac{zP'(G, z)}{P(G, z)} - n \right] dz &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{(iy)P'(G, iy)}{P(G, iy)} - n \right] idy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ n - \frac{(iy)P'(G, iy)}{P(G, iy)} \right] idy. \end{aligned}$$

Usando la igualdad (3.9), obtenemos

$$\pi i \cdot \mathcal{E}(G) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ n - \frac{(iy)P'(G, iy)}{P(G, iy)} \right] idy,$$

y de aquí la fórmula de Coulson

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ n - \frac{(iy)P'(G, iy)}{P(G, iy)} \right] dy = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ n - y \frac{d}{dy} \ln P(G, iy) \right] dy.$$

■

### 3.5 Árboles

En [21] se demostró que dentro de los árboles las gráficas que minimizan y maximizan la energía son la estrella  $S_n$  y el camino  $P_n$ , respectivamente, haciendo uso de la siguiente versión de la fórmula de Coulson para árboles, que a su vez sigue usando integración por partes y el Teorema 2.2.9.

**Teorema 3.5.1 (Fórmula de Coulson para árboles)** *Si  $T$  es un árbol con polinomio característico  $P(G, x) = \sum_{k \geq 0} (-1)^k b_{2k} x^{n-2k}$ ,  $b_{2k} \geq 0$ , entonces*

$$\mathcal{E}(G) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2} \ln \left[ \sum_{k \geq 0} b_{2k} x^{2k} \right] dx.$$

Es conveniente recordar que para árboles  $b_{2k}$  es el número de  $k$ -emparejamientos.

Usando la fórmula de Coulson para árboles, vemos que dados dos árboles  $T_1, T_2$  de tamaño  $n$  con polinomios característicos  $\sum_{k \geq 0} b_{2k} x^{n-2k}$  y  $\sum_{k \geq 0} b'_{2k} x^{n-2k}$  respectivamente, si

$$b_{2k} \geq b'_{2k}, \quad (3.10)$$

entonces

$$\mathcal{E}(T_1) \geq \mathcal{E}(T_2).$$

Así, podemos definir un cuasi-orden u orden parical en los árboles,  $\succeq$ , de la siguiente forma: si los coeficientes del polinomio característico cumplen (3.10) entonces decimos que

$$T_1 \succeq T_2.$$

Es decir,  $T_1 \succeq T_2$  implica que  $\mathcal{E}(T_1) \geq \mathcal{E}(T_2)$ . Cuando  $T_1 \succeq T_2$  y  $T_1 \neq T_2$  escribiremos solamente  $T_1 \succ T_2$ . Notemos que esto pasa cuando se cumple (3.10) para todo  $k$  y  $b_{2k} > b'_{2k}$  y además  $b_{2k} > b'_{2k}$  para algún  $k$

Para mostrar la minimalidad de  $S_n$  con respecto a la energía basta probar el siguiente teorema.

**Teorema 3.5.2** *Para todo árbol  $T$  de tamaño  $n$ ,  $S_n \prec T$ .*

**Demostración:** El polinomio característico de la estrella es

$$P(S_n, x) = x^n - (n-1)x^{n-2}.$$

Por lo que para la estrella  $b_0 = 1$  (al igual que para cualquier otra gráfica),  $b_2 = n-1$ , y  $b_{2k} = 0$  para los demás  $k$ . Por otra parte, para un árbol de tamaño  $n$ , por el teorema de Sachs, ya que los árboles tienen una sola componente conexa y no tienen ciclos, al contar el número de 1-emparejamientos tenemos  $b_2 = n-1$ . Además, si  $T \neq S_n$ ,  $b_4 > 0$ , pues existen dos aristas sin vértices en común. Es decir hay al menos un 2-emparejamiento. De esta forma  $S_n \prec T$ .

**Teorema 3.5.3** *Para todo árbol  $T$  de tamaño  $n$ ,  $T \prec P_n$ .*

**Demostración** Procederemos inductivamente. Para árboles con  $n = 1, 2, 3, 4$  se puede probar manualmente que  $P_n$  maximiza la energía de un árbol. Consideremos  $n > 4$  y  $T_0$  un árbol de tamaño  $n$  que maximiza la energía de gráficas. Sea  $v$  un vértice hoja y  $w$  vecino de  $v$ . Luego, usando la fórmula recursiva para el polinomio característico de bosques, Teorema 2.2.2, vemos que

$$P(T_0) = P(T_0 - v) + P(T_0 - v - w).$$

Entonces, para el  $j$ -ésimo coeficiente se tiene que

$$b_j(T_0) = b_j(T_0 - v) + b_{j-1}(T_0 - v - w).$$

Por lo tanto,  $b_j(T)$  es maximal si  $b_j(T - v)$  y  $b_{j-1}(T - v - w)$  son maximales. De esta forma  $T - v = P_{n-1}$  y  $T - v - w = P_{n-2}$ . Lo que implica que  $T_0 = P_n$ .



## Capítulo 4

# Índice de Randić

### 4.1 Índice de Randić

El índice de Randić de una gráfica, también conocido como índice de conectividad, está definido por la suma del producto de los grados ponderado por el exponente  $-\frac{1}{2}$  de los vértices vecinos, de la siguiente forma:

$$R(G) = \sum_{i \sim j} (d_i d_j)^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.1)$$

También es conocido como índice de Randić el índice resultante al usar el exponente  $-1$

$$\sum_{i \sim j} (d_i d_j)^{-1}. \quad (4.2)$$

Ambos índices fueron introducidos por Milan Randić. En lo que nos concierne llamaremos índice clásico de Randić al índice en el que el exponente es  $-\frac{1}{2}$ .

Como podemos ver, el hecho de cambiar el exponente que pondera el producto de los grados se obtiene otro índice topológico. El índice formado al tomar como exponente a cualquier número real  $\alpha$ , se le conoce como índice general de Randić.

$$R_\alpha = \sum_{i \sim j} (d_i d_j)^\alpha. \quad (4.3)$$

En el caso particular en el que  $\alpha = 0$ ,  $R_0(G)$  cuenta la cantidad de aristas de la gráfica  $G$ .

$$R_0(G) = \sum_{i \sim j} (d_i d_j)^0 = \sum_{i \sim j} 1 = |E(G)|.$$

Como mencionan en [35] en su introducción, El índice de Randić fue desarrollado por el químico Milan Randić en 1975 [43]. Él propuso al índice topológico  $R$  ( $R_{-1}$  y  $R_{\frac{1}{2}}$ ) nombrándolo “índice de ramificación” para medir el grado de ramificación del esqueleto de átomos de los hidrocarburos saturados.

Fue en 1998 que Bollobás y Erdos [7] generalizaron este índice al sustituir a  $-\frac{1}{2}$  por cualquier número real. Por otra parte, en [17] una modificación al índice de Randić fue propuesta, donde definen

$$R'(G) = \sum_{i \sim j} \frac{1}{\max(d_i, d_j)},$$

que es más fácil de tratar computacionalmente. Más tarde varias aplicaciones nuevas del índice de Randić fueron reportadas, muchas de ellas relacionadas con asuntos medicinales y farmacológicos.

## 4.2 Índice de Randić y relación química

En [43] Milan Randić introdujo su índice, que en su momento llamó índice de ramificación. Para su construcción comenzó por ordenar a los miembros de una serie homóloga de forma que siga la forma intuitiva del grado de ramificación. Para esta caracterización Randić comenzó numerando los átomos de las moléculas de tal forma que la matriz de adyacencia de la gráfica asociada formara el menor número binario al colocar sus filas de forma consecutiva. Por ejemplo: Para el 2,2-Dimetilbutano la numeración de sus átomos sería como en la tabla 4.1 y su número asociado

$$B = 2^{30} + 2^{24} + 2^{18} + 2^{13} + 2^8 + 2^6 + 2^5 + 2^4 + 2^1.$$

Podemos separar este número según la aportación que hace cada fila de la matriz, esto no es más que representar dicho número en base  $2^n$ , donde  $n$  es el número de vértices. Ilustrativamente, seguimos con el ejemplo anterior:

$$\begin{aligned} B &= \underbrace{2^{30}}_{\text{fila 1}} + \underbrace{2^{24}}_{\text{fila 2}} + \underbrace{2^{18}}_{\text{fila 3}} + \underbrace{2^{13}}_{\text{fila 4}} + \underbrace{2^8 + 2^6}_{\text{fila 5}} + \underbrace{2^5 + 2^4 + 2^1}_{\text{fila 6}} \\ &= \underbrace{(2^0)2^{6 \cdot 5}}_{\text{fila 1}} + \underbrace{(2^0)2^{6 \cdot 4}}_{\text{fila 2}} + \underbrace{(2^0)2^{6 \cdot 3}}_{\text{fila 3}} + \underbrace{(2^1)2^{6 \cdot 2}}_{\text{fila 4}} + \underbrace{(2^2 + 2^0)2^{6 \cdot 1}}_{\text{fila 5}} + \underbrace{(2^5 + 2^4 + 2^1)2^0}_{\text{fila 6}} \\ &= \underbrace{(1)2^{6 \cdot 5}}_{\text{fila 1}} + \underbrace{(1)2^{6 \cdot 4}}_{\text{fila 2}} + \underbrace{(1)2^{6 \cdot 3}}_{\text{fila 3}} + \underbrace{(2)2^{6 \cdot 2}}_{\text{fila 4}} + \underbrace{(4)2^{6 \cdot 1}}_{\text{fila 5}} + \underbrace{(58)2^{6 \cdot 0}}_{\text{fila 6}} \end{aligned}$$

Así, para comparar los compuestos con un número fijo de átomos es suficiente considerar la tupla que tienen a los números en binario que forma cada fila. Este ordenamiento muestra lo que de forma intuitiva puede verse como el grado de ramificación de una molécula. Para los isómeros del hexano se muestran ya ordenados en la siguiente tabla (datos tomados de [43]). El 2,2-dimetilhexano y el n-hexano son los elementos que se esperaría fueran el más y el menos ramificado y efectivamente se encuentran en extremos opuestos bajo este ordenamiento.



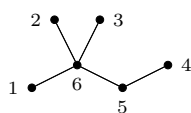
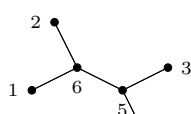
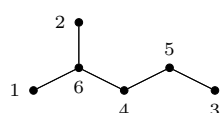
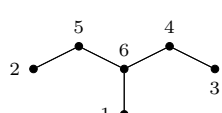
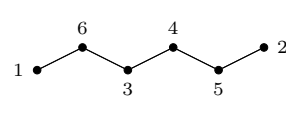
Numeración de átomos	Matriz asociada	Tupla asociada
 <p>2,2-Dimetilbutano</p>	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,1,2,5,58)
 <p>2,3-Dimetilbutano</p>	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,2,2,13,50)
 <p>2-Metilpentano</p>	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,2,3,11,52)
 <p>3-Metilpentano</p>	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,2,4,9,17,38)
 <p>n-Hexano</p>	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	(1,2,5,10,20,40)

Tabla 4.1: Isómeros del Hexano ordenados según su grado de ramificación

Para los isómeros del butano y pentano el orden que se obtiene numerando lo vértices se muestra a continuación en las siguientes tablas.

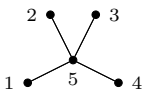
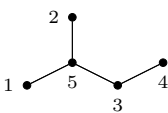
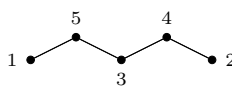
Numeración de átomos	Matriz asociada	Tupla asociada
 2,2-Dimetilpropano	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,1,1,1,30)
 2-Metilbutano	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,3,4,28)
 n-pentano	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	(1,2,5,10,20)

Tabla 4.2: Isómeros del Pentano ordenados según su grado de ramificación

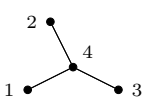
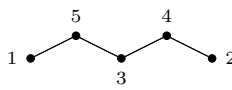
Numeración de átomos	Matriz asociada	Tupla asociada
 metilpropano	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,1,1,1,30)
 n-pentano	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	(1,2,5,10)

Tabla 4.3: Isómeros del Butano ordenados según su grado de ramificación

Randić propuso clasificar cada arista según el grado de sus vértices incidentes y asignarles un peso para luego sumar los pesos de las arista de cada

molécula. Para asignar estos pesos Randić se basó en el orden que obtenido entre los isómeros del butano, pentano y hexano por medio del método descrito anteriormente. Sea  $p(n, m)$  es el peso de las aristas con vértices incidentes de grado  $n$  y  $m$ . Las desigualdades a cumplirse para el butano son:

$$3p(1, 3) < 2p(1, 2) + (2, 2).$$

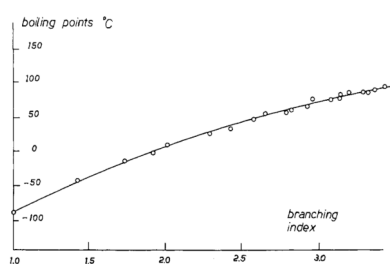
Para el pentano:

$$4p(1, 4) < 2p(1, 3) + p(2, 3) + p(1, 2) < 2p(1, 2) + 2p(2, 2).$$

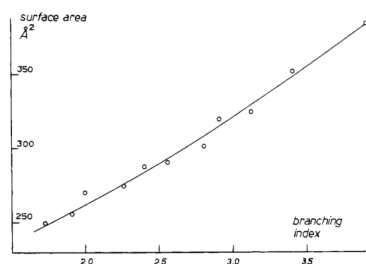
Y para el hexano:

$$3p(1, 4) + p(1, 2) + p(2, 4) < 4p(1, 3) + p(3, 3) < 2p(1, 3) + p(2, 3)p(2, 2) + p(1, 3) \\ < 2p(1, 2) + p(1, 3) + 2p(2, 3) < +3p(1, 4) + p(1, 2) + p(2, 4).$$

Entre las distintas formas de asignar los pesos a las aristas Randić notó que tomando  $p(n, m) = \frac{1}{nm}$  y  $p(n, m) = \frac{1}{\sqrt{nm}}$  satisfacen las desigualdades anteriores, sin embargo la segunda opción  $p(n, m) = (nm)^{-1/2}$  fue preferida ya que evitaba el transape entre alcanos con distinta cantidad de átomos. Pronto Randić notó que había una buena correlación entre el índice de Randić y varias propiedades físicas y químicas. Por ejemplo, los puntos de ebullición de los alcanos y la superficie total de los hidrocarburos acíclicos saturados. Estos fueron comparados en el artículo original [43] como se puede en la Figura 4.1.



(a) Puntos de ebullición de los isómeros de alcanos con dos a siete átomos de carbonos contra el índice de Randić



(b) Correlación entre la superficie total en hidrocarburos acíclicos saturados seleccionados y el índice de Randić

Figura 4.1: Comparación entre el Índice de Randić con el punto de ebullición (izquierda) y con el área superficial. Las imágenes fueron tomadas de [43]

Una forma de entender la relación entre el punto de ebullición de los alcanos con una cantidad fija de átomos y el índice de Randić se muestra en el siguiente esquema.

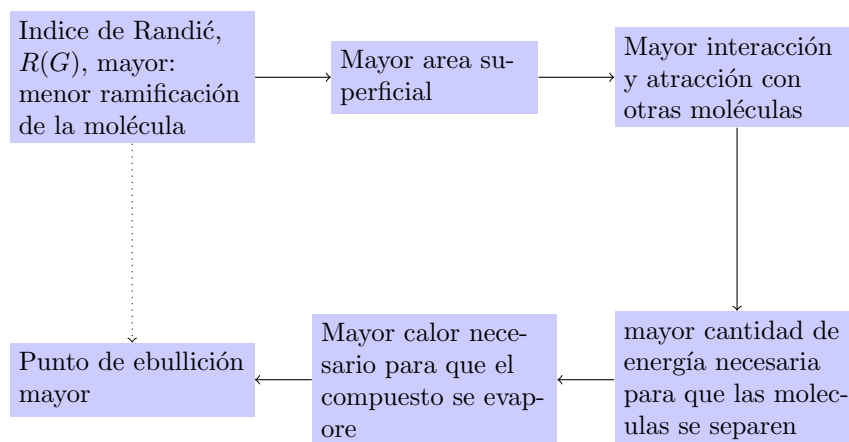


Figura 4.2: índice de Randić y su relación con el punto de Ebullición

### 4.3 Ejemplos

Para familiarizarnos con el índice de Randić comenzaremos calculando este índice para varias familias de gráficas.

**Ejemplo 4.3.1 (Camino  $P_n$ )** Para  $n \geq 2$  tenemos que  $P_n$  tiene  $n - 2$  aristas interiores (que no unen a vértices hoja) ya que todos los vértices de estas aristas tienen grado 2, cada una de estas aristas aporta  $2^\alpha \cdot 2^\alpha = 4^\alpha$ . Luego, las dos aristas restantes (las que unen a los dos vértices hoja) aportan cada una  $1^\alpha 2^\alpha$ . Sumando sobre todas las aristas tenemos el índice de Randić de  $S_n$ .

$$R_\alpha(P_n) = (n - 2)4^\alpha + 2^{\alpha+1} = (n - 2)4^\alpha + 2^{\alpha+1}.$$

**Ejemplo 4.3.2 (Estrella  $S_n$ )** Sea  $n \geq 2$ . Como toda arista de  $S_n$  une a dos vértices, uno de grado 1 y otro de grado  $n - 1$ , cada arista aporta  $1^\alpha \cdot (n - 1)^\alpha$  al índice de Randić. Sumando sobre las  $n - 1$  aristas de  $S_n$  tenemos que

$$R_\alpha(S_n) = (n - 1)(n - 1)^\alpha = (n - 1)^{\alpha+1}.$$

En el caso del camino y la estrella podemos ver que para  $\alpha > 1$  cuando  $n \gg 0$ ,  $R_\alpha(P_n) \sim n4^\alpha$  y  $R_\alpha(S_n) \sim n^\alpha$ . De hecho más tarde se verá que con cierta condición sobre  $n$  para valores de  $\alpha < 0$  la estrella  $S_n$  minimiza el índice de Randić y para  $\alpha > 0$  el camino  $P_n$  es el que lo minimiza.

En particular en gráficas regulares, calcular el índice de Randić se puede hacer de una forma simple conociendo el número de aristas, como se ve en el lema a continuación.

**Lema 4.3.1** Si  $G$  es una gráfica  $k$ -regular con  $m$  aristas entonces el índice de Randić de  $G$  está dado por

$$R_\alpha(G) = mk^{2\alpha}.$$

**Demostración del lema:** Se sigue de notar que cada arista de  $G$  aporta  $k^\alpha \cdot k^\alpha = k^{2\alpha}$  por cada arista y luego sumar sobre las  $m$  aristas.

**Ejemplo 4.3.3 (Gráfica completa  $K_n$ )** Como  $K_n$  es una gráfica  $(n - 1)$ -regular con  $\frac{n(n-1)}{2}$  aristas, del lema anterior tenemos que

$$R_\alpha(K_n) = \frac{n(n-1)}{2}(n-1)^{2\alpha} = \frac{n(n-1)^{2\alpha+1}}{2}.$$

**Ejemplo 4.3.4 (Ciclo  $C_n$ )** Usando nuevamente el lema anterior como  $C_n$  es 2-regular con  $n$  aristas, tenemos que

$$R_\alpha(C_n)_\alpha = n(2^{2\alpha}) = n4^\alpha.$$

**Ejemplo 4.3.5 (Hipercono  $H_n$ )** Ya que  $H_n = P_2^n$ ,  $H_n$  es una gráfica  $n$ -regular que tiene  $n2^{n-1}$  aristas, del lema anterior tenemos el índice de Randić para el hipercono

$$R_\alpha(H_n) = n2^{n-1}n^{2\alpha} = 2^{n-1}n^{2\alpha+1}.$$

A continuación mostramos el índice de Randić de los ejemplos anteriores para distintos valores de  $\alpha$ .

Índice de Randić $R_\alpha$ , $\alpha = -2$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	0.188	0.500	0.188	0.625
4	0.074	0.333	0.250	0.688
5	0.039	0.250	0.312	0.750
6	0.024	0.200	0.375	0.812
7	0.016	0.167	0.438	0.875
8	0.012	0.143	0.500	0.938
9	0.009	0.125	0.562	1.000
10	0.007	0.111	0.625	1.062
11	0.005	0.100	0.688	1.125
12	0.005	0.091	0.750	1.188
13	0.004	0.083	0.812	1.250
14	0.003	0.077	0.875	1.312
15	0.003	0.071	0.938	1.375
16	0.002	0.067	1.000	1.438
17	0.002	0.062	1.062	1.500
18	0.002	0.059	1.125	1.562
19	0.002	0.056	1.188	1.625

Tabla 4.4:  $R_\alpha(K_n), R_\alpha(S_n), R_\alpha(C_n), R_\alpha(P_n)$ :  $\alpha = -2$

Índice de Randić $R_\alpha, \alpha = -0.8$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	0.990	1.149	0.990	1.808
4	1.035	1.246	1.320	2.138
5	1.088	1.320	1.649	2.468
6	1.142	1.380	1.979	2.798
7	1.194	1.431	2.309	3.128
8	1.245	1.476	2.639	3.458
9	1.292	1.516	2.969	3.788
10	1.338	1.552	3.299	4.118
11	1.382	1.585	3.629	4.447
12	1.423	1.615	3.959	4.777
13	1.464	1.644	4.288	5.107
14	1.502	1.670	4.618	5.437
15	1.540	1.695	4.948	5.767
16	1.576	1.719	5.278	6.097
17	1.610	1.741	5.608	6.427
18	1.644	1.762	5.938	6.757
19	1.677	1.783	6.268	7.086

Índice de Randić $R_\alpha, \alpha = -\frac{1}{2}$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	1.500	1.414	1.500	2.414
4	2.000	1.732	2.000	2.914
5	2.500	2.000	2.500	3.414
6	3.000	2.236	3.000	3.914
7	3.500	2.449	3.500	4.414
8	4.000	2.646	4.000	4.914
9	4.500	2.828	4.500	5.414
10	5.000	3.000	5.000	5.914
11	5.500	3.162	5.500	6.414
12	6.000	3.317	6.000	6.914
13	6.500	3.464	6.500	7.414
14	7.000	3.606	7.000	7.914
15	7.500	3.742	7.500	8.414
16	8.000	3.873	8.000	8.914
17	8.500	4.000	8.500	9.414
18	9.000	4.123	9.000	9.914
19	9.500	4.243	9.500	10.414

Índice de Randić $R_\alpha, \alpha = \frac{1}{2}$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	6.000	2.828	6.000	6.828
4	18.000	5.196	8.000	8.828
5	40.000	8.000	10.000	10.828
6	75.000	11.180	12.000	12.828
7	126.000	14.697	14.000	14.828
8	196.000	18.520	16.000	16.828
9	288.000	22.627	18.000	18.828
10	405.000	27.000	20.000	20.828
11	550.000	31.623	22.000	22.828
12	726.000	36.483	24.000	24.828
13	936.000	41.569	26.000	26.828
14	1183.000	46.872	28.000	28.828
15	1470.000	52.383	30.000	30.828
16	1800.000	58.095	32.000	32.828
17	2176.000	64.000	34.000	34.828
18	2601.000	70.093	36.000	36.828
19	3078.000	76.368	38.000	38.828

Índice de Randić $R_\alpha, \alpha = 0.8$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	9.094	3.482	9.094	9.545
4	34.797	7.225	12.126	12.577
5	91.896	12.126	15.157	15.608
6	196.990	18.119	18.189	18.639
7	369.200	25.158	21.220	21.671
8	629.963	33.203	24.251	24.702
9	1002.874	42.224	27.283	27.734
10	1513.563	52.196	30.314	30.765
11	2189.589	63.096	33.346	33.797
12	3060.358	74.904	36.377	36.828
13	4157.044	87.604	39.409	39.859
14	5512.527	101.181	42.440	42.891
15	7161.338	115.619	45.471	45.922
16	9139.602	130.907	48.503	48.954
17	11484.997	147.033	51.534	51.985
18	14236.712	163.986	54.566	55.017
19	17435.408	181.757	57.597	58.048

Índice de Randić $R_\alpha$ , $\alpha = 2$				
No. vértices	$K_n$	$S_n$	$C_n$	$P_n$
3	48	8	48	40
4	486	27	64	56
5	2560	64	80	72
6	9375	125	96	88
7	27216	216	112	104
8	67228	343	128	120
9	147456	512	144	136
10	295245	729	160	152
11	550000	1000	176	168
12	966306	1331	192	184
13	1617408	1728	208	200
14	2599051	2197	224	216
15	4033680	2744	240	232
16	6075000	3375	256	248
17	8912896	4096	272	264
18	12778713	4913	288	280
19	17950896	5832	304	296

Las tablas siguientes muestran el Índice de Randić en el caso del hipercubo para varios valores de  $\alpha$ .

Índice de Randić del hipercubo $R_\alpha(H_n)$							
		valores de $\alpha$					
$n$	No. vértices	-2	-0.8	-0.5	0.5	0.8	2
1	2	1.000	1.000	1	1	1.000	1
2	4	0.250	1.320	2	8	12.126	64
3	8	0.148	2.069	4	36	69.595	972
4	16	0.125	3.482	8	128	294.067	8192
5	32	0.128	6.092	16	400	1050.611	50000
6	64	0.148	10.921	32	1152	3375.540	248832
7	128	0.187	19.912	64	3136	10079.405	1075648
8	256	0.250	36.758	128	8192	28526.201	4194304
9	512	0.351	68.501	256	20736	77494.430	15116544
10	1024	0.512	128.609	512	51200	203830.871	51200000

## 4.4 Desigualdades

**Teorema 4.4.1** Para  $G$ , una  $n$ -gráfica, el índice general de Randić está acotado superiormente por

$$R(G) \leq \frac{n}{2}.$$

**Demostración:** Si  $d_i$  es el grado del  $i$ -ésimo vértice de  $G$ . Para  $d_i, d_j \neq 0$ , usando la desigualdad entre la media aritmética y la media geométrica con  $d_i^{-1}$



y  $d_j^{-1}$ , tenemos que

$$\sqrt{d_i^{-1}d_j^{-1}} \leq \frac{d_i^{-1} + d_j^{-1}}{2}.$$

Sumando sobre los pares de vértices que forman una arista de  $G$  obtenemos

$$\begin{aligned} R(G) &= \sum_{i \sim j} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \leq \frac{1}{2} \left( \sum_{i \sim j} d_i^{-1} + d_j^{-1} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \sum_{i \sim j} d_i^{-1} + \sum_{i \sim j} d_j^{-1} \right) = \sum_{i \sim j} d_i^{-1}. \end{aligned}$$

Notemos que al fijar uno de los vértices en la suma anterior, digamos  $i$ , y sumar sobre sus vecinos tenemos

$$\sum_{i \sim j} d_i^{-1} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ d_i > 0}} \sum_{j \sim i} d_i^{-1} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ d_i > 0}} 1 \leq \frac{1}{2} \sum_i^n 1 = \frac{n}{2}.$$

■

A continuación mostramos una conjetura conocida para el índice de Randić la cual se ha verificado que es correcta para árboles (por medio del Teorema 4.4.2) y otros tipos de gráficas como graficas tricíclicas biregulares y gráficas conexas de orden menor a 10.

**Conjetura 4.4.1** *Para cualquier gráfica conexas  $G$*

$$R(G) \geq r(G) - 1, \quad (4.4)$$

donde  $r(G)$  es el radio de la gráfica.

El siguiente teorema, demostrado en [9], involucra el radio de la gráfica y verifica la conjetura anterior para el caso de árboles

**Teorema 4.4.2** *Dado un árbol  $T$  y  $r(T)$  su radio, entonces se cumple*

$$R(T) > r(T) + \sqrt{2} - \frac{3}{2}$$

**Demostración:** Sea  $P = P_s$  el camino más largo en  $T$ , con  $s \geq 3$  (si  $s < 3$  Se sigue fácilmente que  $R(T) \geq r(T) + \sqrt{2} - \frac{3}{2}$ ). Ya que  $r(T) \geq \frac{s}{2}$ , se sigue que

$$R(P) = (s-3) \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2}} + 2 \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{s}{2} - \frac{3}{2} + \sqrt{2} \geq r(t) + \sqrt{2} - \frac{3}{2}.$$

Veamos ahora que al agregar una hoja a un árbol aumenta su índice de Randić. Sea  $\mathcal{T}$  un árbol,  $w$  uno de sus vértices con  $d(w) = d$  y  $d_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, d$ , el grado de los vecinos de  $w$ . Consideremos a  $\mathcal{T}'$  el árbol obtenido al agregar una

hoja  $v$  a  $\mathcal{T}$  de tal forma que sea vecino de  $w$ . Luego,

$$\begin{aligned} R(\mathcal{T}') - \mathcal{R}(\mathcal{T}) &= \frac{1}{\sqrt{d}} + \sum_{i=0}^d \left[ \frac{1}{\sqrt{d_i}\sqrt{d+1}} - \frac{1}{\sqrt{d_i}\sqrt{d}} \right] \\ &= \sum_{i=1}^d \left[ \frac{1}{d\sqrt{d}} + \frac{1}{\sqrt{d_i}\sqrt{d+1}} - \frac{1}{\sqrt{d_i}\sqrt{d}} \right] \\ &= \sum_{i=1}^d \frac{1}{\sqrt{d_i}} \left( \frac{\sqrt{d_i}}{d\sqrt{d}} + \frac{1}{\sqrt{d+1}} - \frac{1}{\sqrt{d}} \right) \\ &= \sum_{i=1}^d \frac{1}{\sqrt{d_i}} \left( \frac{\sqrt{d_i}\sqrt{d+1} + d\sqrt{d} - d\sqrt{d+1}}{d\sqrt{d}\sqrt{d+1}} \right). \end{aligned}$$

Considerando que

$$\begin{aligned} \sqrt{d_i}\sqrt{d+1} + d\sqrt{d} - d\sqrt{d+1} &\geq \sqrt{d_i}\sqrt{d} + d\sqrt{d} - d\sqrt{d+1} \\ &= \sqrt{d}(\sqrt{d_i} + d - \sqrt{d(d+1)}) \\ &\geq \sqrt{d}(d+1 - \sqrt{d(d+1)}) \\ &> 0. \end{aligned}$$

Entonces

$$R(\mathcal{T}') - R(\mathcal{T}) > 0.$$

Añadiendo de forma consecutiva hojas a  $P$  podemos ir aumentando el índice de Randić hasta obtener el árbol original  $T$ . De esta forma

$$R(T) \geq R(P) \geq r(T) + \sqrt{2} - \frac{3}{2}.$$

■

**Teorema 4.4.3** Consideremos una gráfica  $G$  con  $m = \binom{k}{2} + r$  aristas.  $0 < r \leq k$  y con mínimo grado  $\delta \geq 1$ . Entonces  $G$  cumple

$$R_1(G) \leq R(m) := R_1(G_m),$$

donde  $G_m$  es la gráfica compuesta por una gráfica completa  $K_k$  de la cual  $r$  vértices son unidos por una arista cada uno a otro vértice externo. Y

$$R_1(G_m) = \binom{r}{2k^2} + \binom{k-r}{2} (k-1)^2 + rk(k-r)(k-1) + r^2k.$$

Otra cota interesante para el índice de Randić que refuerza la conjetura 4.4.1 es la siguiente

**Teorema 4.4.4** Sea  $G$  una gráfica conexa, entonces

$$R(G) \geq \frac{d(G)}{2},$$

donde  $d(G)$  es el diámetro de la gráfica.

Dentro de la demostración de este teorema [17], es interesante el uso del índice de Randić modificado

$$R'(G) = \sum_{i \sim j} \frac{1}{d_i d_j}.$$

Pues de esta manera

$$R(G) \geq R'(G),$$

con lo que es suficiente la demostración de que

$$R'(G) \geq \frac{d(G)}{2}$$

A la vez que este cambio facilita algunos cálculos.

También se han encontrado varias cotas para el índice general de Randić, una de ellas que hace uso de la desigualdad de Hölder y el Teorema 4.4.3 es mostrada a continuación [8]

**Teorema 4.4.5** *Sea  $G$  una gráfica con  $m$  aristas sin vértices aislados. y  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Entonces*

$$R_\alpha(G) \leq m^{1-\alpha} R(m)^\alpha,$$

donde  $R(m)$  es como en el Teorema 4.4.3. Para  $\alpha \neq 0$ , con igualdad cuando  $G$  es la gráfica completa.

**Demostración:** Usando la desigualdad de Hölder con  $p = \frac{1}{\alpha}$  y  $q = \frac{1}{1-\alpha}$ . Tenemos

$$\begin{aligned} R_\alpha(G) &= \sum_{u \sim v} (1^{1-\alpha})(d_u d_v)^\alpha \\ &\leq \left( \sum_{u \sim v} 1 \right)^{\frac{1}{q}} \left( \sum_{u \sim v} (d_u d_v)^{\alpha p} \right)^{\frac{1}{p}} \\ &= m^{\frac{1}{q}} \left( \sum_{u \sim v} d_u d_v \right) \left( \sum_{u \sim v} d_u d_v \right)^{\frac{1}{p}} \\ &= m^{1-\alpha} R(G_m)^\alpha. \end{aligned}$$

Donde usamos que  $\frac{1}{p} = \alpha$  y  $\frac{1}{q} = 1 - \alpha$ . Aplicando el Teorema 4.4.5 tenemos que

$$R_\alpha(G) \leq m^{1-\alpha} R(m)^\alpha,$$

donde la igualdad se tiene si  $G$  es isomorfa a  $G_m$  y todos los vértices tienen el mismo grado. Así que  $m = \binom{n}{k}$  y  $G = K_k$ . ■

**Teorema 4.4.6** *Sea  $G$  una gráfica con  $m$  aristas sin vértices aislados. y  $\alpha \leq 0$ . Entonces*

$$R_\alpha(G) \geq m^{1-\alpha} R(m)^\alpha,$$

con igualdad cuando  $G$  es la gráfica completa.

**Demostración:** Consideremos a

$$A_j = [1 - 2^{j+1}, 1 - 2^j).$$

Con lo que  $(-\infty, 0) = \cup_{j \geq 0} A_j$ . Procedemos por inducción sobre  $j$ . Para el caso base, cuando  $\alpha \in A_0$ , usamos la desigualdad de Cauchy con los vectores de entradas  $(d_x d_y)^\alpha$  y  $(d_x d_y)^{-\alpha}$  para  $x \sim y$ .

$$\begin{aligned} R_\alpha(G)R_{-\alpha} &= \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^\alpha \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{-\alpha} \\ &\geq \left( \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{\alpha/2} (d_x d_y)^{-\alpha/2} \right) \\ &= \left( \sum_{x \sim y} 1 \right) = m^2. \end{aligned}$$

Luego, por el Teorema(4.4.4)

$$\begin{aligned} m^{1-(\alpha)} R(m)^{-\alpha} &\geq R_{-\alpha}(G) \\ \frac{1}{R_{-\alpha}(G)} &\geq m^{-(1+\alpha)} R(m)^\alpha. \end{aligned}$$

Despejando  $R_\alpha$  de la expresión de arriba y sustituyendo  $\frac{1}{R_{-\alpha}(G)}$  obtenemos

$$R_\alpha(G) \geq m^2 \frac{1}{R_{-\alpha}(G)} \geq m^{1-\alpha} R(m)^\alpha.$$

Con igualdad si y sólo si  $G$  es la gráfica completa. Ahora, como hipótesis de inducción supogamos que  $R_\alpha(G) \geq m^{1-\alpha} R(m)^\alpha$  para  $\alpha \in A_j$  cumpliéndose la igualdad si y sólo si  $G$  es la gráfica completa. Tomemos  $\alpha \in A_{j+1}$  Usando la desigualdad de Cauchy con los vectores con entradas  $(d_x d_y)^{-\alpha}$  y  $(d_x d_y)$  cuando  $x \sim y$  tenemos que

$$\begin{aligned} R_\alpha(G)R_1(G) &= \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{-\alpha} \sum_{x \sim y} d_x d_y \\ &\geq \left( \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{\alpha/2} (d_x d_y)^{1/2} \right)^2 \\ &= \left( \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{(\alpha+1)/2} \right)^2 = R_{(\alpha+1)/2}(G)^2. \end{aligned}$$

Además,

$$\begin{aligned} 1 - 2^{j+2} &\leq \alpha < 1 - 2^{j+1} \\ &\iff \\ 2 - 2^{j+2} &< \alpha + 1 \leq 2 - 2^{j+1} \\ &\iff \\ 1 - 2^{j+1} &< \frac{\alpha + 1}{2} \leq 1 - 2^j. \end{aligned}$$

Con lo que  $\alpha \in A_{j+1}$  si y sólo si  $\frac{\alpha+1}{2} \in A_j$ . Esto junto con la hipótesis de inducción implica que

$$R_\alpha(G)R_1(G) \geq R_{\left(\frac{\alpha+1}{2}\right)}(G^2) \geq m^{1-\alpha}R(m)^{1+\alpha}.$$

De esta forma

$$R_\alpha(G) \geq m^{1-\alpha}R(m)^\alpha \frac{R(m)}{R_1(G)} \geq m^{1-\alpha}R(m)^\alpha,$$

con igualdad cuando  $G$  es la gráfica completa. Por inducción, se sigue el resultado para toda  $\alpha \in [0, \infty)$  ■ El siguiente resultado muestra la relación entre el índice de Randić y la energía de una gráfica. La demostración se da en el capítulo 7.2 donde se describen las medidas de centralidad.

tulo

**Teorema 4.4.7** *Sea  $G$  una gráfica, entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq 2R(G),$$

donde  $R(G)$ , es el índice de Randić de  $G$ .

## 4.5 Índice de Randić en árboles

En esta sección se muestran los árboles que hacen que el índice de Randić alcance su valor máximo y mínimo al fijar la cantidad de vértices.

### 4.5.1 Árboles con mínimo índice de Randić

Hu, Li y Yuan [28] encontraron los árboles con mínimo índice general de Randić. Demostraron que entre los árboles con  $n$  vértices, la estrella,  $S_n$ , es la que minimiza a  $R_\alpha$  cuando  $\alpha < 0$ . Y el camino  $P_n$  minimiza a  $R_\alpha$  cuando  $\alpha > 0$  y  $n \geq 5$ . En [28] se dividen varios casos para llegar a dicho resultado. Aquí se muestran ilustrativamente.

**Teorema 4.5.1** *El camino  $P_n$  minimiza a  $R_\alpha$  cuando  $\alpha > 0$  y  $n \geq 5$ .*

**Demostración:** Procederemos por contradicción. Sea  $T$  un árbol que minimiza a  $R_\alpha$  con  $T \neq P_n$ . Consideremos a  $P = v_1v_2\dots v_k$  el camino más largo contenido en  $T$ , ya que  $T$  no es un camino, existe un vértice  $v_i$ ,  $i \in \{2, \dots, k-1\}$  con  $d(v_i) > 2$ . Consideraremos dos casos, a) cuando  $i = 2$  o  $i = k-1$  y b) cuando  $i \in \{3, \dots, k-2\}$ .

**Caso a)**  $i = 2$  o  $i = k-1$ : Sin pérdida de generalidad supongamos  $i = k-1$ . Si  $d(v_{k-2}) = 1$  entonces  $T$  es la estrella  $S_n$ . Luego

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) &= R_\alpha(S_n) = (n-1)(1 \cdot (n-1))^\alpha \\ &= (n-1)^{\alpha+1} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} R_\alpha(P_n) &= 2(1 \cdot 2)^\alpha + (n-3)(2 \cdot 2)^\alpha \\ &= 2^{\alpha+1} + (n-3)4^\alpha. \end{aligned}$$

Comparando el índice de Randić de ambas gráficas, ya que  $n \geq 5$ , tenemos que

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(P_n) &= R_\alpha(S_n) - R_\alpha(P_n) \\ &= (n-1)^{\alpha+1} - 2^{\alpha+1} - (n-3)4^\alpha \\ &= (n-3)((n-1)^\alpha - 4^\alpha) + 2((n-1)^\alpha - 2^\alpha) \\ &> 0. \end{aligned}$$

Esto contradice que  $T$  minimice a  $R_\alpha$ . Por lo que  $d(v_{k-2}) \geq 2$ . Sea  $d = d(v_{k-1})$  y  $v_{k-2}, v_k, u_1, u_2, \dots, u_{d-2}$  los vecinos de  $v_{k-1}$ . Consideremos  $T'$ , el árbol obtenido de convertir a los vecinos  $u_1, u_2, \dots, u_{d-2}$  de  $v_{k-1}$  en vecinos de  $v_k$ . Es decir, borrar las aristas  $v_{k-1}u_j$  y agregar las arista  $v_k u_j$ , para todo  $j \in \{1, 2, \dots, d-2\}$ .

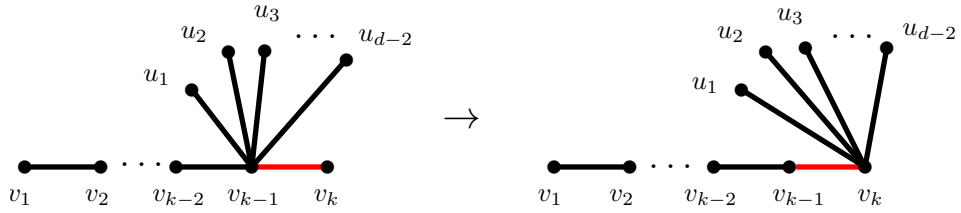


Figura 4.3:  $T'$  obtenida a partir de  $T$  cambiando los vecinos de  $v_i$ , caso  $i = k-1$ .

Observemos que,

$$R_\alpha(T) > R_\alpha(T') \iff R_\alpha(T) - R_\alpha(T') > 0. \quad (4.5)$$

Notemos que  $T$  y  $T'$  difieren solamente en el aporte que hacen las aristas que tienen como extremos a los vértices  $v_{k-2}, v_{k-1}, v_k$  y  $u_i$ , con  $j \in \{3, \dots, d-2\}$ . Por lo tanto

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= (d(v_{k-2})d)^\alpha + (d \cdot 1)^\alpha + (d-2)(d \cdot 1)^\alpha \\ &\quad - [(d(v_{k-2})2)^\alpha + (2 \cdot (d-1))^\alpha + (d-2)(1 \cdot (d-1))^\alpha] \\ &= d(v_{k-2})^\alpha(d^\alpha - 2^\alpha) + d^\alpha - 2^\alpha(d-1)^\alpha + (d-2)d^\alpha - (d-2)(d-1)^\alpha \\ &= d(v_{k-2})^\alpha(d^\alpha - 2^\alpha) + (d-1)d^\alpha - 2^\alpha(d-1)^\alpha - (d-2)(d-1)^\alpha. \end{aligned}$$

Ya que  $d(v_{k-2}) \geq 2$ , tenemos que

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &\geq 2^\alpha(d^\alpha - 2^\alpha) + (d-1)d^\alpha - 2^\alpha(d-1)^\alpha - (d-2)(d-1)^\alpha \\ &> 2^\alpha(d^\alpha - 2^\alpha) + (d-1)d^\alpha - 2^\alpha(d-1)^\alpha - (d-2)d^\alpha \\ &= 2^\alpha(d^\alpha - (d-1)^\alpha) + d^\alpha - 4^\alpha. \end{aligned}$$

Si  $d \geq 4$  entonces  $d^\alpha - 4^\alpha \geq 0$  y por lo tanto

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') > 0. \quad (4.6)$$

En otro caso  $d = 3$  y así,

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &> 2^\alpha(d^\alpha - (d-1)^\alpha) + d^\alpha - 4^\alpha \\ &= 2^\alpha(3^\alpha - 2^\alpha) + 3^\alpha - 4^\alpha \\ &= 6^\alpha + 3^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha. \end{aligned}$$

Usando la desigualdad entre la media geométrica y la media aritmética con  $6^\alpha$  y  $3^\alpha$  tenemos que

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &\geq 2\sqrt{18^\alpha} - 2\sqrt{16^\alpha} \\ &> 0. \end{aligned}$$

**Caso b)**  $i \in \{3, 4, \dots, k-2\}$ : Consideramos nuevamente un árbol auxiliar  $T'$  formado como en el caso anterior. Es decir, si  $d = d(v_i)$  y  $v_{i-1}, v_{i+1}, u_1, \dots, u_{d-2}$  son los vecinos de  $v_i$ ,  $T'$  se obtiene al borrar las aristas  $u_j v_i$  y agregar las aristas  $u_j v_k$ ,  $j \in \{1, 2, \dots, d-2\}$ .

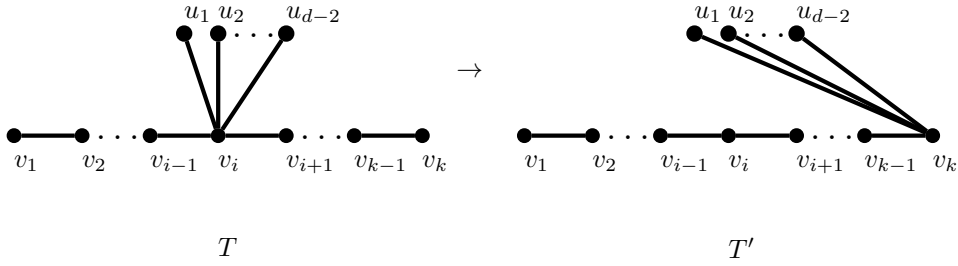


Figura 4.4: Obtención de  $T'$  a partir de  $T$  cambiando las aristas  $u_j v_i$  por  $u_j v_k$ , caso  $i \in \{3, \dots, k-2\}$

Denotamos por  $w(e)$  al aporte que hace la arista  $e$  a  $R_\alpha(T)$ , por  $w'(e)$  el aporte que hace la arista  $e$  a  $R_\alpha(T')$ . Consideremos también  $W_{v_i} = \sum_{j=1}^{d-2} w(v_i u_j)$  y  $W'_{v_k} = \sum_{j=1}^{d-2} w'(v_k u_j)$ . Notemos que para una arista  $vu$  de  $T$  y una arista  $vu'$  en  $T'$  tal que  $v$  tiene el mismo grado tanto en  $T$  como en  $T'$  tenemos la siguiente igualdad,

$$w'(vu') = w(vu) \frac{d'(u')^\alpha}{d(u)^\alpha},$$

donde  $d(u)$  denota el grado de  $u$  en  $T$ , y  $d'(u')$  denota el grado de  $u'$  en  $T'$ . Con esto se puede ver que

$$w'(v_{i-1}v_i) = w(v_{i-1}v_i) \frac{2^\alpha}{d^\alpha}, \quad (4.7)$$

$$w'(v_i v_{i+1}) = w(v_i v_{i+1}) \frac{2^\alpha}{d^\alpha}, \quad (4.8)$$

$$w'(v_{k-1}v_k) = w(v_{k-1}v_k)(d-1)^\alpha, \quad (4.9)$$

y

$$W'_{v_k} = W_{v_i} \frac{(d-1)^\alpha}{d^\alpha}.$$

Luego

$$\begin{aligned}
& R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
&= w(v_{i-1}v_i) + w(v_iv_{i+1}) + w(v_{k-1}v_k) + W_{v_i} \\
&\quad - [w'(v_{i-1}v_i) + w'(v_iv_{i+1}) + w'(v_{k-1}v_k) + W_{v_k}] \\
&= w(v_{i-1}v_i) + w(v_iv_{i+1}) + w(v_{k-1}v_k) + W_{v_i} \\
&\quad - \left[ (w(v_{i-1}v_i) + w(v_iv_{i+1})) \frac{2^\alpha}{d^\alpha} + w(v_{k-1}v_k)(d-1)^\alpha + W_{v_i} \left( \frac{d-1}{d} \right)^\alpha \right] \\
&= (w(v_{i-1}v_i) + w(v_iv_{i+1})) \left( 1 - \frac{2^\alpha}{d^\alpha} \right) + w(v_{k-1}v_k)(1 - (d-1)^\alpha) \\
&\quad + W_{v_i} \left( 1 - \left( \frac{d-1}{d} \right)^\alpha \right).
\end{aligned}$$

Ya que  $d(u_i) \geq 1$ ,  $d(v_{i+1}), d(v_{i-1}) \geq 2$

$$W_{v_i} = \sum_{j=1}^{d-2} d(u_j)^\alpha d^\alpha \geq (d-2)d^\alpha$$

y

$$w(v_{i-1}v_i) + w(v_iv_{i+1}) \geq 2^{\alpha+1}d^\alpha.$$

Además  $w(v_{k-1}v_k) = 2^\alpha$ . Con esto, tenemos que

$$\begin{aligned}
& R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
&\geq 2^{\alpha+1}d^\alpha \left( 1 - \frac{2^\alpha}{d^\alpha} \right) + 2^\alpha(1 - (d-1)^\alpha) + (d-2)d^\alpha \left( 1 - \frac{(d-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) \\
&= 2^{\alpha+1}(d^\alpha - 2^\alpha) + 2^\alpha(1 - (d-1)^\alpha) + (d-2)(d^\alpha - (d-1)^\alpha).
\end{aligned}$$

Si  $d \geq 4$  entonces  $(d-2), (d^\alpha - (d-1)^\alpha) > 0$  y

$$\begin{aligned}
R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &> 2^{\alpha+1}(d^\alpha - 2^\alpha) + 2^\alpha(1 - (d-1)^\alpha) \\
&= 2^\alpha(d^\alpha - (d-1)^\alpha + d^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha + 1) \\
&> 2^\alpha(d^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha + 1) \\
&\geq 2^\alpha(4^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha + 1) \\
&= 2^\alpha(2^\alpha - 1)^2 \\
&> 0.
\end{aligned}$$

De otra forma  $d = 3$ , en este caso

$$\begin{aligned}
R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= 2^{\alpha+1}(3^\alpha - 2^\alpha) + 2^\alpha(1 - 2^\alpha) + (3^\alpha - 2^\alpha) \\
&= (6^\alpha + 3^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha) + (6^\alpha - 4^\alpha) \\
&> 6^\alpha + 3^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha \\
&\geq \sqrt{18^\alpha} - 2\sqrt{16^\alpha} \\
&> 0.
\end{aligned}$$

En cualquier caso obtenemos un árbol con índice de Randić menor a  $T'$  lo cual contradice que  $T$  sea minimal, por lo tanto el camino  $P_n$  es el árbol que minimiza a  $R_\alpha$ . ■

Para cuándo  $\alpha < 0$  haremos uso del siguiente lema demostrado en [28]



**Lema 4.5.1** Para  $0 < m \leq 1$ , si  $p, q > 1$ , entonces

$$(d + p - 1)^{m+1} - (d - 1)d^m - (p - 1)p^m - d^m p^m > 0.$$

**Teorema 4.5.2** Entre los árboles con  $n$  vértices la estrella,  $S_n$ , minimiza a  $R_\alpha$  para  $\alpha < 0$ .

**Demostración:** La demostración se divide en dos casos, a) cuando  $-1 \leq \alpha < 0$  y b) cuando  $\alpha < -1$ . **Caso a)**  $-1 \leq \alpha < 0$ : Consideremos a  $T$  un árbol con  $n$  vértices distinto de  $S_n$  y que minimice a  $R_\alpha$ . Sea  $u$  el vértice de mayor grado y  $v$  el vecino de  $u$  con grado más grande. Sean  $d(u) = d$  y  $d(v) = p$ . Así  $n - 1 > d \geq 2$ . Obtenemos un nuevo árbol  $T'$  al contraer la arista  $uv$  en un sólo vértice que llamaremos  $u(v)$  y al agregar una nueva hoja  $w$  unido a este vértice.

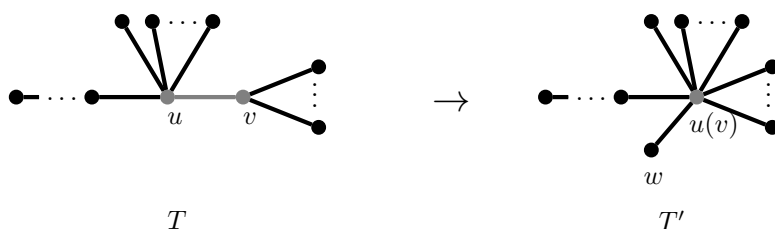


Figura 4.5:  $T'$  a partir de contraer la arista  $uv$  de  $T$  en un vértice  $u(v)$  y agregar una nueva hoja  $w$  unida a  $u(v)$ .

Denotemos por  $W_u$  a la aportación que hacen las aristas incidentes a  $u$  con excepción de  $uv$  en  $R_\alpha(T)$ , Y por  $W_v$  a la aportación que hacen las aristas incidentes a  $v$  con excepción de  $uv$  en  $R_\alpha(T)$ . Así  $W_u \geq (d - 1)d^\alpha q^\alpha$  y  $W_v \geq (p - 1)d^\alpha p^\alpha$ . Notemos que el aporte de las aristas que son incidentes a  $u(v)$  en  $R(T')$  está dado por

$$W_u \frac{(d + p - 1)^\alpha}{d^\alpha} + W_v \frac{(d + p - 1)^\alpha}{p^\alpha}$$

Luego,

$$\begin{aligned}
& R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
&= W_u + W_v + d^\alpha p^\alpha - \left[ W_u \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} + W_v \frac{(d+p-1)^\alpha}{p^\alpha} + (d+p-1)^\alpha \right] \\
&= W_u \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) + W_v \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{p^\alpha} \right) + (dp)^\alpha \\
&\quad - (d+p-1)^\alpha \\
&\geq (d-1)d^\alpha p^\alpha \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) + (p-1)d^\alpha p^\alpha \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{p^\alpha} \right) + (dp)^\alpha \\
&\quad - (d+p-1)^\alpha \\
&= (d-1)p^\alpha (d^\alpha - (d+p-1)^\alpha) + (p-1)d^\alpha (p^\alpha - (d+p-1)^\alpha) + (dp)^\alpha \\
&\quad - (d+p-1)^\alpha \\
&= (d-1)d^\alpha p^\alpha - (d-1)p^\alpha (d+p-1)^\alpha + (p-1)d^\alpha p^\alpha - (d-1)d^\alpha (d+p-1)^\alpha \\
&\quad + d^\alpha p^\alpha - (d+p-1)^\alpha \\
&= d^\alpha p^\alpha (d+p-1) - (d+p-1)^\alpha ((d-1)p^\alpha + (p-1)d^\alpha + 1) \\
&= d^\alpha p^\alpha (d+p-1)^\alpha ((d+p-1)^{1-\alpha} - (d-1)d^{-\alpha} - (p-1)p^{-\alpha} - d^\alpha p^\alpha)
\end{aligned}$$

Por el Lema 4.5.1

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') > 0.$$

**Caso b)**  $\alpha < -1$ : Tomemos nuevamente un árbol  $T$  de tamaño  $n$  que minimice a  $R_\alpha(T)$  y que sea distinto de  $S_n$ . Sea  $P = v_0 v_1 \dots v_{k-1} v_k$  un camino maximal de  $T$ , de tal forma que  $v_{k-1}$  tenga el mayor grado posible. De esta forma todos los vecinos de  $v_{k-1}$  son hojas salvo  $v_{k-2}$ . Obtenemos un nuevo árbol  $T'$  borrando las aristas entre  $v_{k-1}$  y sus vecinos que son hojas para unir cada una de estas hojas con  $v_{k-2}$ .

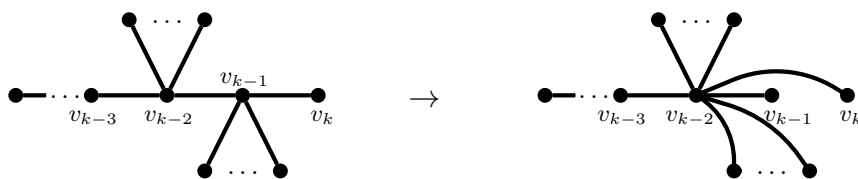


Figura 4.6:  $T'$  obtenido  $T$  al borrar las aristas de las hojas vecinas a  $v_{k-1}$  y unir las con  $v_{k-2}$

Sea  $p = d(v_{k-1})$ ,  $d = d(v_{k-2})$  y  $t = d(v_{k-3})$ . Ya que  $T$  es distinto de  $S_n$  se tiene que  $d, p \geq 2$ . Denotemos por  $W_d$  al aporte que hacen en  $R_\alpha(T)$  las aristas incidentes a  $v_{k-1}$  con excepción de  $v_{k-2}v_{k-1}$ . Para  $w$  un vecino de  $v_{k-2}$  distinto de  $v_{k-1}$  y  $v_{k-3}$ , tenemos  $p \geq d(w)$  ya que elegimos  $P$  de tal forma que  $v_{k-1}$

tenga grado máximo. De esta forma

$$\begin{aligned} W_d &\geq (d-2)d^\alpha p^\alpha + d^\alpha t^\alpha \\ &> (d-2)d^\alpha p^\alpha. \end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned} &R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\ &= W_d + (dp)^\alpha + (p-1)p^\alpha - \left[ W_d \left( \frac{d+p-1}{d} \right) + p(d+p-1)^\alpha \right] \\ &= W_d \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) + (dp)^\alpha + (p-1)p^\alpha - p(d+p-1)^\alpha \end{aligned}$$

Considerando que  $1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} > 0$  y  $W_d > (d-2)d^\alpha p^\alpha$  tenemos que

$$\begin{aligned} &R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\ &\geq (d-2)p^\alpha d^\alpha \left( 1 - \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) + (dp)^\alpha + (p-1)p^\alpha - p(d+p-1)^\alpha \\ &= (d-2)p^\alpha (d^\alpha - (d+p-1)^\alpha) + (dp)^\alpha + (p-1)p^\alpha - p(d+p-1)^\alpha \\ &= (d-1)p^\alpha d^\alpha - (d-2)p^\alpha (p+d-1)^\alpha - p(d+p-1)^\alpha + (p-1)p^\alpha \\ &= p^\alpha d^\alpha (p+d-1)^\alpha [(d-1)(p+d-1)^{-\alpha} - (d-2)d^{-\alpha} - p \cdot p^{-\alpha} d^{-\alpha} \\ &\quad + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha}] \end{aligned}$$

Como  $p^\alpha d^\alpha (p+d-1)^\alpha > 0$ , para ver que  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T') > 0$  basta probar que  $(d-1)(p+d-1)^{-\alpha} - (d-2)d^{-\alpha} - p \cdot p^{-\alpha} d^{-\alpha} + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha} > 0$ .

Para esto notemos que

$$\begin{aligned} &(d-1)(p+d-1)^{-\alpha} - (d-2)d^{-\alpha} - p \cdot p^{-\alpha} d^{-\alpha} + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^\alpha \\ &> (d-1)(p+d-1)^{-\alpha} - (d-2)d^{-\alpha} - p \cdot p^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha} \\ &= (d-1)(p+d-1)^{-\alpha} - (d-2)d^{-\alpha} - p \cdot p^{-\alpha} d^{-\alpha} + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha} \\ &= (d-1)((p+d-1)^{-\alpha} - d^{-\alpha}) + d^{-\alpha} - p^{-\alpha+1} d^{-\alpha} + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha} \\ &> d^{-\alpha} - p^{-\alpha+1} d^{-\alpha} d^{-\alpha} + (p-1)d^{-\alpha} (p+d-1)^{-\alpha} \\ &= d^{-\alpha} (1 - p^{-\alpha+1} + (p-1)(p+d-1)^{-\alpha}) \\ &\geq d^{-\alpha} ((p-1)(p+1)^{-\alpha+1} - p^{-\alpha+1} + 1) \\ &= d^{-\alpha} ((p-1)((p+1)^{-\alpha} - p^{-\alpha}) - (p^{-\alpha} - 1)) \end{aligned}$$

Por el teorema del valor medio, podemos tomar  $\varepsilon$  y  $\eta$ , con  $p \leq \varepsilon \leq p+1$  y  $1 \leq \eta \leq p$  tales que

$$(p+1)^{-\alpha} - p^{-\alpha} = -\alpha \varepsilon^{-\alpha-1}$$

y

$$p^\alpha - 1 = -\alpha \eta^{-\alpha-1} (p-1)$$

Así

$$\begin{aligned} &d^{-\alpha} ((p-1)((p+1)^{-\alpha} - p^{-\alpha}) - (p^{-\alpha} - 1)) \\ &= d^{-\alpha} ((p-1)(-\alpha) \varepsilon^{-\alpha-1} - (-\alpha) \eta^{-\alpha-1} (p-1)) \\ &= d^{-\alpha} (-\alpha) (p-1) (\varepsilon^{-\alpha-1} - \eta^{-\alpha-1}) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Así

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') > 0$$

Por lo tanto  $T$  no es minimal y  $S_n$  minimiza a  $R_\alpha$  cuando  $\alpha < -1$ . ■

### 4.5.2 Árboles con máximo índice de Randić

En el caso de las gráficas que maximizan el índice de Randić en [29] nos encontramos con que hay más gráficas además de la estrella y el camino que alcanzan estos valores máximo. Como es el caso de la estrella doble  $S_{p,q}$  (obtenida de unir a  $S_{p-1}$  y  $S_q$  haciendo coincidir una hoja de  $S_q$  con el centro de  $S_{p-1}$ ). Y la estrella subdividida (Se forma al reemplazar cada arista de una estrella  $S_m$  por un camino de tamaño 2, con excepción de a lo más una arista la cual es reemplazada por un camino de tamaño 3) Además la o las gráficas que maximizan a índice de Randić dependen del intervalo en el que se encuentre  $\alpha$ .

A continuación mencionamos que gráficas maximizan a  $R_\alpha$  según el intervalo en el que se encuentre  $\alpha$  [29].

**Teorema 4.5.3** *Entre los árboles de  $n$  vértices si  $T$  es un árbol que maximiza el índice de Randić  $R_\alpha$ , entonces:*

- Para  $\alpha \in (-\infty, -2]$ :  
Si  $n \leq 6$ ,  $T = P_n$ .  
Si  $n \geq 7$ ,  $T$  es la estrella subdividida.
- Para  $\alpha \in [-\frac{1}{2}, 0]$ :  $T = P_n$ .
- Para  $\alpha \in (0, 1]$ :  $T = S_n$ .
- Para  $\alpha \in (1, 2)$ :  $T = S_n$  o  $T = S_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, \lceil \frac{n}{2} \rceil}$ .
- Para  $\alpha \in [2, \infty)$ :  
Si  $n \geq 8$ ,  $T = S_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, \lceil \frac{n}{2} \rceil}$ .

Aquí solamente se demuestra de forma ilustrativa el caso  $0 < \alpha \leq 1$ . También se verá como acotar las posibilidades para  $T$  a la estrella y doble estrella cuando  $\alpha > 1$ . Por último, se muestran algunas características necesarias de  $T$  cuando  $\alpha < 0$ . Para cubrir el teorema anterior se puede proceder con métodos similares y con algunos cálculos manuales para casos específicos.

**Teorema 4.5.4**  $S_n$  maximiza el índice de Randić general entre los árboles cuando  $0 < \alpha \leq 1$ .

**Demostración:** Procederemos por contradicción. Sea  $T$  un árbol maximal distinto de  $S_n$ . Por tanto existe una arista  $uv$  tal que no contiene a una hoja. De aquí se sigue que  $d(u) = d \geq 2$  y  $d(v) = p \geq 2$ . Construimos ahora un nuevo árbol  $T'$  obtenido de  $T$  por medio de contraer la arista  $uv$  y agregar un vértice nuevo  $w$  y una nueva arista  $uw$ , tal como en la imagen

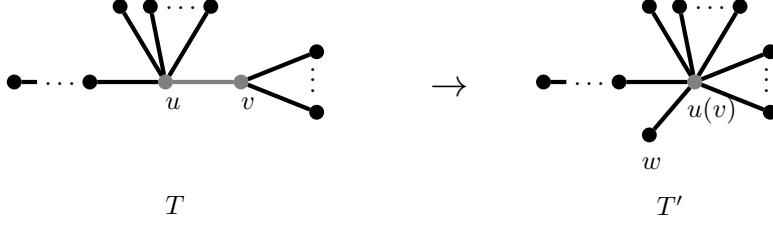


Figura 4.7:  $T'$  a partir de contraer la arista  $uv$  en  $T$  y agregar una nueva arista  $uw$

Sean  $S_u$  y  $S_v$  son el aporte al índice de Randić,  $R_\alpha(T)$ , que hacen las aristas vecinas a  $u$  y  $v$  respectivamente, sin contar a la arista  $uv$ . Luego, al contraer  $u$  y  $v$ , el vértice formado tiene grado  $d+p$ , el nuevo aporte que hacen las aristas adyacentes a dicho vértice en  $R_\alpha(T')$  es

$$\frac{S_u}{d^\alpha}(d+p-1)^\alpha \frac{S_v}{p^\alpha}(d+p-1)^\alpha + (d+p-1)^\alpha$$

De esta forma la diferencia del índice de Randić de  $T'$  y  $T$  es

$$\begin{aligned} R_\alpha(T') - R_\alpha(T) &= \frac{S_u}{d^\alpha}(d+p-1)^\alpha + \frac{S_v}{p^\alpha}(d+p-1)^\alpha + (d+p-1)^\alpha - [S_u + S_v + (dp)^\alpha] \\ &= S_u \left( \frac{(d+p-1)^\alpha}{d^\alpha} - 1 \right) + S_v \left( \frac{(d+p-1)^\alpha}{p^\alpha} - 1 \right) + (d+p-1)^\alpha - (dp)^\alpha \end{aligned}$$

Como  $0 \leq \alpha$ ,

$$S_u = \sum_{\substack{r \sim u \\ r \neq v}} d_r^\alpha d^\alpha \geq \sum_{\substack{r \sim u \\ r \neq v}} d^\alpha = (d-1)d^\alpha.$$

Donde  $d_r = d(r)$ . De forma análoga  $S_v \geq (p-1)p^\alpha$ . Con esto tenemos que

$$\begin{aligned} R(T') - R(T) &\geq (d+p-1)^\alpha(d-1) - (d-1)d^\alpha \\ &\quad + (d+p-1)^\alpha(p-1) - (p-1)p^\alpha + (d+p-1)^\alpha - (dp)^\alpha \\ &= (d+p-1)^\alpha(d+p-2) - (d-1)d^\alpha - (p-1)p^\alpha - (dp)^\alpha \\ &> (d+p-1)^{\alpha+1} - (d-1)d^\alpha - (p-1)p^\alpha - (dp)^\alpha. \end{aligned}$$

Sea

$$g(d, p) = (d+p-1)^{\alpha+1} - (d-1)d^\alpha - (p-1)p^\alpha - (dp)^\alpha.$$

Veamos que valores puede tomar  $g$ . Notemos primero que  $g$  y  $\frac{\partial g}{\partial d}$  son continuas en  $d, p \geq 1$  ya que  $d+p-1$  no se anula y siempre que hay un exponente  $\alpha-1$  la base es mayor que cero.

Consideremos para  $d \geq 1$  fijo la siguiente función

$$f_d(p) = \frac{\partial g}{\partial d}(d, p) = (\alpha+1)(d+p-1)^\alpha - (\alpha+1)d^\alpha + \alpha d^{\alpha-1} - \alpha d^{\alpha-1} p^\alpha.$$

Luego,

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_d}{\partial p}(p) &= (\alpha + 1)\alpha(d + p + 1)^{\alpha-1} - \alpha^2 d^{\alpha-1} p^{\alpha-1} \\ &> \alpha^2((d + p + 1)^{\alpha-1} - (dp)^{\alpha-1}).\end{aligned}$$

Cuando  $d, p > 1$  tenemos que

$$\begin{aligned}1 &< p \\ d - 1 &< p(d - 1) \\ p + d - 1 &< pd,\end{aligned}$$

con lo que,  $(d + p + 1)^{\alpha-1} - (dp)^{\alpha-1} > 0$  y  $\frac{\partial f_d}{\partial p}(p) > 0$  para  $p > 1$ . Así  $f_d(p)$  es creciente estricto en el intervalo  $(1, \infty)$ . Por la continuidad de  $\frac{\partial g}{\partial d}(d, p)$ ,  $f_d(p)$  es creciente estricto en  $[1, \infty)$ . Así, para  $d, p > 1$ ,

$$g(d, p)f_d(p) > f_d(1) = (\alpha + 1)d^\alpha - (\alpha + 1)d^\alpha + \alpha d^{\alpha-1} - \alpha d^{\alpha-1} = 0$$

De esta manera  $\frac{\partial g}{\partial d}(d, p) = f_d(p) > 0$  para  $p > 1$ .

Consideremos ahora a  $d$  como variable. Es decir, para  $p > 1$  fijo, la función  $d \mapsto g(d, p)$  es estrictamente creciente en  $(1, \infty)$ , nuevamente por continuidad, este intervalo puede extenderse a  $[1, \infty)$ . Como

$$g(1, p) = p^{\alpha+1} - (p - 1)^\alpha - p^\alpha = 0$$

Se sigue que  $g(d, p) > 0$  para  $d, p > 1$ . Por lo tanto  $R_\alpha(T') - R_\alpha(T) > 0$  y  $T$  no era maximal. ■

**Teorema 4.5.5** *Entre los árboles de tamaño  $n$ , la gráfica que maximiza al índice de Randić  $R_\alpha(T)$ , para  $\alpha > 1$  es, o bien la estrella o una estrella doble.*

**Demostración:** Notemos primero que un árbol donde la distancia máxima es a lo más tres, es o bien una estrella, o una estrella doble, más aún, esta propiedad caracteriza a la estrella y a la estrella doble dentro de los árboles. Procederemos ahora por contradicción. Sea  $T$  un árbol que maximiza a  $R_\alpha$  con  $T$  distinto de la estrella y de la estrella doble. Por lo tanto existe un camino de tamaño cuatro. sean  $v_1, v_2, v_3$  los vértices internos de dicho camino. y  $d(v_1) = i$ ,  $d(v_2) = j$ ,  $d(v_3) = q$ . Notemos que  $i, q \geq 2$ . Sean  $u_1, \dots, u_{i-1}$  los vecinos de  $v_1$  distintos de  $v_2$  y  $w_1, \dots, w_{q-1}$  los vecinos de  $v_3$  distintos de  $v_2$ . Consideremos un nuevo árbol  $T'$ , construido a partir de  $T$  de la siguiente forma: Borrarnos las aristas  $v_3 w_k$  y agregamos nuevas aristas  $v_1 w_k$  como se muestra en la imagen siguiente.

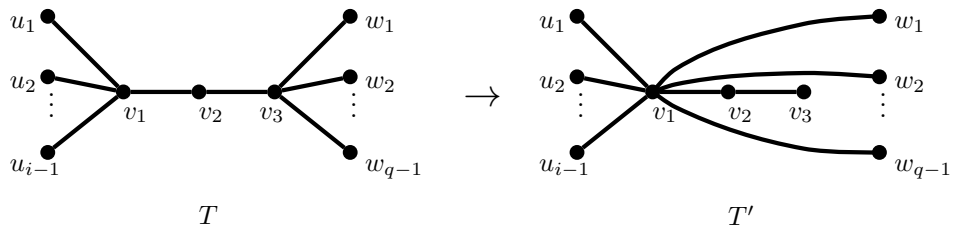


Figura 4.8:  $T'$  obtenido de  $T$  al quitar los vecinos hoja de  $v_1$  y unirlos a  $v_3$

Notemos que las aristas  $v_2v_3$ ,  $v_1v_2$  y  $v_1u_k$  aportan  $j^\alpha q^\alpha$ ,  $i^\alpha j^\alpha$  y  $i^\alpha d(u_k)^\alpha$  respectivamente en  $R_\alpha(T)$ . Por otro lado, estas mismas aristas en  $R_\alpha(T')$  aportan  $j^\alpha$ ,  $(i+q-1)^\alpha j^\alpha$  y  $(i+q-1)^\alpha d(u_k)^\alpha$ . Además, cada arista  $v_3w_k$  contribuye a  $R_\alpha(T)$  con  $q^\alpha d(w_k)^\alpha$  y cada arista  $v_1w_k$  contribuyen con  $(i+q-1)d(w_k)$  en  $R_\alpha(T')$  en  $T'$ . De esta forma

$$\begin{aligned} R(T') - R(T) = & j^\alpha + (i+q-1)^\alpha j^\alpha + (i+q-1)^\alpha \left( \sum_{k=1}^{i-1} d(u_k)^\alpha + \sum_{k=1}^{q-1} d(w_k)^\alpha \right) \\ & - j^\alpha q^\alpha - i^\alpha j^\alpha - i^\alpha \sum_{k=1}^{i-1} d(u_k)^\alpha - q^\alpha \sum_{k=1}^{q-1} d(w_k)^\alpha \end{aligned}$$

como  $(i+q-1)^\alpha - i^\alpha > 0$  y  $(i+q-1)^\alpha - q^\alpha > 0$ ,

$$\begin{aligned} R(T') - R(T) & \geq j^\alpha + (i+q-1)^\alpha j^\alpha - j^\alpha q^\alpha - i^\alpha j^\alpha \\ & = j^\alpha((i+q-1)^\alpha - i^\alpha - q^\alpha + 1) \end{aligned}$$

Sea

$$f(i, q) = (i+q-1)^\alpha - i^\alpha - q^\alpha + 1,$$

para  $i, q \geq 2$ . Notemos que  $f$  es continua y que

$$\frac{\partial^2 f}{\partial i \partial i}(i, q) = \alpha(\alpha-1)(i+q-1)^{\alpha-2} - \alpha(\alpha-1)i^{\alpha-2} \geq 0$$

y

$$\frac{\partial^2 f}{\partial j \partial j}(i, q) = \alpha(\alpha-1)(i+q-1)^{\alpha-2} - \alpha(\alpha-1)q^{\alpha-2} \geq 0$$

Por lo tanto  $f$  alcanza su valor mínimo en  $(i, q) = (2, 2)$ . Luego,

$$f(i, q) \geq f(2, 2) = 3^\alpha - 2^\alpha - (2^\alpha - 1^\alpha) = \alpha\nu^{\alpha-1} - \alpha\epsilon^{\alpha-1}.$$

para algún  $2 < \nu < 3$  y  $1 < \epsilon < 2$ . Así  $f(2, 2) > 0$  y por lo tanto

$$R_\alpha(T') - R_\alpha(T) > 0.$$

■

Para el siguiente teorema introduciremos el concepto de garra. Decimos que una garra es un vértice tal que todos sus vecinos son hojas salvo uno.

**Lema 4.5.2** *Si  $\alpha < 0$ ,  $n \geq 7$  y  $T$  es un árbol que maximiza a  $R_\alpha$  de tamaño  $n$ , entonces el grado de cada garra es dos.*

**Demostración:** Supongamos que  $T$  tiene una garra  $v$ , con  $d(v) \geq 3$ . Sean  $v_1, \dots, v_{d-1}$  sus vecinos que son hojas y  $u$  su otro vecino. Definimos un nuevo árbol  $T'$  formado al borrar las aristas  $vv_i$  de  $T$  y añadir el camino  $v, v_1, \dots, v_{d-1}$ .

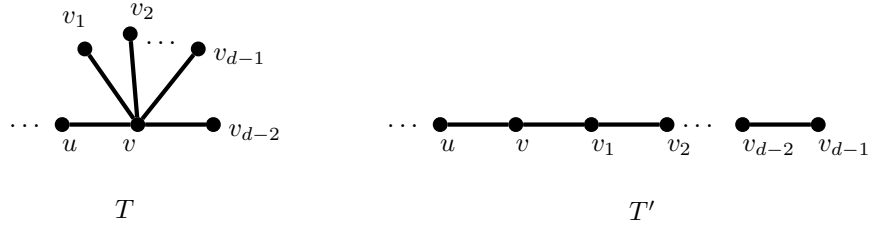


Figura 4.9:  $T'$  obtenido a partir de  $T$  al convertir una garra en un camino

Si  $d(u) = p \leq 1$ , Entonces la arista  $uv$  aporta  $(pq)^\alpha$  a  $R_\alpha(T)$  y cada arista  $vv_i$  aporta  $d^\alpha$ . Por otro lado, cada arista  $v_{i-1}v_i$ , con  $1 \leq i \leq d-2$  y  $v_0 = v$  aporta  $2^\alpha 2^\alpha$  a  $R_\alpha(T')$ ,  $v_{d-2}v_{d-1}$  aporta  $2^\alpha$  y  $uv$ ,  $2^\alpha q^\alpha$ . De esta forma

$$\begin{aligned}
 R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= (d-1)d^\alpha + d^\alpha p^\alpha - 2^\alpha p^\alpha - (d-2)4^\alpha - 2^\alpha \\
 &= (d-2)(d^\alpha - 4^\alpha) + d^\alpha + d^\alpha p^\alpha - 2^\alpha p^\alpha - 2^\alpha \\
 &= (d-2)(d^\alpha - 4^\alpha) + (p^\alpha + 1)(d^\alpha - 2^\alpha) \\
 &< (d-2)(d^\alpha - 4^\alpha) + (d^\alpha - 2^\alpha) \\
 &\leq (3^\alpha - 4^\alpha) + (3^\alpha - 2^\alpha) = -\alpha \epsilon^{\alpha-1} + \alpha \nu^{\alpha-1}
 \end{aligned}$$

Donde  $3 \leq \alpha \leq 4$  y  $2 \leq \nu \leq 3$ . Como así  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T') < (3^\alpha - 4^\alpha) + (3^\alpha - 2^\alpha)$  Y por tanto  $T$  no puede ser maximal si tiene garras de grado mayor que dos. ■

**Lema 4.5.3** Para  $\alpha < 0$  y  $T$  un árbol que maximiza a  $R_\alpha$  con  $n \geq 7$ ,  $u$  una hoja de  $T$ , y  $v$  vecino de  $u$ , se tiene que  $d(v) = 2$ .

**Demostración:** Sea  $u$  una hoja de  $T$  y sea  $v$  el vecino de esta hoja. Consideremos a  $P$ , el camino más largo de  $T$  que pasa por  $v$ , tal que  $s$  es un vértice final con vecino  $r$ . Por la cantidad de vértices de  $T$  y el lema 4.5.2, se tiene que  $d(r) = 2$ . Sea  $d(v) = d$ , si  $d \geq 4$ , consideramos un nuevo árbol  $T'$  formado al borrar la arista  $uv$  y agregar la arista  $su$ .



Figura 4.10:  $T'$  obtenido a partir de  $T$  al borrar la arista  $uv$  y agregar la arista  $su$ .



De esta forma, si denotamos por  $S_v$  de los pesos de las aristas adyacentes a  $v$ , distintos de  $uv$ , tenemos que

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= S_v + d^\alpha + 2^\alpha - \left[ S_v \frac{(d-1)^\alpha}{d^\alpha} + 2^\alpha + 4^\alpha \right] \\ &= S_v \left( 1 - \frac{(d-1)^\alpha}{d^\alpha} \right) + d^\alpha - 4^\alpha \end{aligned}$$

Como  $d \geq 4$ , entonces  $1 - \frac{(d-1)^\alpha}{d^\alpha} < 0$  y  $d^\alpha \leq 4^\alpha$ , con lo que  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T')$ .

Ahora solo falta ver el caso cuando  $d = 3$ , sean  $x, y$  los vecinos de  $v$ . y  $p$  y  $q$  sus respectivos grados. Se consideran varios casos.

**Caso 1:**  $p = 2$  o  $q = 2$  Supongamos que  $p = 2$  y sea  $w$  el otro vecino de  $x$ , con  $d(w) = k$ . Consideremos un nuevo árbol  $T'$  formado al borrar las aristas  $wx$  y  $xv$  y luego agregar las nuevas aristas  $wv$  y  $xu$ . Notemos que si  $k \geq 2$ , entonces

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= 2^\alpha k^\alpha + 3^\alpha + 6^\alpha - [3^\alpha k^\alpha + 2^\alpha + 6^\alpha] \\ &= (1 - k^\alpha)(3^\alpha - 2^\alpha) \\ &< 0. \end{aligned}$$

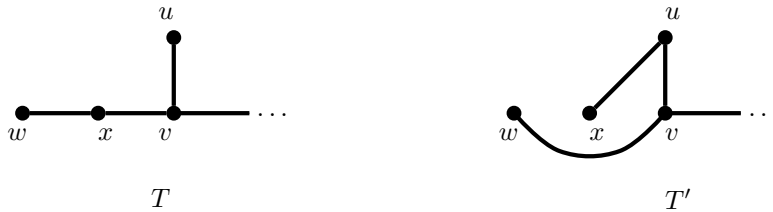


Figura 4.11:  $T'$  obtenido a partir de  $T$  al borrar las aristas  $wx$  y  $xv$  y agregar las aristas  $wv$  y  $xu$

Para el caso cuando  $k = 1$ , el nuevo árbol  $T'$  es isomorfo al original, en el artículo [29] saltan este caso, sin embargo la demostración queda incompleta sin él, seguimos con los demás casos por ahora.

**Caso 2:**  $p \geq 3$  y  $q \geq 3$  Dividimos este caso en otros dos, el primero cuando  $\alpha \in [-2, 0)$  y el segundo cuando  $\alpha \in (-\infty, 2)$ .

**Caso 2.1:**  $\alpha \in [-2, 0)$

Construimos un nuevo árbol  $T'$  a partir de  $T$  borrando las aristas  $wv$ ,  $xv$ ,  $vy$  y agregando las nuevas aristas  $xy$ ,  $su$  y  $wv$ . al borrar las aristas adyacentes a  $u$  y  $v$  y agregar la arista  $xy$  y las aristas  $su$  y  $wv$

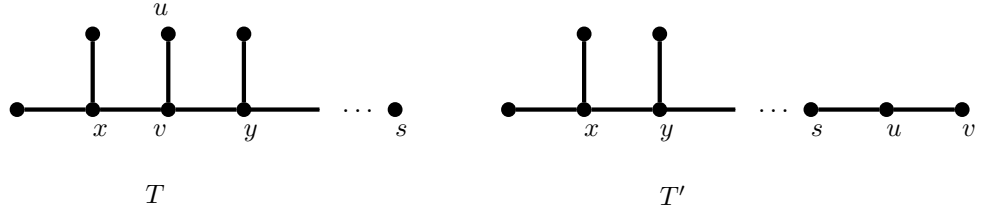


Figura 4.12:  $T'$  obtenido a partir de  $T$  al borrar las aristas  $uv$ ,  $xv$  y  $vy$  y agregar las aristas  $xy$ ,  $su$  y  $uv$ .

Notemos que  $s$  es el vértice final del camino de  $P$ , entonces su vecino,  $r$ , es una garra y por el lema 4.5.2 tiene grado 2. Así

$$\begin{aligned} R_\alpha - R_\alpha &= 3^\alpha p^\alpha + 3^\alpha q^\alpha + 3^\alpha + 2^\alpha - [p^\alpha q^\alpha + 2^\alpha \cdot 2^\alpha + 2^\alpha \cdot 2^\alpha + 2^\alpha,] \\ &= 3^\alpha(p^\alpha + q^\alpha + 1) - [2 \cdot 4^\alpha + p^\alpha q^\alpha]. \end{aligned}$$

Definimos

$$f(p, q) = 3^\alpha(p^\alpha + q^\alpha + 1) - 2 \cdot 4^\alpha - p^\alpha q^\alpha \quad (4.10)$$

para  $p, q > 3$ , luego

$$\frac{\partial f}{\partial p} = \alpha 3^\alpha p^{\alpha-1} - \alpha^{\alpha-1} q^\alpha = -\alpha p^{\alpha-1}(q^\alpha - 3^\alpha) \leq 0$$

para  $0 < \alpha < -2$ , tenemos que

$$f(3, q) = 3^\alpha(3^\alpha + q^\alpha + 1) - 2 \cdot 4^\alpha - 3^\alpha q^\alpha = 9^\alpha + 3^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha.$$

Para ver que  $f(p, q) < 0$ , definimos  $g(\alpha) = f(3, q) \cdot 9^{-\alpha}$ . Luego,

$$g(\alpha) = 1 + 3^{-\alpha} - 2 \left(\frac{9}{4}\right)^{-\alpha}$$

y entonces

$$g'(\alpha) = -3^{-\alpha} \ln(3) + 2 \left(\frac{9}{4}\right)^{-\alpha} \ln\left(\frac{9}{4}\right).$$

Notemos que  $g'(\alpha)$  Resolviendo para  $\alpha$  la ecuación  $g'(\alpha) = 0$  tenemos

$$0 = -3^{-\alpha} \ln(3) + 2 \left(\frac{9}{4}\right)^{-\alpha} \ln\left(\frac{9}{4}\right) \alpha$$

y se tiene

$$-\frac{\ln\left(\frac{2 \ln\left(\frac{9}{4}\right)}{\ln(3)}\right)}{\ln\left(\frac{4}{3}\right)}$$

con lo que

$$\mu = -\frac{\ln\left(\frac{2 \ln\left(\frac{9}{4}\right)}{\ln(3)}\right)}{\ln\left(\frac{4}{3}\right)}$$

es la raíz de  $g'$ . Por métodos numéricos se puede ver que  $\mu \sim -1.35401 > -2$ , que  $g'(\alpha) < 0$  para  $\alpha > \mu$ ,  $g'(\alpha) > 0$  para  $\alpha < \mu$ . Luego, como  $0 > \mu > -2$  y

$$\begin{aligned} g(-2) &= 1 + 3^2 - 2 \left(\frac{9}{4}\right)^2 = 1 + 9 - \frac{81}{8} \\ &= 1 - \frac{9}{8} = -0.125 < 0 \end{aligned}$$

y

$$g(0) = 1 + 3^0 - 2 \left(\frac{9}{4}\right)^0 = 0.$$

Entonces,  $f(3, q) = 9^\alpha \cdot g(\alpha) < 0$  para  $\alpha \in [-2, 0)$ , Como  $\frac{\partial f}{\partial p} \leq 0$ , se sigue que  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T') < 0$  para  $\alpha \in [-2, 0)$ . Lo cual es una contradicción,

**caso 2.2**  $\alpha \in (-\infty, -2)$  Consideramos un nuevo árbol  $T'$  obtenido de  $T$  al borrar la arista  $xv$  y agregar la nueva arista  $xy$ .

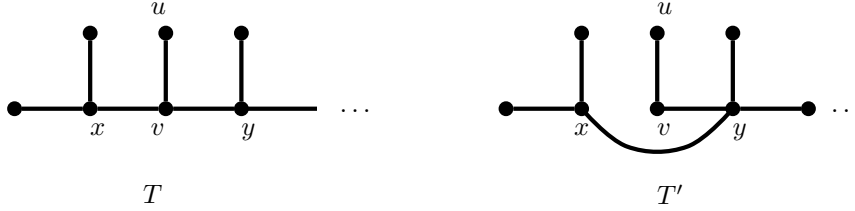


Figura 4.13:  $T'$  obtenido a partir de  $T$  al borrar la arista  $xv$  y agregar la arista  $xy$ .

Luego,

$$\begin{aligned} R_\alpha(T) - R_\alpha(T') &= 3^\alpha(p^\alpha + q^\alpha + 1) - p^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha + S_y \left(1 - \frac{(q+1)^\alpha}{q^\alpha}\right), \end{aligned}$$

donde  $S_y$  es la suma de los pesos de los vértices insidentes a  $y$  distintos de  $vy$ . Por lo tanto

$$S_y \leq (q-1)q^\alpha$$

y así

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \leq 3^\alpha(p^\alpha q^\alpha + 1) - p^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha + (q-1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha)$$

Definimos ahora  $f(p, q)$  para  $p, q \geq 3$  como

$$f(p, q) = 3^\alpha(p^\alpha q^\alpha + 1) - p^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha(q+1)^\alpha - 2^\alpha + (q-1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha)$$

Notemos que

$$\frac{\partial f}{\partial p} = \alpha 3^\alpha p^{\alpha-1} - \alpha(q+1)^\alpha p^{\alpha-1} < 0$$

Luego

$$\begin{aligned} f(3, q) &= 9^\alpha + 3^\alpha - 2^\alpha + 3^\alpha q^\alpha - 3^\alpha (q+1)^\alpha - 2^\alpha (q+1)^\alpha + (q-1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha) \\ &< 9^\alpha + 3^\alpha - 2^\alpha + 3^\alpha (q^\alpha - (q+1)^\alpha) + (q-1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha) \\ &= 9^\alpha + 3^\alpha - 2^\alpha + (3^\alpha + q - 1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha) \end{aligned}$$

Definimos ahora

$$k(q) = 9^\alpha + 3^\alpha - 2^\alpha + (3^\alpha + q - 1)(q^\alpha - (q+1)^\alpha)$$

Derivando tenemos que

$$\begin{aligned} k'(q) &= (3^\alpha + q - 1)\alpha(q^{\alpha-1} - (q+1)^{\alpha-1}) + q^\alpha - (q+1)^\alpha \\ &= (\alpha 3^\alpha + \alpha q + q - \alpha)(q^{\alpha-1} - (q+1)^{\alpha-1}) \\ &\quad - q(q^{\alpha-1} + (q+1)^{\alpha-1}) + q^\alpha - (q+1)^\alpha \end{aligned}$$

Como

$$q^\alpha - (q+1)^\alpha < q(q^{\alpha-1} - (q+1)\alpha - 1)$$

Entonces

$$\begin{aligned} k'(q) &< (\alpha 3^\alpha + \alpha q + q - \alpha)(q^{\alpha-1} - (q+1)^{\alpha-1}) \\ &< (\alpha q + q - \alpha)(q^{\alpha-1} - (q+1)^{\alpha-1}) \\ &< 0 \end{aligned}$$

Como  $q \geq 3$ ,  $\alpha < -2$ , entonces  $q > \frac{\alpha}{\alpha+1}$  y así  $\alpha q + q + \alpha < 0$ . Además

$$\begin{aligned} k(3) &= 2 \cdot 9^\alpha - 2^\alpha - 12^\alpha + 3^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha \\ &< 6^\alpha + 3 \cdot 3^\alpha - 2^\alpha - 2 \cdot 4^\alpha \end{aligned}$$

y  $6^\alpha < \frac{2}{3} \cdot 4^\alpha$  para  $\alpha < -2$ . así que

$$k(3) < 3 \cdot 3^\alpha - 2^\alpha - \frac{4}{3} \cdot 4^\alpha.$$

De forma parecida al caso anterior, definimos,  $l(\alpha) = k(3) \cdot 4^{-\alpha}$  y que la solución a  $l'(\alpha) = 0$  está dado por

$$\theta = \frac{\ln \frac{\ln 2}{3(\ln 4 - \ln 3)}}{\ln \frac{2}{3}}$$

Calculando por métodos numéricos el valor de  $\theta$  se puede ver que  $\theta > -2$ ,  $l'(\theta) < 0$  para  $\alpha > \theta$ , para  $\alpha > -2$  tenemos que  $l(\alpha) < l(-2) = 0$ . Así  $k(3) = 4^\alpha l(\alpha) < 0$ . Con lo que  $r_\alpha(T) - R_\alpha(T) < 0$  para  $\alpha \in (-\infty, -2)$ . Lo cual contradice que  $T$  fuera maximal. ■

**Teorema 4.5.6** Para  $-\frac{1}{2} < \alpha < 0$ , el árbol que maximiza el índice de Randić es el camino  $P_n$ .

**Demostración:** Procederemos por contradicción. Supongamos que  $T$  es un árbol de tamaño  $n$  con máximo índice de Randić,  $R_\alpha$  para  $\alpha \in [-\frac{1}{2}, 0)$ . Consideremos la arista que aporte más al índice de Randić, digamos que es  $e = uv$ . Sea  $P$  un camino más largo que pase por  $e$ ,  $x$  y  $y$  los extremos de  $P$  y  $s$  y

$t$  sus vecinos respectivamente. Construimos un nuevo árbol  $T'$  a partir de  $T$  agregando la arista  $xy$  y borrando la arista  $uv$ ,

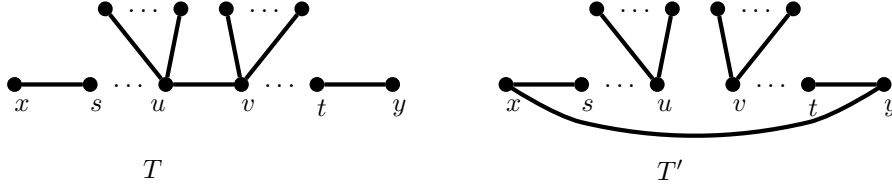


Figura 4.14:  $T'$  a partir de  $T$  obtenido de borrar a arista  $uv$  y agregar la arista  $xy$

Luego por el lema 4.5.2 y el lema 4.5.3 sabemos que  $d(s) = d(t) = 2$ . Sean  $p = d(u)$  y  $q = d(v)$ ,  $S_u$  la suma del aporte de las aristas incidentes a  $u$  con excepción de  $uv$  y  $S_v$  la suma del aporte de las aristas incidentes a  $v$  con excepción de  $uv$ . Luego,  $S_u \geq (p-1)p^\alpha q^\alpha$ , y  $s_v \geq (q-1)p^\alpha q^\alpha$  Así

$$\begin{aligned} & R_\alpha(T') - R_\alpha(T) \\ &= S_u \left( \frac{(p-1)^\alpha}{p^\alpha} \right) + S_v \left( \frac{(q-1)^\alpha}{q^\alpha} \right) + 3 \cdot 4^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha - (pq)^\alpha \\ &\geq (p-1)^{\alpha+1} q^\alpha + (q-1)^{\alpha+1} p^\alpha - (p+q-1)p^\alpha q^\alpha + 3 \cdot 4^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha \end{aligned}$$

Sea

$$f(p, q) = (p-1)^{\alpha+1} q^\alpha + (q-1)^{\alpha+1} p^\alpha - (p+q-1)p^\alpha q^\alpha + 3 \cdot 4^\alpha - 2 \cdot 2^\alpha$$

Luego,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial p} &= (1+\alpha)(p-1)^\alpha q^\alpha + \alpha(q-1)^{1+\alpha} p^{\alpha-1} - \alpha(p+q-1)p^{\alpha-1} q^\alpha \\ &= (1+\alpha)q^\alpha((p-1)^\alpha - p^\alpha) + \alpha \frac{q-1}{p} p^\alpha((q-1)^\alpha - q^\alpha) \\ &\geq \frac{1}{2} q^\alpha p^\alpha((p-1)^\alpha - p^\alpha) - \frac{1}{2} \frac{q-1}{p} p^\alpha((q-1)^\alpha - q^\alpha) \\ &= \frac{1}{2} q^\alpha p^\alpha (p-1)^\alpha (q-1)^\alpha ((p^{-\alpha} - (p-1)^{-\alpha}) \\ &\quad - \frac{q-1}{p} (p-1)^{-\alpha} (q^{-\alpha} - (q-1)^{-\alpha})) \end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned}
 F(p, q) &= (q-1)^{-\alpha}(p^{-\alpha} - (p-1)^{-\alpha}) - \frac{q-1}{p}(p-1)^{-\alpha}(q^{-\alpha} - (q-1)^{-\alpha}) \\
 &= (q-1)^{\alpha}(p^{-\alpha} - (p-1)^{-\alpha}) - \frac{(p-1)^{-\alpha}}{p}(q-1)\left(\left(1 + \frac{1}{q-1}\right)^{-\alpha} - 1\right) \\
 &\geq (q-1)^{-\alpha}(p^{-\alpha} - (p-1)^{-\alpha}) - \frac{p-1^{-\alpha}}{p}(-\alpha) \\
 &= (q-1)^{-\alpha}(p-1)^{-\alpha} \left( \left( \frac{t}{(p-1)(1+\varepsilon)^{1-\alpha}} - \frac{t}{p} \right) \right)
 \end{aligned}$$

La última igualdad se obtuvo por el teorema del valor medio considerando  $\varepsilon \in \left[0, \frac{1}{p-1}\right]$  Así

$$\begin{aligned}
 F(p, q) &\geq (q-1)^{-\alpha}(p-1)^{-\alpha} \left( \frac{t}{(p-1)(1+(1-(-\alpha)\varepsilon))} - \frac{-\alpha}{p} \right) \\
 &= (q-1)^{-\alpha}(p-1)^{-\alpha} \left( \frac{-\alpha}{(p-(-\alpha))} - \frac{-\alpha}{p} \right) > 0
 \end{aligned}$$

De esta forma  $\frac{\partial f}{\partial p} > 0$ . De forma análoga se sigue que  $\frac{\partial f}{\partial q} > 0$ . Con lo que  $f$  es estrictamente creciente con respecto a  $p$  y con respecto a  $q$  y así  $f(3, 2) < f(2, 2)$ , para  $\alpha \in \left[-\frac{1}{2}, 0\right]$  ■ Para el siguiente lema hacen uso de la siguiente definición.

**Definición 4.5.1 (camino suspendido)** Sea  $T$  un árbol y  $u_1, u_2, \dots, u_r$  un camino de  $T$ . Decimos que  $u_1, u_2, \dots, u_r$  es un camino suspendido con raíz en  $r$ , si  $d(u_1) = 1$ ,  $d(u_i) = 2$ , ( $i \in \{2, \dots, r-1\}$ ) y  $d(u_2) > 2$ .

**Lema 4.5.4** Sea  $T$  un árbol tal que todo vecino de una hoja tiene grado 2 y  $u_1, u_2, u_3, \dots, u_{r-1}, v$  un camino suspendido de  $T$  con raíz en  $v$ , y con  $r \geq 5$ . Al considerar un nuevo árbol  $T'$  formado al borrar la arista  $u_2u_3$  y agregar la arista  $vu_2$ , entonces  $R_\alpha(T') > R_\alpha(T)$  para  $\alpha < -1$ .

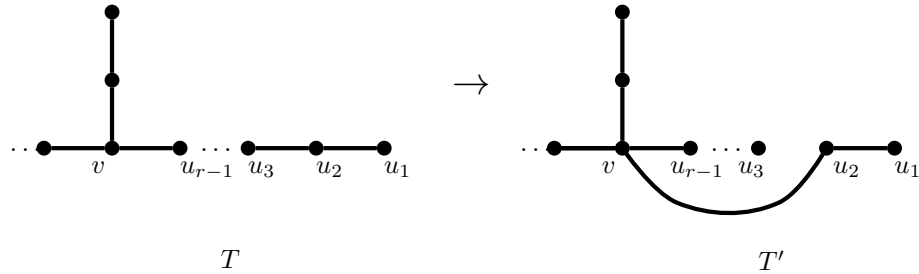


Figura 4.15:  $T'$  a partir de borrar la arista  $u_2u_3$  en  $T$  y agregar una nueva arista  $vu_2$

**Demostración:** Sea  $d(v) = d > 2$  y  $S_v$  la suma del aporte que hacen las aristas incidentes a  $v$  con excepción de  $u_{r-1}v$ . Así  $S_v \leq (d-1)2^\alpha d^\alpha$ . Luego

$$\begin{aligned}
& R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
&= S_v \left(1 - \frac{(d+1)^\alpha}{d^\alpha}\right) + 2^\alpha(d^\alpha - (d+1)^\alpha) + 4^\alpha - 4^\alpha - 2^\alpha - 2^\alpha(d+1)^\alpha \\
&\leq (d-1)2^\alpha(d^\alpha - (d+1)^\alpha) + 2^\alpha(d^\alpha - (d+1)^\alpha) + 2 \cdot 4^\alpha - 2^\alpha - 2^\alpha(d+1)^\alpha \\
&= d \cdot 2^\alpha(d^\alpha - (d+1)^\alpha) + 2 \cdot 4^\alpha - 2^\alpha - 2^\alpha(d+1)^\alpha \\
&= 2^\alpha d^{\alpha+1} - 2d(d+1)^\alpha - 2^\alpha(d+1)^\alpha + 2^\alpha(2 \cdot 2^\alpha - 1) \\
&= 2^\alpha(d^{\alpha+1} - (d+1)^{\alpha+1} + 2 \cdot 2^\alpha - 1)
\end{aligned}$$

Ya que la función  $x \rightarrow x^{\alpha+1}$  es monóticamente decreciente para  $\alpha < 1$  al sustituir  $d$  por su menor valor posible, tenemos que

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') < 2^\alpha(2^{\alpha+1} - 3^{\alpha+1} + 2^{\alpha+1} - 1) < 0.$$

■

**Lema 4.5.5** Si un árbol  $T$ , tiene dos caminos suspendidos  $P_1$  y  $P_2$  de tamaño 3. Al formar un nuevo árbol  $T'$  a partir de  $T$  borrando la arista de la hoja de  $P_1$  y conectándola a la hoja de  $P_2$ , tenemos que  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T') = 0$

**Demostración:** Sea  $P_1 = u_1, u_2, u_3, x$  y  $P_2 = v_1, v_2, v_3, x$ . Notemos que al cambiar la hoja  $u_1$  hacia  $P_2$ , por medio de borrar la arista  $u_1u_2$  y agregar la arista  $u_1v_1$ , estas dos aristas aportan lo mismo al índice de Randić. Luego, solo importa el aporte de las aristas  $u_2u_3$  y  $v_1v_2$ .

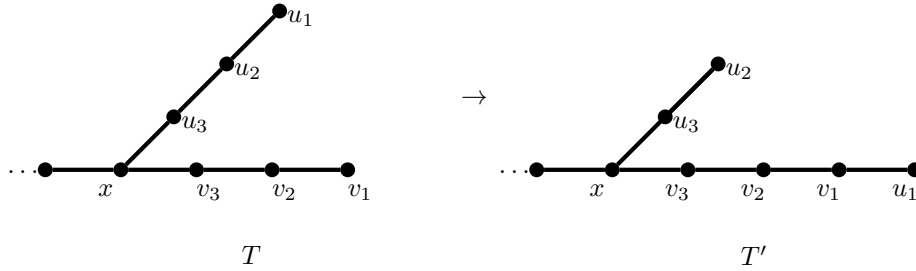


Figura 4.16:  $T'$  a partir de borrar la arista  $u_1u_2$  en  $T$  y agregar una nueva arista  $u_1v_1$ .

Así

$$R_\alpha(T) - R_\alpha(T') = (2^\alpha \cdot 2^\alpha + 2^\alpha \cdot 1^\alpha) - (+2^\alpha \cdot 1^\alpha + 2^\alpha \cdot 2^\alpha) = 0.$$

■

**Lema 4.5.6** Sea  $T$  un árbol, tal que cada vecino de una hoja tiene grado 2. Sea  $w$  un vértice de grado 2 que no está sobre un camino suspendido,  $u$  y  $v$  los vecinos de  $w$ . Sea  $T'$  el árbol obtenido a partir de  $T$  por medio de contraer las aristas  $uw$  y  $wv$  en un nuevo vértice  $x$ , y luego agregando un camino de tamaño 2 en el nuevo vértice  $x$ . Entonces,  $R_\alpha(T) < R_\alpha(T')$  para  $\alpha < 1$ .

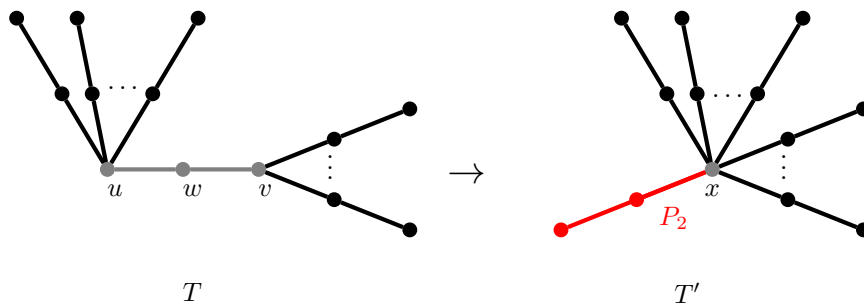


Figura 4.17:  $T'$  a partir de contraer las aristas  $uw$  y  $wv$  en  $T$  y agregar un camino  $P_2$ .

**Demostración:** Supongamos que  $d(u) = d$  y  $d(v) = t$ . Sea  $S_u$  la suma de los pesos de las aristas incidentes a  $u$  con excepción de  $wu$  y  $S_v$  la suma de los pesos de las aristas incidentes a  $v$  con excepción de  $wv$ . Ya que  $u$  cambia de tener grado  $d$  en  $T$  a tener grado  $d+t+1$ , sus vecinos, salvo  $w$ , (ahora vecinos de  $x$ ) tienen un aporte en el índice de Randić de  $T'$  de  $S_u \frac{(d+t-1)^\alpha}{d^\alpha}$ . Análogamente, el aporte de los vecinos de  $v$ , al índice de Randić de  $T'$  es  $S_v \frac{(d+t-1)^\alpha}{t^\alpha}$ . Así,

$$\begin{aligned}
 & R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
 = & S_u \left(1 - \frac{(d+t-1)^\alpha}{d^\alpha}\right) + S_v \left(1 - \frac{(d+t-1)^\alpha}{t^\alpha}\right) + 2^\alpha d^\alpha + 2^\alpha t^\alpha - 2^\alpha (d+t-1) - 2^\alpha.
 \end{aligned}$$

Notemos que  $S_u < (d-1)d^\alpha 2^\alpha$  y  $S_v < (t-1)t^\alpha 2^\alpha$ , entonces

$$\begin{aligned}
 & R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\
 \leq & (d-1)2^\alpha (d^\alpha - (d+t-1)^\alpha) + (t-1)2^\alpha (t^\alpha - (d+t-1)^\alpha) \\
 & + 2^\alpha (t^\alpha + d^\alpha - (d+t-1)^\alpha - 1) \\
 = & 2^\alpha (d^{\alpha+1} + t^{\alpha+1} - (d+t-1)^{\alpha+1} - 1).
 \end{aligned}$$

Sea

$$f(d, t) = d^{\alpha+1} + t^{\alpha+1} - (d+t-1)^{\alpha+1} - 1.$$

Ya que  $\frac{\partial f}{\partial d} = (\alpha+1)(d^\alpha - (d+t-1)^\alpha) < 0$ , de forma similar  $\frac{\partial f}{\partial t} < 0$ , y  $f(1, 1) = 0$ , tenemos que  $f(d, t) < 0$ . Así,  $R_\alpha(T) - R_\alpha(T')$ . ■

Con los lemas anteriores, tenemos las siguientes propiedades

**Propiedad 4.5.1** Sea  $T$  un árbol que tiene el máximo índice de Randić para  $\alpha < -1$ .

- (1) Todos los caminos suspendidos de  $T$  son de tamaño 2 con excepción de a lo más un camino de tamaño 3.



(2) Todo vértice de grado 2 está en un camino suspendido.

**Teorema 4.5.7** Para  $\alpha < -2$ , la estrella subdividida maximiza el índice de Randić.

**Demostración:** Sea  $T$  un árbol que maximiza el índice de Randić que no sea una estrella subdividida. Denotamos por  $D(T)$  el diámetro de  $T$ . Por la propiedad 4.5.1 tenemos que  $D(T) \geq 4$ . Si  $D(T) = 4$ , entonces  $T$  es una estrella subdividida. Si  $D(T) \geq 5$ , consideremos  $P = v_1v_2v_3 \dots v_{k-1}v_{k-1}v_k$  el camino más largo de  $T$ . y  $k \geq 6$ . Notemos que  $v_2$  y  $v_{k-1}$  deben ser de grado 2 por ser vecinos de una hoja. Además, como a lo más hay un camino suspendido de tamaño 3, y todos los demás deben ser de tamaño 2, no puede ser que  $v_3$  y  $v_{k-2}$  tengan al mismo tiempo grado 2. Sin pérdida de generalidad, supongamos  $d(v_{k-2}) = t > 2$ . Ya que  $T$  no es una estrella subdividida, uno de los vértices de entre  $v_3, \dots, v_{k-3}$  tiene grado mayor que 2. Ya que además todo vértice de tamaño 2 tiene que estar en un camino suspendido, esto implica que  $d(v_{k-3}) > 2$ . Sea  $d = d(v_{k-3})$  y  $u_1, u_2, \dots, u_{t-2}$  los vecinos de  $v_{k-2}$  distintos de  $v_{k-3}$  y  $v_{k-1}$ . Formaremos un nuevo árbol a partir de  $T$ , el cual se verá que tiene índice de Randić mayor que  $T$  contradiciendo la suposición de que  $T$  no es una estrella subdividida. Sea  $T'$  el árbol formado a partir de  $T$  al borrar las aristas  $v_{k-2}u_i$  y agregar las nuevas aristas  $v_{k-3}u_i$  para  $1 \leq i \leq t-2$ .

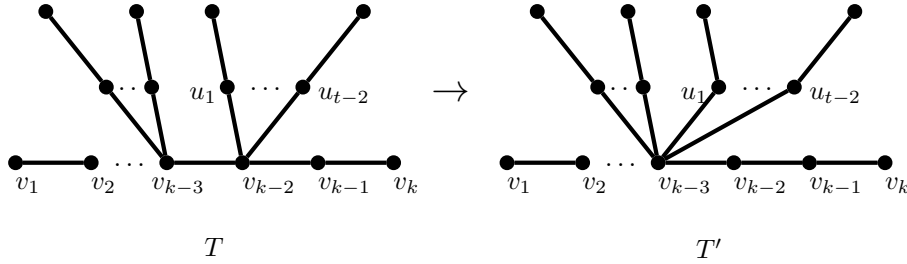


Figura 4.18:  $T'$  a partir  $T$  al borrar las aristas  $v_{k-2}u_i$  y agrega las aristas  $v_{k-3}u_i$ .

Sea  $S_d$  la suma de los pesos de las aristas incidentes a  $v_{k-3}$  distintas de  $v_{k-2}v_{k-3}$ . Luego,

$$\begin{aligned} & R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\ &= S_d \left(1 - \frac{(d+t-2)^\alpha}{d^\alpha}\right) + d^\alpha t^\alpha - 2^\alpha (t+d-2)^\alpha \\ &\quad + (t-2)(2^\alpha t^\alpha - 2^\alpha (d+t-2)^\alpha) + 2^\alpha t^\alpha - 4^\alpha \end{aligned}$$

Notando que  $S_d \geq (d-1)2^\alpha d^\alpha$ , tenemos que

$$\begin{aligned} & R_\alpha(T) - R_\alpha(T') \\ &\leq (d-1)2^\alpha (d^\alpha - (d+t-2)^\alpha) + d^\alpha t^\alpha - 4^\alpha + (t-1)2^\alpha (t^\alpha - (d+t-2)^\alpha) \\ &= 2^\alpha ((d-1)(d^\alpha - (d+t-2)^\alpha) + (t-1)(t^\alpha - (d+t-2)^\alpha)) + d^\alpha t^\alpha - 4^\alpha \\ &= 2^\alpha (d^{\alpha+1} + t^{\alpha+1} - d^\alpha - t^\alpha - (d+t-2)^{\alpha+1}) + d^\alpha t^\alpha - 4^\alpha. \end{aligned}$$

Si definimos

$$f(d, t) = 2^\alpha(d^{\alpha+1} + t^{\alpha+1} - d^\alpha - t^\alpha - (d+t-2)^{\alpha+1}) + d^\alpha t^\alpha - 4^\alpha.$$

Ahora, es suficiente probar que  $f(d, t) < 0$ , para  $\alpha \leq -2$  y  $d, t > 2$ . De hecho,

$$\frac{\partial f}{\partial d} = 2^\alpha((\alpha+1)d^\alpha - \alpha d^{\alpha-1} - (\alpha+1)(d+t-2)^\alpha) + \alpha t^\alpha d^{\alpha-1}$$

y

$$\frac{\partial \frac{\partial f}{\partial d}}{\partial t} = \alpha^2 t^{\alpha-1} d^{\alpha-1} - \alpha(\alpha+1)2^\alpha(d+t-2)^{\alpha-1}$$

como  $\alpha < -2$ , tenemos que  $0 < \alpha^2 < 2\alpha(\alpha+2)$  y ya que  $d, t > 2$ ,  $dt > 2(d+t-2)$ , con lo que tenemos  $0 < d^{\alpha-1}t^{\alpha-1} < 2^{\alpha-1}(d+t-2)^{\alpha-1}$  y por lo tanto  $\frac{\partial \frac{\partial f}{\partial d}}{\partial t} < 0$ . Ya que  $\frac{\partial f}{\partial d}(d, 2) = 0$ , tenemos  $\frac{\partial f}{\partial d} < 0$ , para  $t > 2$ . Además  $f(2, t) = 0$ , con lo que  $f(d, t) < 0$  para  $d, t > 2$ . ■

## Capítulo 5

# Índice de Wiener

### 5.1 Índice de Wiener

En la química matemática, el índice de Wiener fue introducido por Harry Wiener en [44] llamándolo “path number”. Para una gráfica  $G$ , este índice está definido como la suma de las distancias entre sus pares de vértices y es denotado por

$$W(G) = \sum_{u,v \in V(G)} d(u,v). \quad (5.1)$$

Wiener mostró que dicho índice está estrechamente relacionado con los puntos de ebullición de los alcanos. Los puntos de ebullición de compuesto orgánicos, así como otras de sus propiedades físicas que dependen del número, tipo y arreglo estructural de los átomos en las moléculas.

### 5.2 El índice de Wiener y relaciones químicas

En este capítulo describiremos algunas de los usos que tiene el Índice de Wiener en la química, en particular veremos su relación con los puntos de ebullición de las parafinas y el trabajo realizado en [44], donde fue introducido este índice por Wiener.

Dentro de los isómeros de las parafinas, donde el número y el tipo de átomos es constante se puede describir el punto de ebullición de acuerdo a la siguiente fórmula [44]:

$$t_B = aw + bp + c, \quad (5.2)$$

dónde  $a$ ,  $b$  y  $c$  son constantes para un grupo isométrico dado, y  $p$  y  $w$  son variables estructurales. La variable  $p$  recibe el nombre de número de polaridad y cuenta la cantidad de pares de átomos de carbono que están separados por tres enlaces carbono-carbono. Por otro lado, más tarde  $w$  fue llamado índice de Wiener al generalizarse para cualquier gráfica, siendo obtenido al sumar las distancias entre cada par de vértices. En el caso de árboles se puede calcular por un método breve el índice de Wiener sin contar directamente la distancia entre cada par de vértices. Este método consiste en calcular para cada aristas  $(u, v)$ , la cantidad de vértices más cercanos a  $u$  que de  $v$  y la cantidad de vértices más cercanos a  $v$  que a  $u$  (Esto puede verse como separar los vértices de la gráfica en

dos partes según de que lado de la arista  $u, v$  se encuentren y tomar el tamaño de estos dos conjuntos), luego multiplicar estos valores y sumar el valor obtenido sobre todas las aristas. La demostración y el uso de este método se trabajan más adelante en el capítulo. Por lo pronto, se muestra solamente un ejemplo en la siguiente imagen:

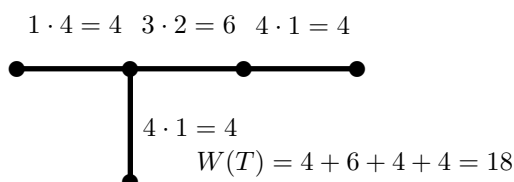


Figura 5.1: Ejemplo de método para calcular el índice de Wiener en árboles.

Volviendo a la forma que tiene el punto de ebullición de un isómeros, la fórmula para (5.2) se puede simplificar por medio de un cambio de notación empleado por Taylor, Pignoco y Rossini que consiste en considerar a  $t_0$  el punto de ebullición del miembro de cadena recta del grupo de isómeros y sus variables estructurales  $w_0$  y  $p_0$ . Consideramos entonces las diferencias  $\Delta_t = t_0 - t$ ,  $\Delta_w = w_0 - w$  y  $\Delta_p = p_0 - p$ .

Así, para un isómero del mismo grupo (misma cantidad de carbonos), con punto de ebullición  $t$  y variables estructurales  $w, p$  la ecuación anterior se transforma en

$$\Delta_t = a\Delta_w + b\Delta_p. \quad (5.3)$$

En el Proyecto Investigación 44 del A.P.I., usando los datos sobre los puntos de ebullición y el método de mínimos cuadrado, llegaron a que para un compuesto con  $n$  átomos de carbono se cumple

$$\Delta_t = \frac{k}{n^2}\Delta_w + b\Delta_p. \quad (5.4)$$

Más aún,

$$\Delta_t = \frac{98}{n^2}\Delta_w + 5.5\Delta_p. \quad (5.5)$$

Otro dato que se tiene, por la ecuación de Egllof, es que con

$$t_0 = 745.42 \log(n + 4.4) - 689.4$$

se pueden reproducir los datos dentro dentro de sus límites experimentales. Para las parafinas normales (parafinas sin ramificaciones), sus valores estructurales están dados por  $w_0 = \frac{n^3-n}{6}$  (Ejemplo 5.3.1) y  $p_0 = n - 3$ .

A continuación los valores de referencia para las parafinas normales desde  $n$ -butano hasta  $n$ -dodecano.

Valores de referencia de las parafinas normales				
Num. Carbonos	Compuesto	$t_0$	$w_0$	$p_0$
4	n-Butano	-0.5	10	1
5	n-Petano	36.1	20	2
6	n-Hexano	68.7	35	3
7	n-Heptano	98.4	56	4
8	n-Octano	125.7	84	5
9	n-Nonano	150.8	120	6
10	Decano	174.0	165	7
11	Undecano	195.8	220	8
12	Dodecano	216.2	286	9

Tabla 5.1: Valores estructurales de las parafinas normales.

En [44] encontraron el punto de ebullición teórico usando la fórmula (5.5) y lo compararon con el punto de ebullición observado experimentalmente en el Proyecto de Investigación 44 del A.P.I. En las siguientes tablas se presenta esta información junto con la desviación que tuvo el valor calculado de  $\Delta t$  con el valor observado experimentalmente. Estos datos se encuentran en [44].

Puntos de ebullición de los alcanos con 4, 5 y 6 carbonos					
Compuesto	$\Delta t$ Obs.	$\Delta w$	$\Delta p$	$\Delta t$ Cal.	Desviacion
n-Butanon	0	0	0	0	-0.0
2-Meltipropano	11.2	1	1	11.6	-0.4
n-Pentano	0	0	0	0	0
2-Meltibutano	8.2	2	0	7.9	-0.3
n-Hexano	0	0	0	0	0
2.3-Dimeltibutano	10.8	6	-1	10.8	0

Tabla 5.2:  $\Delta t$  calculado y  $\Delta t$  observado en alcanos con 4, 5, y 6 carbonos.

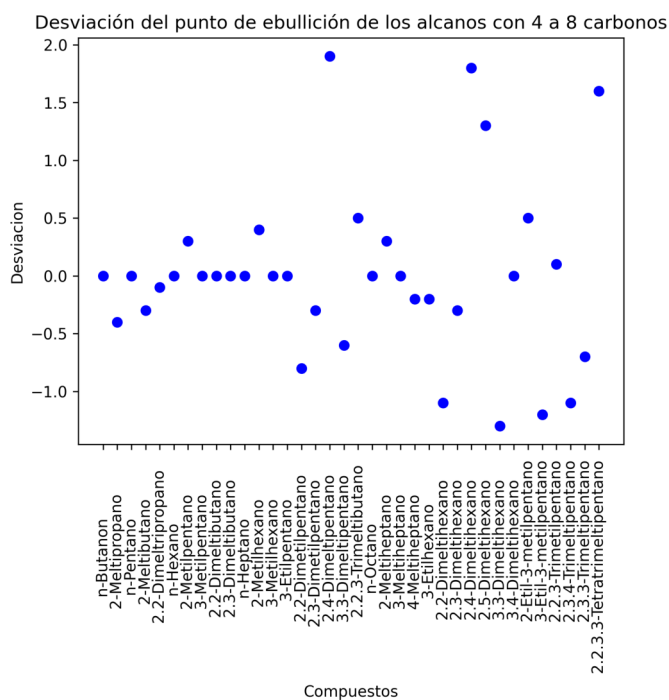
Puntos de ebullición de los alcanos con 7 carbonos					
Compuesto	$\Delta t$ Obs.	$\Delta w$	$\Delta p$	$\Delta t$ Cal.	Desviacion
2-Metilhexano	8.4	4	0	8	0.4
3-Metilhexano	6.5	6	-1	6.5	0
3-Etilpentano	5.0	8	-2	5.0	0
2.2-Dimetilpentano	19.2	10	0	20.0	-0.8
2.3-Dimetilpentano	8.7	10	-2	9.0	-0.3
2.4-Dimeltipentano	17.9	8	0	16.0	1.9
3.3-Dimeltipentano	12.4	12	-2	13.0	-0.6
2.2.3-Trimeltibutano	17.5	14	-2	17.0	0.5

Tabla 5.3:  $\Delta t$  calculado y  $\Delta t$  observado en alcanos con 7 carbonos.

Puntos de ebullición de los alcanos con 8 carbonos					
Compuesto	$\Delta t$ Obs.	$\Delta w$	$\Delta p$	$\Delta t$ Cal.	Desviacion
n-Octano	0	0	0	0	0
2-Meltiheptano	8.0	5	0	7.7	0.3
3-Meltiheptano	6.7	6	-1	6.7	0
4-Meltiheptano	8.0	9	-1	8.2	-0.2
3-Etilhexano	7.1	12	-2	7.3	-0.2
2.2-Dimeltihexano	18.8	13	0	19.9	-1.1
2.3-Dimeltihexano	10.1	14	-2	10.4	-0.3
2.4-Dimeltihexano	16.2	13	-1	14.4	1.8
2.5-Dimeltihexano	16.6	10	0	15.3	1.3
3.3-Dimeltihexano	13.7	17	-2	15.0	-1.3
3.4-Dimeltihexano	8.0	16	-3	8.0	0.0
2-Etil-3-metilpentano	10.0	17	-3	9.5	0.5
3-Etil-3-metilpentano	7.4	20	-4	8.6	-1.2
2.2.3-Trimetilpentano	15.8	21	-3	15.7	0.1
2.3.4-Trimetilpentano	26.4	18	0	27.5	-1.1
2.3.3-Trimetilpentano	10.9	22	4	11.6	-0.7
2.2.3.3-Tetratrimetilpentano	19.4	26	-4	17.8	1.6

Tabla 5.4:  $\Delta t$  calculado y  $\Delta t$  observado en alcanos con 8 carbonos.

De forma ilustrativa presentamos la desviación obtenida dentro de los alcanos que tienen entre 4 a 8 carbonos.



En [44] aplicaron el mismo método para los alcanos de 9 y 10 carbonos con los datos de las tablas del proyecto 44 del A.P.I. salvo 6 alcanos de los que no disponían información experimental. Presentamos las tablas con los puntos de ebullición de estos compuestos y sus variables estructurales. Datos en [44].

Puntos de ebullición de los alcanos con 9 carbonos					
Compuesto	$t$ Obs.	$\Delta w$	$\Delta p$	$t$ Cal.	Desviacion
nonano	150.8	0	0	150.8	0
2-Metiloctano	143.3	6	0	143.5	0.2
3-Metiloctano	144.2	10	-1	144.2	0
4-Metiloctano	142.5	12	-1	141.8	-0.7
3-Etilpentano	143.0	16	-2	142.5	-0.5
4-Etilpentano	141.0	18	-2	140.0	-1.2
2.2-Dimetilheptano	130.5	16	0	131.4	0.9
2.3-Dimetilheptano	140.5	18	-2	140.0	-0.5
2.4-Dimetilheptano	133.0	18	.1	134.5	1.5
2.5-Dimetilheptano	136.0	16	-1	136.9	0.9
2.6-Dimetilheptano	135.3	12	0	136.3	1.1
3.3-Dimetilheptano	137.3	22	-2	135.2	-2.1
3.4-Dimetilheptano	140.5	22	-3	140.7	0.2
3.5-Dimetilheptano	*	20	-2	137.6	*
4.4-Dimetilheptano	*	24	-2	132.8	*
3-Etil-2-metilhexano	139.0	24	-3	138.3	-0.7
4-Etil-2-metilhexano	*	22	-3	135.2	*
3-Etil-3-metilhexano	*	28	-4	139.0	*
4-Etil-3-metilhexano	*	26	-4	141.4	*
2.2.3-Trimetilhexano	133.4	28	-3	133.4	0
2.2.4-Trimetilhexano	126.5	26	-1	125.8	-1.7
2.2.5-Trimetilhexano	124.1	22	0	124.2	0.1
2.3.3-Trimetilhexano	138.0	30	-4	136.5	-1.5
2.3.4-Trimetilhexano	*	28	-4	139.0	*
2.3.5-Trimetilhexano	131.4	24	-2	132.8	1.4
2.4.4-Trimetilhexano	131.0	28	-2	127.9	-3.1
3.3.4-Trimetilhexano	139.0	32	-5	139.6	0.6
3.3-Dietilpentano	146.5	32	-6	145.1	-1.4
3-Etil-2.2-Dimetilpentano	133.8	32	-4	134.1	0.3
3-Etil-2.3-Dimetilpentano	142.0	34	-6	142.7	0.7
3-Etil-2.4-Dimetilpentano	136.7	30	-4	136.5	-0.2
2.2.3.3-Tetrametilpentano	140.2	38	-6	137.8	-2.4
2.2.3.4-Tetrametilpentano	133.0	34	-4	131.7	-1.3
2.2.4.4-Tetrametilpentano	122.3	32	0	112.1	-10.2
2.3.3.4-Tetrametilpentano	141.5	36	-6	140.2	-1.3

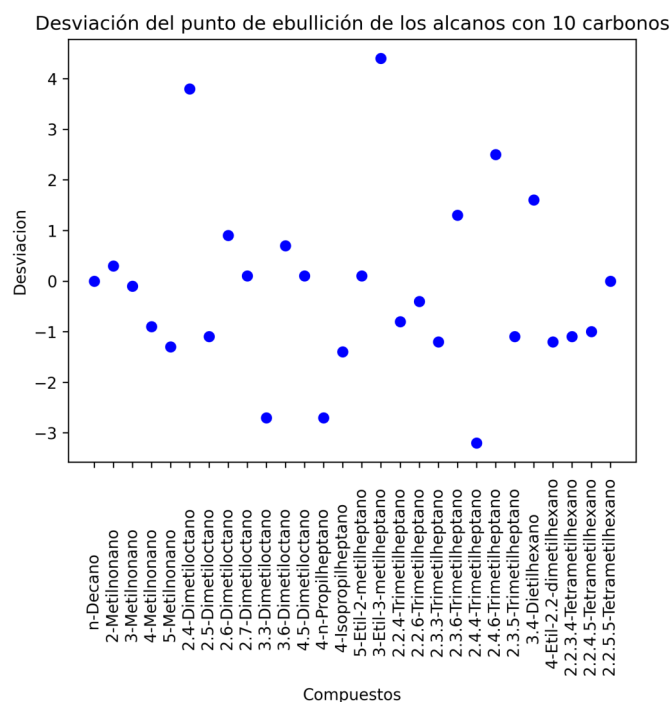
Tabla 5.5:  $t$  calculado y  $t$  observado en alcanos con 9 carbonos.

Puntos de ebullición de los alcanos con 10 carbonos					
Compuesto	$t$ Obs.	$\Delta w$	$\Delta p$	$t$ Cal.	Desviacion
n-Decano	174.0	0	0	174.0	0
2-Metilnonano	166.8	7	0	167.1	0.3
3-Metilnonano	167.8	12	-1	167.7	-0.1
4-Metilnonano	165.7	15	-1	164.8	-0.9
5-Metilnonano	165.1	16	-1	163.8	-1.3
2.4-Dimetiloctano	153.2	23	-1	157.0	3.8
2.5-Dimetiloctano	159.0	22	-1	157.9	-1.1
2.6-Dimetiloctano	160.0	19	-1	160.9	0.9
2.7-Dimetiloctano	160.2	14	0	160.3	0.1
3.3-Dimetiloctano	161.2	27	-2	158.5	-2.7
3.6-Dimetiloctano	160.8	24	-2	161.5	0.7
4.5-Dimetiloctano	161.0	30	-3	161.1	0.1
4-n-Propilheptano	161.7	27	-2	158.5	-2.7
4-Isopropilheptano	158.6	34	-3	157.2	-1.4
5-Etil-2-metilheptano	158.4	27	-2	158.5	0.1
3-Etil-3-metilheptano	156.3	36	-4	160.7	4.4
2.2.4-Trimetilheptano	147.0	34	-1	146.2	-0.8
2.2.6-Trimetilheptano	148.9	26	0	148.5	-0.4
2.3.3-Trimetilheptano	160.0	38	-4	158.8	-1.2
2.3.6-Trimetilheptano	155.3	29	-2	156.6	1.3
2.4.4-Trimetilheptano	151.0	38	-2	147.8	-3.2
2.4.6-Trimetilheptano	147.6	30	-1	150.1	2.5
2.3.5-Trimetilheptano	152.8	34	-2	151.7	-1.1
3.4-Dietilhexano	160.7	40	-3	162.3	1.6
4-Etil-2.2-dimetilhexano	148.0	39	-2	146.8	-1.2
2.2.3.4-Tetrametilhexano	156.5	47	-3	155.4	-1.1
2.2.4.5-Tetrametilhexano	145.8	41	-2	144.8	-1.0
2.2.5.5-Tetrametilhexano	136.8	38	0	136.8	0

Tabla 5.6:  $t$  calculado y  $t$  observado en alcanos con 10 carbonos.

También se presenta la desviación del punto de ebullición para estos compuestos.





Una forma de entender como es que el índice de Wiener se relaciona con el punto de ebullición, en este caso de las parafinas, es notando que para un número fijo de átomos  $n$ , si el índice de Wiener es menor, entonces lo es la distancia promedio entre los átomos, lo que lleva a tener moléculas más compactas, por lo que disminuye la colisión entre moléculas y la cantidad de energía que debe ser compensada por estos choques. Esto resulta en una menor cantidad de calor necesaria para llegar alcanzar el punto de ebullición.

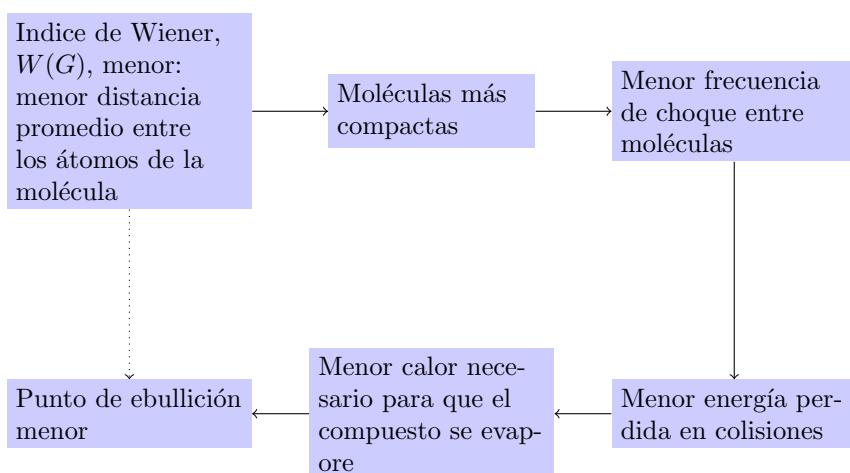


Figura 5.2: Índice de Wiener y su relación con el punto de ebullición.

### 5.3 Ejemplos

A fin de familiarizarnos más con el índice de Wiener, en esta sección calculamos el índice de Wiener de varias gráficas. Cuando sea conveniente usaremos el método para calcular el índice de Wiener para árboles (Teorema 5.4.1) que fue ejemplificado en la sección anterior. A continuación se muestran algunos valores que toma el índice de Wiener en distintas gráficas.

**Ejemplo 5.3.1** *El camino  $P_n$ . Para calcular  $W(P_n)$  consideremos sus aristas numeradas,  $e_1, e_2, \dots, e_{(n-1)}$ . Luego, para cada arista  $e_i$  hay  $i$  vértices a su derecha y  $n - i$  vértices a su izquierda. Por el método para calcular el índice de Wiener en árboles (Teorema 5.4.1) se sigue que*

$$\begin{aligned} W(P_n) &= \sum_{i=1}^{n-1} i(n-i) \\ &= n \sum_{i=1}^{n-1} i - \sum_{i=1}^{n-1} i^2 \\ &= n \frac{(n-1)n}{2} - \frac{(n-1)(n)(2(n-1)+1)}{6} \\ &= \frac{(n-1)n}{6} (3n-2n+1) \\ &= \frac{(n-1)(n)(n+1)}{6} \\ &= \frac{n^3 - n}{6}. \end{aligned}$$

**Ejemplo 5.3.2** *La estrella  $S_n$ . Cada una de las aristas de  $S_n$  tiene un vértice de un lado y  $n-1$  del otro lado. Usando el método del Teorema 5.4.1 al sumar sobre las  $n-1$  aristas tenemos que*

$$W(S_n) = (n-1)^2.$$

**Ejemplo 5.3.3** *La gráfica completa  $K_n$ . Para cada uno de los  $\frac{n(n-1)}{2}$  pares de vértices  $v_1, v_2 \in V(K_n)$  tenemos que  $d(v_1, v_2) = 1$ . Así*

$$W(K_n) = \frac{n(n-1)}{2}.$$

**Ejemplo 5.3.4** *La gráfica bipartita completa  $K_{n,m}$ . Sean  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de  $n$  y  $m$  vértices, respectivamente, que definen a  $K_{n,m}$ . Para cada par de vértices de  $K_{n,m}$  podemos considerar tres casos distintos:*

- i)  $v_1, v_2 \in V_1$ .
- ii)  $v_1, v_2 \in V_2$ .
- iii)  $v_1 \in V_1$  y  $v_2 \in V_2$ .

*En los casos i) y ii) la distancia entre el par de vértices es  $d(v_1, v_2) = 2$ , para el caso iii)  $d(v_1, v_2) = 1$ . Con esto*

$$\begin{aligned} W(K_{n,m}) &= 2 \frac{n(n-1)}{2} + 2 \frac{m(m-1)}{2} + nm \\ &= n(n-1) + m(m-1) + nm. \end{aligned}$$

**Ejemplo 5.3.5** El hipercubo  $H_n$ . Consideremos a los vértices de  $H_n$  etiquetados por los elementos de  $\{0,1\}^n$ , donde dos vértice  $u = (a_1, \dots, a_n)$  y  $v = (b_1, \dots, b_n)$ ,  $a_i, b_i \in \{0,1\}$ , son vecinos si  $a_i \neq b_i$  para algún  $i$  y  $a_j = b_j$  para  $j \neq i$ . Podemos ver que la distancia entre dos vértices  $u = (a_1, \dots, a_n)$  y  $v = (b_1, \dots, b_n)$ ,  $a_i, b_i \in \{0,1\}$  está dada por la cantidad  $i$ 's tal que  $a_i \neq b_i$ . Luego, la cantidad de vértices que están a distancia  $d$  de un vértice fijo se pueden calcular al fijar las  $d$  entradas que serán distintas a dicho vértice. Así la cantidad de pares de vértices a distancia  $d$  está dada por

$$\frac{1}{2} \sum_{v \in V(H_n)} \binom{n}{d} = 2^{n-1} \binom{n}{d}.$$

De esta forma

$$\begin{aligned} W(H_n) &= \sum_{d=0}^n d \cdot 2^{n-1} \binom{n}{d} = 2^{n-1} \sum_{d=0}^n d \binom{n}{d} \\ &= 2^{n-1} n 2^{n-1} = n 2^n. \end{aligned}$$

Índice de Wiener			
# de vértices (n)	$P_n$	$S_n$	$K_n$
2	1	1	1
3	4	4	3
4	10	9	6
5	20	16	10
6	35	25	16
7	56	36	21
8	84	49	28
9	120	54	36
10	165	81	45

## 5.4 El Índice de Wiener en Árboles

En esta sección se estudiará el índice de Wiener en árboles. Se muestra un método para su cálculo en este tipo de gráficas así como los árboles que hacen que el índice de Wiener tomen su valor máximo.

**Teorema 5.4.1 (Cálculo del índice de Wiener en árboles)** Sea  $T$  un árbol, el índice de Wiener de  $T$  se puede calcular por la siguiente fórmula:

$$W(T) = \sum_{a \in A} u_a v_a,$$

donde  $u_a$  y  $v_a$  denotan la cantidad de vértices a la izquierda de la arista  $a$  y a la derecha respectivamente.

**Demostración:** Sea  $E = E(T)$  el conjunto de aristas del árbol  $T$  y  $V = V(T)$  el conjunto de vértices de  $T$ . Para  $u, v \in V$ , denotemos por  $c(u, v)$  al camino que une a  $u$  y  $v$ . El índice de Wiener está dado por

$$W(T) = \sum_{u,v \in V} d(u,v).$$

Sumando sobre las aristas por las que pasa el camino que une a dos vértices y posteriormente intercambiando el orden de la suma obtenemos:

$$\begin{aligned} W(T) &= \sum_{u,v \in V} d(u,v) \\ &= \sum_{u,v \in V} \sum_{\{e \in E \mid e \in c(u,v)\}} 1 \\ &= \sum_{e \in E} \sum_{\{u,v \in V \mid e \in c(u,v)\}} 1 \\ &= \sum_{e \in E} \#\{\{u,v\} \mid e \in c(u,v)\} \\ &= \sum_{e \in E} u_e v_e. \end{aligned}$$

■

**Corolario 5.4.1** *En el caso de árboles el índice de Wiener y el índice de Szeged coinciden.*

Resulta interesante ver cuales árboles son los que maximizan o minimizan un índice topológico. A continuación se muestra cuales árboles minimizan y maximizan el índice de Wiener.

**Teorema 5.4.2** *El árbol que minimiza el índice de Wiener es la estrella,  $S_n$ .*

**Demostracion:** Sea  $G = (V, A)$  un árbol, haciendo uso del método para el cálculo del índice de Wiener para árboles (Teorema 5.4.1)

$$\begin{aligned} W(G) &= \sum_{a \in A} u_a v_a \\ &= \sum_{a \in A} (u_a)(n - u_a) \\ &= \sum_{a \in A} nu_a - u_a^2 \end{aligned}$$

Como  $u_a \in \{1, 2, \dots, n-1\}$  Y  $nu_a - u_a^2$  es una parábola, el menor valor de cada sumando se obtiene cuando  $u_a = 1$  o  $u_a = n-1$ . Por lo que

$$w(G) \geq |A|(n-1) = (n-1)^2 \quad (5.6)$$

Luego,  $S_n$ , cumple que toda arista tiene de un lado un vértice y del otro  $n-1$ . Por lo tanto,  $S(n)$  minimiza a  $w(G)$ . ■

**Teorema 5.4.3** *De las gráficas conexas con  $n$  vértices la que maximiza el índice de Wiener es el camino formado por  $n$  vértices consecutivos,  $P_n$ .*

**Demostración:**

Notemos que si tenemos una gráfica con un ciclo y a ésta le retiramos alguna arista de dicho ciclo, entonces, la longitud entre caminos de vértices disminuye o se mantiene. Por lo que podemos considerar solamente árboles. Supongamos que  $T$  es un árbol con  $n$  vértices que maximiza el índice de Wiener  $W(T)$  y  $T \neq P_n$ . Luego,

$$W(T) = \sum_{i=1}^n k_i(n - k_i) = \sum_{i=1}^n nk_i - k_i^2. \tag{5.7}$$

Sean  $x$  y  $y$  dos hojas de  $T$ . Ya que  $T \neq P_n$  existe otra hoja  $v$  de  $T$  distinta de  $x$  y  $y$ . Llamaremos rama de una hoja  $v$  al máximo camino  $Ram(v)$  de  $T$  tal que:

1.  $v \in Ram(v)$ .
2.  $T \setminus Ram(v)$  es conexo.
3.  $Ram(v)$  contiene solamente una hoja de  $T$ .

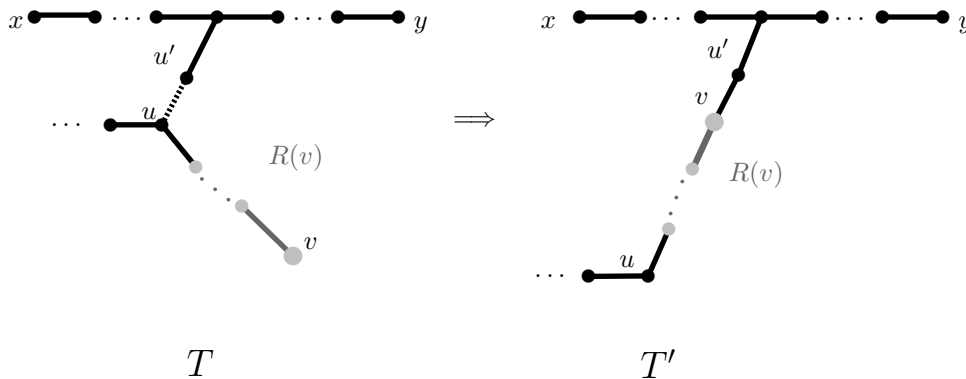
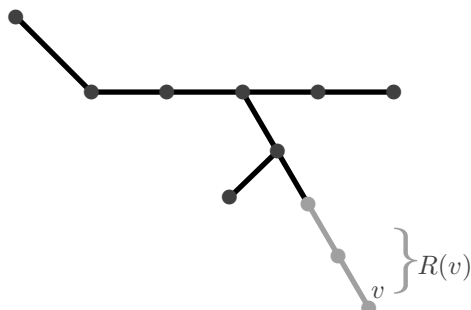


Figura 5.3: Rama de  $v$ .

Sea  $u$  el vértice donde  $Ram(v)$  se une a  $T$  y  $u'$  el vértice vecino de  $u$  más cercano a  $x$ . Consideremos ahora el árbol  $T'$  formado al borrar la arista  $uu'$  y agregar la arista  $vv'$

Figura 5.4: Formación de  $T'$  a partir de  $T$ .

De esta forma las aristas que no pertenecen a  $Ram(v)$  siguen aportando el mismo valor  $n(n - k_i)$  en  $W(T')$  que en  $W(T)$ . Con lo que la diferencia entre el índice de Wiener de  $T'$  y  $T$  sólo depende del aporte que hace  $Ram(z)$  en cada árbol. Si  $l = |Ram(z)|$  y  $k = |T_x|$  donde  $T_x$  es el árbol resultante de borrar la arista  $uu'$  y tomar la componente que contiene a  $x$ , el aporte de  $Ram(Z)$  a  $W(T)$  es

$$(n + 1) + 2(n - 2) + \cdots + l(n - l) = \sum_{i=1}^l i(n - i) \quad (5.8)$$

y el aporte de  $Ram(Z)$  en  $W(T')$  es

$$\begin{aligned} & (k + 1)(n - (k + 1)) + (k + 2)(n - (k + 2)) + \cdots + (k + l)(n - (k + l)) \\ &= (n - 1) + 2(n - 2) + \cdots + l(n - l) \\ & \quad + [k(n - k - 1) - k] + [k(n - k - 2) - 2k] + \cdots + [k(n - k - l) - lk] \\ &= (n - 1) + 2(n - 2) + \cdots + l(n - l) \\ & \quad + [k(n - k) - 2k] + [k(n - k) - 4k] + \cdots + [k(n - k) - 2lk] \\ &= \sum_{i=1}^l i(n - i) + lk(n - k) - 2k \sum_{i=1}^l i \\ &= \sum_{i=1}^l i(n - i) + lk(n - k) - kl(l + 1) \\ &= \sum_{i=1}^l i(n - i) + lk(n - k - (l + 1)). \end{aligned}$$

Entonces

$$W(T') - W(T) = lk(n - k - (l + 1)). \quad (5.9)$$

Notemos que  $T \setminus T_x$  tiene  $n - k$  vértices entre ellos a los vértices de  $Ram(z)$  y a  $u$ . Además, en el caso de que  $y \notin T_x$ , entonces  $T \setminus T_x$  también contiene a  $y$ . En caso contrario  $u$  no se encuentra sobre el camino entre  $x$  y  $y$ , por la definición de rama. Esto implica que existe otro vértice vecino de  $u$  distinto de  $u'$  que no pertenece a  $Ram(z)$ . En ambos casos

$$\begin{aligned} |T \setminus T_x| &\geq |Ram(z)| + 2 \\ n - k &\geq l + 2 \\ n - k &> l + 1. \end{aligned}$$

Con esto tenemos que

$$W(T') - W(T) = lk(n - k - (l + 1)) > 0.$$

Por lo tanto  $T$  no era maximal. ■





## Capítulo 6

# Índice de Estrada

En este capítulo presentamos el índice de Estrada. En la primera sección se plantean los inicios de este índice y su relación química. Después damos algunos ejemplos y finalizamos con algunas cotas interesantes. Dentro de las cotas mostradas se hacen dos correcciones, una pequeña corrección en la demostración de de la Peña que sin más inconveniente mantiene el mismo resultado y otra en la demostración de Jian-ping Liu y Bo-lian Liu en la que no fue posible arreglar la prueba para mantener el mismo resultado, quedando este como conjetura. Sin embargo, al tratar de evadir el paso incorrecto en la demostración se obtuvo una nueva cota.

En la teoría de gráficas química el índice de Estrada fue introducido para caracterizar el grado de doblamiento de una proteína por Ernesto Estrada en 2000 [18] Y primeramente nombrado índice de Estrada en el 2007 por de la Peña [14]. El índice de Estrada está definido por la suma de la exponencial de los valores propios de la gráfica.

$$EE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i} \quad (6.1)$$

Esto es la traza de la exponencial de la matriz de adyacencia.

$$\sum_{i=1}^n e^{\lambda_i} = \sum_{i=1}^n (e^A)_{ii} = \text{Tr}(e^A)$$

El índice de Estrada también puede escribirse en términos de los momentos espectrales  $M_k$ .

$$\begin{aligned} EE(G) &= \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_i^k}{k!} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} M_k. \end{aligned}$$

Ya que  $M_k$  denota la cantidad de caminos cerrados de tamaño  $k$ , el índice de Estrada puede verse como una suma ponderada de los caminos cerrados que da menor peso a los caminos más largos [25]. De aquí se sigue que para toda

gráfica  $G$  con  $n$  vértices,

$$EE(\overline{K}_n) \leq EE(G) \leq EE(K_n).$$

Este índice tiene una relación cercana con la energía de una gráfica, donde la energía de una gráfica se define como

$$\mathcal{E}(G) = \sum_i^n |\lambda_i|. \quad (6.2)$$

## 6.1 Relación Química

Cuando Estrada introdujo su índice, fue usado para estudiar el doblamiento de las proteínas. Es importante mencionar antes de dar la motivación química, que el índice que define en su artículo original está basado en una matriz  $M$ , que por una parte no se calcula directamente a partir de una gráfica molecular, sino de una gráfica auxiliar  $H = L^3(G)$ . Además,  $M$  no es la matriz de adyacencia de  $H$ . A pesar de esto, la idea de ponderar los momentos espectrales por  $1/k!$  es útil para cualquier matriz asociada a una gráfica que nos interese y en particular para matrices de adyacencia, que es donde más se ha estudiado este índice. La forma en la que Estrada introdujo su índice consistía en tomar  $G$ , la gráfica química de un compuesto, y formar una nueva gráfica  $L(G)$ , donde los vértices de  $L(G)$  corresponden a cada una de las aristas de  $G$  y dos vértices de  $L(G)$  son adyacentes si las aristas correspondientes de  $G$  comparten un vértice. Si numeramos las aristas de  $G$  del 1 al  $m$ , las aristas de  $L(G)$  pueden ser etiquetadas como pares de números  $(x, y) \in [m] \times [m]$  y así cada vértice de  $L^2(G)$  representa un par de aristas de la gráfica original  $G$  unidas por un vértice que a su vez está relacionado con cada uno de los ángulos planos de la molécula. Al volver a repetir este procedimiento se puede ver que los vértices de  $L^3(G)$  representan pares de ángulos planos que comparten una arista. Cada uno de estos pares representan un ángulo diedral de la molécula. A pesar de que muchas gráficas al aplicarles  $L$  resultan en una nueva gráfica con una cantidad mayor de vértices como en la figure 6.1, este no siempre es el caso. Por ejemplo, para el ciclo  $C_n$  la cantidad de vértices se mantiene y para el camino  $P_n$  disminuye. Para introducir la información sobre la estructura 3D de dichos ángulos Estrada propuso considerar la matriz  $M = A(L^3(G)) + \Delta$ , donde  $A(L^3(G))$  es la matriz de incidencia de  $L^3(G)$  y  $\Delta$  la matriz diagonal con entradas igual al coseno de cada uno de los ángulos diedrales de la molécula. Después consideraron el vector de los momentos espectrales  $M_k$  normalizados por  $k!$ . Para evitar una selección arbitraria en la cantidad de elementos de dicho vector, se consideró la suma de todos definiendo de esta manera el índice de Estrada  $EE(G) = Tr(e^M)$ .

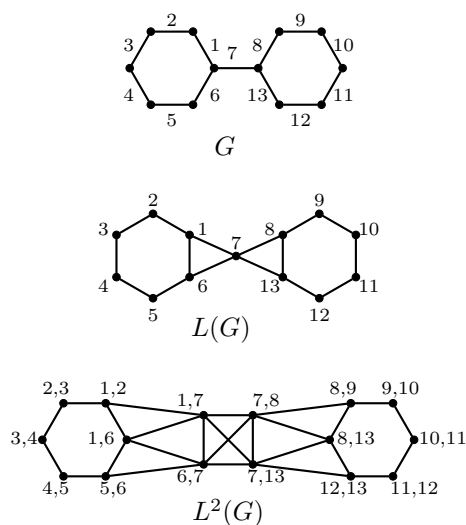


Figura 6.1: Grafica molecular  $G$ , transformaciones  $L(G)$ , y  $L^2(G)$  del bifenilo( $C_{12}H_{10}$ ).

## 6.2 Ejemplos

A continuación se muestran algunos valores del índice de Estrada para algunas gráficas.

**Ejemplo 6.2.1** Ya que  $K_n$  tiene como valores propios a  $n-1$  con multiplicidad uno y  $-1$  con multiplicidad  $n-1$ , tenemos que

$$EE(K_n) = e^{n-1} + (n-1)e^{-1}.$$

**Ejemplo 6.2.2** El espectro de la estrella  $S_n$  está formado por los valores propios  $\sqrt{n-1}$  con multiplicidad uno,  $-\sqrt{n-1}$  con multiplicidad uno y  $0$  con multiplicidad  $n-2$ . De esta forma

$$EE(S_n) = e^{-\sqrt{n-1}} + (n-2) + e^{\sqrt{n-1}}.$$

**Ejemplo 6.2.3** El espectro del ciclo  $C_n$  es

$$S(C_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right) : j \in 0, 1, \dots, n-1 \right\}.$$

Así, el índice de estrada de  $C_n$  es

$$EE(C_n) = \sum_{j=0}^{n-1} \exp\left[2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right].$$

**Ejemplo 6.2.4** Para el camino  $P_n$ , tenemos su espectro

$$S(P_n) = \left\{ 2\cos\left(\frac{\pi j}{n+1}\right) : j \in 1, 2, \dots, n \right\}.$$

Por tanto, su índice de Estrada es

$$EE(P_n) = \sum_{j=1}^n \exp \left[ 2 \cos \left( \frac{\pi j}{n+1} \right) \right].$$

**Ejemplo 6.2.5** Para el hipercubo  $H_n$ , sus valores propios son  $-n + 2k$  con multiplicidad  $\binom{n}{k}$ . Por lo tanto su índice de Estrada está dado por

$$\begin{aligned} EE(H_n) &= \sum_{k=0}^n e^{2k-n} \binom{n}{k} \\ &= e^{-n} \sum_{k=0}^n (e^2)^k \binom{n}{k} \\ &= e^{-n} (e^2 + 1)^n = \left( e + \frac{1}{e} \right)^n. \end{aligned}$$

### 6.3 Desigualdades

Primeramente mencionamos la relación que guardan el índice de Estrada de una gráfica y el de una de sus subgráficas.

**Teorema 6.3.1** Dada una gráfica  $G$  y una subgráfica  $G'$  de  $G$  se tiene que

$$EE(G') \leq EE(G)$$

**Demostración:** Se sigue del Teorema de entrelazamiento de Cauchy 2.1.1

■

En [14] demuestran que

$$\sqrt{n^2 + 4m + 8t} \leq EE(G) \leq n - 1 + e^{\sqrt{2m}},$$

donde  $t$  es el número de triángulos de  $G$ . Considerando el valor que toman los primeros momentos espectrales de una gráfica pueden conseguirse mejores cotas superiores como inferiores, por ejemplo la siguiente cota [36]

**Teorema 6.3.2** Sea  $G$  una  $(n - m)$ -gráfica con  $m \neq 0$  con  $t$  el número de triángulos, se tiene que:

$$\sqrt{n^2 + \left(5 + \frac{1}{3}\right)m + 8t} < EE(G).$$

**Demostración:** Recordemos que

$$EE(G) = \sum_{i=1}^n e^{\lambda_i}. \quad (6.3)$$

Así

$$EE(G)^2 = \sum_{i=1}^n e^{2\lambda_i} + \sum_{i \neq j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j}.$$

Usando la desigualdad entre la media aritmética y la media geométrica en el segundo término obtenemos

$$\begin{aligned}
\sum_{i \neq j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} &\geq n(n-1) \left( \prod_{i \neq j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} \right)^{\frac{1}{n(n-1)}} \\
&= n(n-1) \left( \prod_{i < j} e^{\lambda_i} e^{\lambda_j} \right)^{\frac{2}{n(n-1)}} \\
&= n(n-1) \left[ \left( \prod_{i=1}^n e^{\lambda_i} \right)^{n-1} \right]^{\frac{2}{n(n-1)}} \\
&= n(n-1) \left( e^{\sum_{i=1}^n \lambda_i} \right)^{\frac{2}{n}} \\
&= n(n-1) \left( e^{M_1} \right)^{\frac{2}{n}} \\
&= n(n-1) \\
&= n^2 - n,
\end{aligned}$$

donde  $M_1$  es el primer momento espectral de  $G$ . Por otro lado, usando la expansión en serie de potencias de  $e^{2\lambda_i}$  podemos ver que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^n e^{2\lambda_i} &= \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} \\
&= \sum_{i=1}^n \lambda_i^0 + \sum_{i=1}^n 2\lambda_i + \sum_{i=1}^n \frac{4}{2!} \lambda_i^2 + \sum_{i=1}^n \frac{8}{3!} \lambda_i^3 + \sum_{i=1}^n \frac{16}{4!} \lambda_i^4 + \sum_{i=1}^n \sum_{k=5}^{\infty} \frac{(2\lambda_i)^k}{k!} \\
&= M_0 + 2M_1 + 2M_2 + \frac{4}{3}M_3 + \frac{2}{3}M_4 + \sum_{i=1}^n \sum_{k=5}^{\infty} \frac{2\lambda_i}{k!}.
\end{aligned}$$

Ya que  $M_0 = n, M_1 = 0, M_2 = 2m, M_3 = 6t, M_4 \geq 2m$  y  $M_i > 0$  para  $i = 6, 8, \dots$  cuando  $m \neq 0$ , al sustituir obtenemos

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^n e^{2\lambda_i} &> n + 4m + 8t + \frac{4}{3}m \\
&= n + \left(5 + \frac{1}{3}\right)m + 8t.
\end{aligned}$$

De esta forma, tenemos que

$$\begin{aligned}
EE(G)^2 &> n^2 - n + n + \left(5 + \frac{1}{3}\right)m + 8t \\
EE(G) &> \sqrt{n^2 + \left(5 + \frac{1}{3}\right)m + 8t}.
\end{aligned}$$

■

Para el caso de cotas superiores la desigualdad superior de 6.3 puede tambien ser mejorada al considerar los valores de los primeros momentos espectrales como se muestra en los siguientes resultados. El primero demostrado por Bo Zhuo en [45].

**Teorema 6.3.3** Sea  $G$  una gráfica,  $M_k$  sus momentos espectrales y  $k_0 \geq 2$ , entonces

$$EE(G) \leq n - 1 - \sqrt{2m} + \sum_{k=2}^{k_0} \frac{M_k - (\sqrt{2m})^k}{k!} + e^{\sqrt{2m}}$$

**Demostración:** Considerando la expansión en series de potencias de la exponencial tenemos que

$$EE(G) = \sum_{i=1}^n \sum_{k \geq 0} \frac{(\lambda_i)^k}{k!}$$

Intercambiando el orden de los sumandos y considerando el valor de los dos primeros momentos espectrales:  $M_0(G) = n$  y  $M_1(G) = 0$ , tenemos

$$EE(G) = n + 0 + \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n (\lambda_i)^k$$

considerando  $k_0 \geq 2$ , y que para  $k \geq 2$ :

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^k \leq \left[ \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \right]^{\frac{k}{2}} = M_2^{\frac{k}{2}} = (\sqrt{2m})^k$$

tenemos que

$$\begin{aligned} EE(G) &= n + \sum_{k=2}^{k_0} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \lambda_i^k + \sum_{k > k_0} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \lambda_i^k \\ &\leq n + \sum_{k=2}^{k_0} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^n \lambda_i^k + \sum_{k > k_0} \frac{(\sqrt{2m})^k}{k!} \\ &= n + \sum_{k=2}^{k_0} \frac{M_k}{k!} + \left[ e^{\sqrt{2m}} - \sum_{k=2}^{k_0} \frac{(\sqrt{2m})^k}{k!} - \sqrt{2m} - 1 \right] \\ &= n - 1 - \sqrt{2m} + \sum_{k=2}^{k_0} \frac{M_k - (\sqrt{2m})^k}{k!} + e^{\sqrt{2m}} \end{aligned}$$

■

Como corolario, considerando  $k_0 = 2$  y que  $M_2 = 2m$ , se obtienen el siguiente resultado mostrado en [14], donde consideran una demostración análoga a la que muestran para el Teorema 6.3. Sin embargo en dicha prueba hay un error que puede corregirse fácilmente al considerar que la suma de los valores propios es igual a cero antes de tomar su valor absoluto.

**Corolario 6.3.1** Dada  $G$  una  $(m, n)$ -gráfica se tiene que

$$EE(G) \leq n - 1 + e^{\sqrt{2m}} - \sqrt{2m}.$$

Por otro lado, al usar  $k_0 = 3$  y el tercer momento espectral  $M_3 = 6t$ , con  $t$  el número de triángulos de  $G$  tenemos:

**Corolario 6.3.2**

$$EE(G) \leq n - 1 - \left(1 + \frac{m}{3}\right) \sqrt{2m} + t + e^{\sqrt{2m}}.$$

El siguiente resultado se creía cierto

**Conjetura 6.3.1** Para una  $(n - m)$ -gráfica  $G$  con  $m \geq 1$

$$EE(G) < n - 1 + e^{\sqrt{2m-1}}.$$

Sin embargo, la prueba de [36] es errónea, pues utilizan la siguiente desigualdad que es falsa

$$\sum_{i=1}^{n_+} \lambda_i \geq \left( \sum_{i=1}^{n_+} n_+ \lambda_i^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

donde  $n_+$  es la cantidad de valores propios positivos de  $G$  y  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ . Observado esto y tratando de evadir tal paso pudimos llegar a otra cota superior que a su vez muestra la relación del índice de Estrada con la energía de una gráfica.

**Teorema 6.3.4** Sea  $G$  una  $(n - m)$ -gráfica con  $m \neq 0$ , entonces

$$EE(G) \leq e^{\sqrt{2m-1}} - \sqrt{2m-1} + \frac{\mathcal{E}(G)}{2} + n - 2 + e^{-1}$$

**Demostración:** Sea  $n_+$  la cantidad de valores propios positivos de  $G$ , podemos escribir el índice de Estrada como

$$\begin{aligned} EE(G) &= \sum_{i=1}^{n_+} e^{\lambda_i} + \sum_{i=n_++1}^{n-1} e^{\lambda_i} + e^{\lambda_n} \\ &\leq \sum_{i=1}^{n_+} e^{\lambda_i} + n - 1 - n_+ + e^{-1} \end{aligned}$$

Ya que  $m \neq 0$  el camino  $P_2$  es subgráfica de  $G$ . Luego, por el teorema de entrelazamiento de Cauchy,  $\lambda_n \leq -1$ . Así

$$\begin{aligned} EE(G) &= \sum_{i=1}^{n_+} \sum_{k \geq 0} \frac{\lambda_i^k}{k!} + n - 1 - n_+ + e^{-1} \\ &= \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^{n_+} \lambda_i^k + n_+ + \frac{E(G)}{2} + n - 1 - n_+ + e^{-1} \\ &\leq \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} \left[ \sum_{i=1}^{n_+} \lambda_i^2 \right]^{\frac{k}{2}} + \frac{E(G)}{2} + n - 1 + e^{-1} \end{aligned}$$

Tomando  $\epsilon \geq \sum_{i=n_++1}^n \lambda_i^2$

$$\begin{aligned}
EE(G) &\leq \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} [2m - \epsilon]^{\frac{k}{2}} - 1 - \sqrt{2m - \epsilon} + \frac{E(G)}{2} + n - 1 + e^{-1} \\
&= e^{\sqrt{2m - \epsilon}} - 1 - \sqrt{2m - \epsilon} + \frac{E(G)}{2} + n - 1 + e^{-1} \\
&= e^{\sqrt{2m - \epsilon}} - \sqrt{2m - \epsilon} + \frac{E(G)}{2} + n - 2 + e^{-1}.
\end{aligned}$$

Ya que  $\lambda_n \leq -1$  podemos tomar  $\epsilon = 1$

$$EE(G) \leq e^{\sqrt{2m-1}} - \sqrt{2m-1} + \frac{E(G)}{2} + n - 2 + e^{-1}$$

**Nota:** Para gráficas bipartitas se puede tomar  $\epsilon = m$ , por la simetría de los valores propios y obtener

$$EE(G) \leq e^{\sqrt{m}} - \sqrt{m} + \frac{E(G)}{2} + n - 2 + e^{-1}$$

Usando el método de separar los valores propios por su signo y ya que las gráficas bipartitas tienen un espectro simétrico, por medio de un proceso similar al anterior es demostrado el siguiente resultado en [14].

**Teorema 6.3.5** *Para una gráfica bipartita  $G$ , su índice de Estrada está acotado por*

$$EE(G) \leq n - 2 + 2ch(\sqrt{m}),$$

donde  $ch(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$  denota el coseno hiperbólico.



## Capítulo 7

# Otros índices topológicos y medidas de centralidad

### 7.1 Otros índices topológicos

En este capítulo describiremos brevemente los diferentes índices topológicos que se conocen en la literatura de química matemática.

#### 7.1.1 Índice de Hosoya

En una gráfica  $G$ , decimos que dos aristas son independientes si no comparten algún vértice. Un conjunto de aristas independientes es cualquier subconjunto de  $E(G)$  donde cada par de vértices son independientes.

El índice de Hosoya, también llamado índice  $Z$ , fue introducido en 1971 [26] por Haruo Hosoya.

Para una gráfica  $G$  se define el índice de Hosoya,  $Z(G)$ , como la cantidad de conjuntos de aristas independientes o también conocidos como emparejamientos. De esta manera el índice de Hosoya puede escribirse como

$$Z(G) = \sum_{k=0}^{E(G)} m(G, k), \quad (7.1)$$

donde  $m(G, k)$  denota el número de  $k$ -emparejamientos, es decir, el número de conjuntos formado por  $k$  aristas de  $G$  independientes. Cuando Hosoya introdujo su índice lo definió primero para el esqueleto de carbón de los hidrocarburos saturados.

Este índice se relaciona con propiedades químicas de algunos compuestos, en particular el punto de ebullición, en [26] Hosoya expone su relación con los alcanos.

Como mencionan en la introducción de [34] Se ha encontrado el valor específico de este índice para varias clases de gráficas y resuelto el problema de los valores extremos que toma el índice de Hosoya en ciertos casos. LV y YU estudiaron el índice de Hosoya para árboles con grado máximo dado. Hamzet obtuvo algunas fórmulas para el conjunto de gráficas bicíclicas, "caterpillars" y

estrellas duales. Seiber y Zaradka dedujeron fórmulas para las cadenas hexagonales según el número de exágonos que tienen. Wagner y Gutman coleccionaron y clasificaron los resultados de valores extremos del índice de Hosoya y desarrollaron algunas herramientas útiles en este tipo de problemas. King y Deng encontraron el promedio del índice de Hosoya con respecto al conjunto de todas las "polyphelynele chains".

Algunos resultados interesantes son mostrados a continuación. Desde su introducción en [26], Hosoya ya había visto la relación que tiene su índice con el polinomio característico tal como lo expresa el siguiente teorema.

**Teorema 7.1.1** *El polinomio característico de un árbol  $T$  está dado por*

$$P_T(x) = \sum_{k=0}^m (-1)^k m(T, k) x^{N-2k}$$

Con  $m$  el máximo número de aristas desconectadas y  $m(T, k)$  el número de conjuntos con  $k$  aristas independientes.

De esta forma, para el caso de árboles, el índice de Hosoya es la suma del valor absoluto de los coeficientes del polinomio característico.

Esto permite definir un cuasi orden entre los árboles como el mostrado con la energía de graficas ( $\succeq$ ), donde  $T_1 \succeq T_2$  si

$$m(T_1, k) \geq m(T_2, k)$$

para todo  $k$ . y con  $T_1 \succ T_2$  si  $T_1 \succeq T_2$  y  $T_1 \neq T_2$ . De esta forma si  $T_1 \succ T_2$  entonces  $Z(T_1) \geq Z(T_2)$ .

De manera similar usando el Teorema 3.5.2 y el Teorema 3.5.3 se pueden obtener l los árboles con  $n$  vértices que maximizan y minimizan el índice de Hosoya.

**Teorema 7.1.2** *Para cualquier arbol  $T$  con  $n$  vértices se tiene que*

$$Z(S_n) \leq Z(T) \leq Z(P_n),$$

donde la igualdades se alcanza solamente cuando  $T = S_n$  y  $T = P_n$ , respectivamente.

**Demostración:** Se sigue directamente del Teorema 3.5.2 y el Teorema 3.5.3 y del hecho que los coeficientes del polinomio característico de un árbol son precisamente los emparejamientos de la gráfica. ■

El siguiente resultado puede ser de mucha utilidad al calcular el índice de Hosoya de distintas gráficas ya que permite ir partiendo el problema para gráficas más chicas.

**Teorema 7.1.3** *Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, entonces:*

i) *Si  $uv \in E$  entonces,  $Z(G) = Z(G - uv + Z(G - \{uv\}))$*

ii) *Si  $v \in V$  entonces,  $Z(G) = \sum_{u \in N(v)} Z(G - \{u, v\})$*

iii) *si  $G_1 \dots G_t$  son las componentes conexas de  $G$ , entonces  $Z(G) = \prod_{j=1}^t Z(G_j)$*

**Corolario 7.1.1** Para el camino  $P_n$ , el índice de Hosoya sigue la serie de Fibonacci, es decir,  $Z(P_n) = \mathcal{F}_n$ .

**Demostración:** Notemos que  $Z(P_1) = 1$ ,  $Z(P_2) = 2$ . Por otro lado, para  $n > 2$ , consideremos a  $e$  una arista en el extremo de  $P_n$ . Por el insiso i) del teorema anterior, tenemos que

$$Z(P_n) = Z(P_{n-1} + Z(P_{n-2})).$$

Que es la recursión de Fibonacci. Además  $Z(P_1) = \mathcal{F}_\infty$  y  $Z(P_2) = \mathcal{F}_\infty$  por lo que  $Z(P_n) = \mathcal{F}_n$  para  $n \in \mathbb{N}$ . ■ Otra demostración de este resultado así como otras relaciones con los números de Fibonacci pueden encontrarse en [27].

### 7.1.2 Índice de hiper-Wiener

El índice de Hiper-Wiener es una generalización del índice de Wiener y fue introducido por Randić en 1993. Este índice en un principio se definió solamente para árboles, de una forma similar al método para calcular el índice de Wiener que se menciona en el capítulo correspondiente 5.4.1. En esta ocasión en lugar de considerar solamente las aristas se consideran los caminos que unen a cada par de vértices. De manera más precisa, para un árbol  $T$  y un camino  $d$  que une a los vértices  $i$  y  $j$  consideramos los subárboles  $T_1$  y  $T_2$  formados por las dos componentes conexas resultantes de borrar de  $T$  el camino  $d$  salvo los vértices  $i, j$  y las ramas unidas a  $d$  salvo las unidas a los vértices  $i, j$ . nombramos  $n_{1,d} = |T_1|$  y  $n_{2,d} = |T_2|$ . Se define el índice de Hiper-Wiener de  $T$  como:

$$WW(T) = \sum_d n_{1,d} n_{2,d}$$

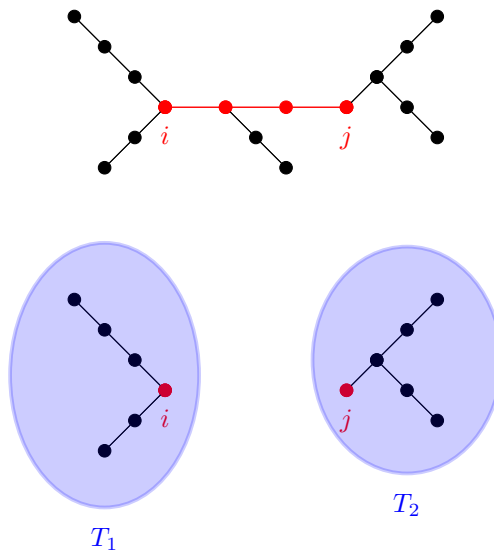


Figura 7.1: Componentes obtenidas al borrar el interior del camino  $i, j$  y las ramas incidentes a él

Es conocido que dentro de conjunto de arboles con  $n$  vértices, el índice de hiper-Wiener  $WW$  alcanza su mínimo valor con la estrella  $S_n$  y su máximo valor con el camino  $P_n$ .

En [32] Klein, Lukovitz y Gutman extendieron la definición del índice de hiper-Wiener para cualquier gráfica conexa y no solo árboles. Notaron que el producto  $n_{1,d}n_{2,d}$  cuenta la cantidad de caminos  $d'$  que son externos de  $d$ . Es decir  $d \subset d'$ , pues todo camino externo de  $d$  tiene un extremo en  $T_1$  y otro en  $T_2$ . De esta forma, el índice de hiper-Wiener puede expresarse como

$$\begin{aligned} WW(T) &= \sum_d \#\{d' : d \subset d'\} = \sum_d \sum_{d'} 1_{\{d \subset d'\}} \\ &= \sum_{d'} \sum_d 1_{\{d \subset d'\}} = \sum_{d'} \#\{d : d \subset d'\} \end{aligned}$$

Es decir  $WW(T)$  puede escribirse en terminos de los caminos internos  $d$  de  $d'$  ( $d \subset d'$ ).

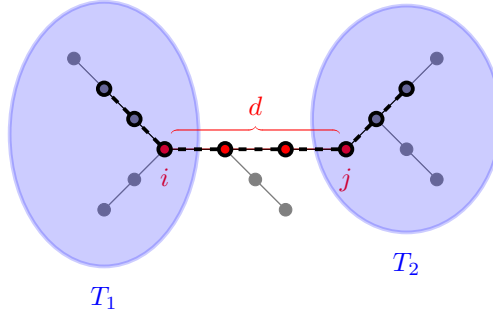


Figura 7.2: Caminos externo a  $d$  con cada uno de sus extremos sobre  $T_1$  y  $T_2$

Dado un camino entre dos vértice  $i, j$ , este tiene  $d(i, j) + 1$  vértices y por tanto, hay  $\frac{1}{2}((d(i, j) + 1)(d(i, j)))$  caminos internos a él. Así

$$WW(T) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in V(T)} d(i, j) + d(i, j)^2.$$

Esto permitió extender el índice de hiper-Wiener a graficas conexas general dando la siguiente definicion, que al igual que la definición del índice de Wiener depende de la distancia entre los pares de nodos de la gráfica.

Para una gráfica conexa  $G$  el índice de hiper-Wiener está definido como

$$WW(G) = \frac{1}{2} \sum_{u,v \in v(G)} d(u, v) + d(u, v)^2 \tag{7.2}$$

Hemos de notar que Gutman introdujo en [22] una variante del índice de hiper-Wiener, considerando la cantidad de vértices entre los pares de vertices  $i, j$ , denotando a esta variación  $\overline{WW}$ . De esta forma para un árbol  $T$ .

$$\overline{WW}(T) = \sum_d n_{1,d}n_{2,d}n_{3,d} \tag{7.3}$$

con  $n_1 + n_2 = n_3 + n$  donde  $n$  es la cantidad de vértices de  $T$ .

### 7.1.3 Índice de Zagreb

El índice de Zagreb fue considerado primeramente por Trinajstić en 1972 [20], donde examinaron la dependencia de la energía de los  $\pi$ -electrones con la estructura molecular y vieron que en una aproximación de la energía de los  $\pi$ -electrones, dos términos aparecían. El primero,

$$M_1 = \sum_{v \in V} d(v)^2, \quad (7.4)$$

donde la suma corre sobre los vértices de la gráfica molecular. El segundo,

$$M_2 = \sum_{uv \in E} d(u)d(v), \quad (7.5)$$

con la suma corriendo sobre las aristas de la gráfica molecular. Para cualquier gráfica  $G$  en general se define El primer índice de Zagreb como la suma de los cuadrados de los grados de sus vértices,

$$M_1(G) = \sum_{v \in V(G)} d(v)^2, \quad (7.6)$$

y el segundo índice de Zagreb como la suma del producto de los grados de los pares de vértices adyacentes,

$$M_2(G) = \sum_{u,v \in E(G)} d(u)d(v). \quad (7.7)$$

Notemos que el segundo índice de Zagreb coincide con el índice generalizado de Randić,  $R_1$ , por lo que omitimos su análisis al ya estar contenido en el Capítulo 4.

En [23] podemos encontrar varias propiedades de primer índice de Zagreb que no están,  $M_1$ , como los árboles con máximo y mínimo primer índice de Zagreb, así como varias cotas para  $M_1$ .

**Teorema 7.1.4** *Dada una  $n, m$ -gráfica  $G$  y  $p = \lfloor \frac{2m}{n} \rfloor$ , tenemos que*

$$2(2p+1)m - p(p+1)n \leq M_1(G) \leq m \left( \frac{2m}{n-1} + n - 2 \right) \quad (7.8)$$

La cota superior fue dada en [13] y la cota inferior en [11]

**Corolario 7.1.2** *Dado un árbol  $T$ , se tiene que*

$$4n - 6 \leq M_1(T) \leq n(n-1).$$

**Demostración:** Basta ver que en un árbol  $m = n - 1$  y  $p = \lfloor \frac{2m}{n} \rfloor = \lfloor \frac{2(n-1)}{n} \rfloor = \lfloor 2 - \frac{1}{n} \rfloor = 1$  y sustituir en 7.8 ■

**Teorema 7.1.5** *Entre los árboles con  $n$  vértices, el camino  $P_n$  minimiza el índice de Zagreb.*

**Demostración:** El primer índice de Zagreb del camino  $P_n$  está dado por

$$M_1 P_n = 2(1^2) + (n-2)(2^2) = 4n - 6.$$

Con esto y la primera desigualdad de 7.1.6 tenemos el resultado deseado ■

**Teorema 7.1.6** *Entre los árboles con  $n$  vértices, la estrella  $S_n$  maximiza el índice de Zagreb.*

**Demostración:** El primer índice de Zagreb de la estrella  $S_n$  está dado por

$$M_1(S_n) = (n-1)1^2 + (n-1)^2 = (n)(n-1).$$

Con esto y la segunda desigualdad de 7.1.6 obtenemos el resultado deseado. ■  
Algunas propiedades sobre el segundo índice de Zagreb son descritas en [12] y se muestran a continuación.

Es fácil ver que al borrar las aristas de una gráfica, su segundo índice de Zagreb decrece. De esto se siguen los siguientes resultados.

**Teorema 7.1.7** *Sea  $G$  es una  $n$ -gráfica diferente de  $K_n$  y de  $\overline{K_n}$ . Entonces,*

$$M_2(\overline{K_n}) < M_2(G) < M_2(K_n)$$

*Es decir*

$$0 < M_2(G) < \frac{1}{2}n(n-1)^3.$$

**Lema 7.1.1** *La  $n$ -gráfica conexa con menor segundo índice de Zagreb es un árbol.*

**Teorema 7.1.8** *Entre los árboles de tamaño  $n$ , el camino  $P_n$  minimiza el segundo índice de Zagreb y consecuentemente minimiza el índice de Zagreb entre las  $n$ -gráficas conexas.*

**Demostración:** Notemos que el segundo índice de Zagreb es el índice de Randić  $R_\alpha$  con exponente  $\alpha = 1$ . de esta manera del Teorema 4.5.1 se sigue directamente el resultado.

**Teorema 7.1.9** *Entre los árboles de tamaño  $n$ , la estrella maximiza el segundo índice de Zagreb.*

**Demostración:** Notemos que el segundo índice de Zagreb es el índice de Randić  $R_\alpha$  con exponente  $\alpha = 1$ . de esta manera del Teorema 4.5.4 se sigue directamente el resultado.

### 7.1.4 Índice de Padmakar-Ivan e Índice de Szeged

El índice de Szeged, publicado por primera vez en 1994, [16] y el índice de Padmakar-Ivan en 2001, [31], tienen varios aspectos similares. El primero y más notorio es que ambos suman un número que consideran los vecinos más cercanos a los vértices de cada aristas, como se puede observar en la definición de cada uno, los cuales se describen a continuación.

El índice de Szeged, para una gráfica conexa  $G$ , está definido por

$$Sz(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} n_u(e)n_v(e) \quad (7.9)$$

Donde, para una arista  $e = uv$ ,  $n_u(e)$  es el número de vertices más cercanos a  $u$  que a  $v$  y  $n_v(e)$  es el número de vertices más cercanos a  $v$  que a  $u$ .

Por otro lado, el índice de Padmakar-Ivan de una gráfica  $G$ , se define como la suma sobre las aristas  $e = uv$  de los vértices que no equidistan de  $u$  y  $v$ . Según [42], esto puede escribirse como

$$PI_v(G) = \sum_{e \in E(G)} (|V(G)| - N_G(e)) = \sum_{e=uv \in E(G)} (n_u(e) + n_v(e)), \quad (7.10)$$

donde  $N_G(e)$  es el número de vertices equidistantes de  $u$  y  $v$  para una arista  $e = uv$ . Notemos que estos dos índices están relacionados al sumar sobre las aristas y contar los vetices más cercanos a los extremos de las mismas. De forma similar, también existe el índice de Padmakar-Ivan para aristas [42] denotado por  $PI_e$ . el cual se puede escribir como

$$PI_e(G) = \sum_{e \in E(G)} (|E(G)| - M_G(e)) = \sum_{e=uv \in E(G)} (m_u(e) + m_v(e)), \quad (7.11)$$

con  $M_G(e)$  el número de aristas equidistantes a  $v$  y  $u$  para  $e = uv$ , y  $m_v(e)$  las aristas más cercanas a  $v$  que a  $u$ ,  $m_u(e)$  las aristas más cercanas a  $u$  que a  $v$ . A continuación se explica un poco de cada uno de estos índices y algunas propiedades importantes.

En 1994 fue por primera vez publicado un novedoso invariante para gráficas basado en distancias, [16], que no fue nombrado en ete ni tres publicaciones posteriores, la falta de un nombre para este indicador era molesta, así que en 1995 se le denominó el índice de Szeged, ciudad donde se encontraba unos de los autores al momento de publicar este índice por primera vez, y fue denotado  $Zs$ . Como podemos ver en [24], se han hecho varias publicaciones del índice de Szeged después de su introducción, aquí mencionamos solamente algunos resultados.

El índice de Szeged, para una gráfica conexa  $G$ , está definido por

$$Sz(G) = \sum_{e=uv \in E(G)} n_u(e)n_v(e) \quad (7.12)$$

Donde, para una arista  $e = uv$ ,  $n_u(e)$  es el número de vertices más cercanos a  $u$  que a  $v$  y  $n_v(e)$  es el número de vertices más cercanos a  $v$  que a  $u$ .

**Teorema 7.1.10** *Si  $G$  es una gráfica conexa, distinta de  $K_{1,n-1}$  y  $P_n$ , entonces*

$$Sz(K_{1,n-1}) < Sz(G) < Sz(P_n).$$

en [24], se muestra un teorema interesante, que relaciona el índice de Wiener y el índice de Szeged, particularmente para árboles establece que Si  $T$  es un árbol, entonces  $Sz(T) = W(G)$ . Este resultado ya fue mostrado en la sección del índice de Wiener (Corolario 5.4.1). El índice de Ivan-Padmakar fue introducido en 2001 [31], donde estudiaron sus aplicaciones químicas. Algunas de las aplicaicones

químicas y relacionadas con la nanociencia fueron estudiadas en [4, 37]. El índice de Padmakar-Ivan de una gráfica  $G$ , se define como la suma sobre las aristas  $e = uv$  de los vértices que no equidistan de  $u$  y  $v$ . Según [42], esto puede escribirse como

$$PI_v(G) = \sum_{e \in E(G)} (|V(G)| - N_G(e)) = \sum_{e=uv \in E(G)} (n_u(e) + n_v(e)), \quad (7.13)$$

donde  $N_G(e)$  es el número de vertices equidistantes de  $u$  y  $v$  para una arista  $e = uv$ . A continuación se muestran algunos resultados del índice de Padmakar-Ivan. En [40], encontraron las siguientes cotas para este índice.

**Teorema 7.1.11** *Sea  $G$  una  $n$ -gráfica, con  $n \geq 4$ . Entonces,*

$$PI_v(G) \leq n \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil.$$

**Teorema 7.1.12** *Sea  $G$  una  $n$ -gráfica. Entonces,*

$$PI_v(G) \geq n(n-1).$$

## 7.2 Medidas de centralidad

Dentro de los sistemas complejos una red es un conjunto de los componentes de un sistema, llamados generalmente nodos o vértices, y la interacción dirigida que hay entre ellos, llamados "links" o aristas. Según la naturaleza del sistema las redes pueden representarse por medio de distintos tipos de gráficas (múltiples, dirigidas, con pesos, etc.). Un ejemplo son las redes profesionales, donde las personas son representadas por medio de nodos y las interacciones laborales por medio de links o aristas que a su vez pueden ser de importancia en el éxito de una compañía. También están las redes de amistad con usos dentro de la sociología y la mercadotecnia. Más ejemplos pueden ser encontrados en [5, 41].

Las medidas de centralidad son valores que se asignan a los nodos de una red que indican la importancia de un nodo dentro de la gráfica. Generalmente se representan en forma de un vector ([41]). Distintas características de los nodos pueden ser consideradas más importantes según el estudio de la red por lo que existen distintas medidas de centralidad. Por ejemplo, a veces un vértice se dice importante por lo conectado que está a otros, lo que podría relacionarse con la cantidad de vecinos que tiene, mientras que otras ocasiones un vértice puede considerarse más importante en cuanto más caminos pasen por él. En esta sección mostramos brevemente algunas medidas de centralidad así como su relación con algunos índices topológicos.

### 7.2.1 Centralidad de grado

La medida de centralidad más simple es el grado de un vértice. Las gráficas dirigidas tienen grado de entrada y grado de salida y ambas pueden ser útiles como medidas de centralidad. En una red social parece razonable suponer que un individuo que tiene conexiones con muchos otros pueda tener más influencia, o acceso a la información o prestigio que aquellos que tienen menos conexiones. Si



describimos la centralidad de grado de  $G$  por el vector  $X_g(G)$ , podemos expresar el primer índice de Zagreb de la siguiente forma

$$Z_1(G) = \sum_{v \in V(G)} d_v^2 = |X_g(G)|^2,$$

donde  $d_v$  es el grado del vértice  $v$ .

### 7.2.2 Centralidad de eigenvector

Una extensión de la centralidad de grado es la centralidad de eigenvector. A veces la importancia de un vértice aumenta si está conectado con otros vértices que son por sí mismos importantes. El concepto de centralidad de eigenvector le da a cada vértice una puntuación proporcional a la suma de las puntuaciones de sus vecinos. Podríamos empezar estableciendo  $x_i = 1$  como centralidad para cada vértice  $i$  y usarla para calcular una mejor,  $x'_j$ , como sigue,

$$x'_i = \sum_j A_{ij} x_j,$$

dónde  $A = (A_{ij})_{ij}$  es la matriz de adyacencia. Escrito de forma matricial  $x' = Ax$ , donde  $x$  es el vector con entradas  $x_i$ , y después de  $t$  pasos tenemos la expresión

$$x(t) = A^t x(0).$$

Si escribimos  $x(0)$  como combinación lineal de los eigenvectores,  $v_i$ , de la matriz de adyacencia,  $x(0) = \sum_i c_i v_i$ , entonces

$$x(t) = A^t \sum_i c_i v_i = \sum_i c_i k_i^t v_i = k_1^t \sum_i c_i \left[ \frac{k_i}{k_1} \right]^t,$$

donde  $k_i$  son los eigenvalores de  $A$  y  $k_1$  es el mayor de ellos. Como  $\frac{k_i}{k_1} < 1$  para  $i \neq 1$ , en el límite cuando  $t \rightarrow \infty$  obtenemos  $x(t) \rightarrow c_1 k_1^t v_1$ . Es decir, el vector límite de centralidades es proporcional al principal vector propio. Lo que nos dice que  $x$  cumple

$$Ax = k_1 x.$$

De esta forma la centralidad del vértice  $i$  es proporcional a la suma de las centralidades de sus vecinos,

$$x_i = k_i^{-1} \sum_j A_{ij} x_j.$$

Notemos que no estamos fijando una normalización de la centralidad de eigenvector. Sin embargo, típicamente esto no importa porque nos fijamos en los vértices que tienen mayor o menor grado.

La centralidad de eigenvector se puede calcular tanto para gráficas dirigidas como no dirigidas. Sin embargo, funciona mejor para gráficas no dirigidas. Para el caso dirigido generalmente se toman los eigenvectores derechos. Esto es debido a que en las redes dirigidas, la centralidad es otorgada por vértices que apuntan hacia uno, en lugar de los que salen. Hay algunos factores que pueden generar problemática a la centralidad de eigenvector en gráficas dirigidas. Por

ejemplo, los vértices de una gráfica que apuntan a otros vertices y ningún vertice apunta a ellos tendran centralidad cero y por tanto los vertices alimentados de estos últimos tambien. Más específicamente, sólo los vértices que están en una componente fuertemente conexas, o su componente de salida pueden tener centralidad de eigenvector no cero.

### 7.2.3 Centralidad de Katz

Una solución al problema que se presenta con la centralidad de eigenvector en el caso de gráficas dirigidas con los vértices que no son apuntados por otro vértices es la siguiente. A cada vértice le damos una pequeña cantidad de centralidad gratis. Definimos entonces

$$x_i = \alpha \sum_j A_{ij} x_j + \beta,$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes positivas. Esto significa que los vértices que son apuntados por muchos otros vértices tendrán una centralidad alta. Además aquellos que son apuntados por otros vértices con gran centralidad también. En términos matriciales esto es

$$x = \alpha Ax + \beta \mathbf{1}$$

Donde  $\mathbf{1}$  representa al el vector  $(1, 1, 1, \dots)$ . Reordenando para  $x$  y tomando  $\beta = 1$  tenemos

$$x = (I - \alpha A)^{-1} \mathbf{1}.$$

Para hacer la elección de  $\alpha$  notemos que la primera vez en que

$$\det(A - \alpha^{-1} I) = 0$$

es cuando  $\alpha^{-1} = k_1$ , el eigenvalor más grande. Así que debemos tomar valores de  $\alpha$  menores que  $k_1^{-1}$ . Al tomar un valor de  $\alpha$  cercano a  $\frac{1}{k_1}$  se obtiene una centralidad que es cercana a la original centralidad de eigenvector pero da valores distintos de cero en vértices que no están en las componentes fuertemente conexas. Una posible extensión de esta centralidad se obtiene variando el parámetro  $\beta$  para cada vértice. Definiendo una medida de centralidad general

$$x_i = \alpha \sum_j A_{ij} x_j \beta_j.$$

### 7.2.4 PageRank

La centralidad de Katz tiene una característica no muy deseada. Si un vértice con centralidad alta apunta a muchos otros entonces estos vértices también obtienen centralidad alta. En muchos casos un vértice tiene menor valor si es apuntado entre muchos otros vértices que también son apuntados. Una forma de reflejar esto es definiendo una variación de la centralidad de Katz. En esta variación un vértice deriva a sus vecinos una cantidad proporcional a su centralidad dividida por el grado de salida.

$$x_i = \alpha \sum_j A_{ij} \frac{x_j}{k_j^{\text{out}}} + \beta$$

Para resolver el problema cuando  $k_j^{out} = 0$  podemos cambiar  $k_j$  por 1. Así en expresión matricial tenemos

$$x = \alpha AD^{-1}x + \beta \mathbf{1}$$

Con  $D$  la matriz diagonal  $D_{ii} = \max(k_i^{out}, 1)$  Reordenando y fijando  $\beta = 1$  tenemos

$$x = (I - \alpha AD^{-1})^{-1} = D(D - \alpha A)^{-1} \mathbf{1}$$

esta centralidad es conocida como PageRank. Al igual que con la centralidad de Katz podemos generalizar el PageRank al caso dónde la constante sumada es diferente para cada vértice

$$x_i = \alpha \sum_j A_{ij} \frac{x_j}{k_j^{out}} + \beta_i$$

Finalmente también podemos tomar la versión sin el término  $\beta$

$$x_i = \alpha \sum_j A_{ij} \frac{x_j}{k_j^{out}}.$$

Para gráficas no dirigidas es fácil de ver que:  $x_i = ki$ .

### 7.2.5 Centralidad de cercanía

Otra medida de centralidad es la centralidad de cercanía, que mide la distancia media de un vértice a otros. Para cada uno de los vértices  $j \in V(G)$  la distancia promedio sobre todos los vértice  $i \in V(G)$  Denotamos por  $d_{i,j} = d(i, j)$  a la distancia entre los vértices  $i$  y  $j$ , y definimos

$$l_i = \frac{1}{n} \sum_j d_{ij}$$

Donde  $n$  es el tamaño de la gráfica. Esta medida toma valores bajos para los vértices que están separados de otros por una distancia corta en promedio. Algunos autores excluyen el término cuando  $j = i$

$$l'_i = \frac{1}{n-1} \sum_{j \neq i} d_{ij}.$$

Se define entonces la centralidad de cercanía como  $C_i = \frac{1}{l_i}$ , o si se excluye la distancia hacia el mismo vértice  $C_i = \frac{1}{l'_i}$ . En este caso la centralidad de cercanía se relaciona con el índice de Wiener pues para una gráfica conexa  $G$  tenemos que

$$W(G) = \sum_{i,j \in V(G)} d_{ij} = \frac{n}{2} \sum_{i=0}^n l_i = \frac{n}{2} \sum_{i=0}^n C_i^{-1},$$

o bien en el caso de excluir la distancia hacia el mismo vértice

$$W(G) = \sum_{i,j \in V(G)} d_{ij} = \frac{n-1}{2} \sum_{i=0}^n l'_i = \frac{n-1}{2} \sum_{i=0}^n C_i^{-1}$$

La centralidad de cercanía es muy natural, pero tiene algunos problemas. Uno de ellos es que sus valores tienden a abarcar un rango dinámico chico. Esto hace que sea difícil distinguir entre los vértices centrales y menos centrales. Otro problema es cuando trabajamos con una gráfica con más de una componente conexa. En este caso para todo  $i, j$  la distancia es infinito y así  $C_i = 0$  para todo  $i$ . Para solucionar este problema, hay dos alternativas. La primera es promediar sólo sobre los vértices de la misma componente conexa. Sin embargo, Para vértices en componentes pequeñas la distancia suele ser más pequeña. Esto suele dar medidas de proximidad más grandes a vértices en componentes pequeñas que en los vértices en las componentes más grandes. Este comportamiento usualmente no es deseado, ya que los vértices en componentes más grandes suelen considerarse mejor conectados. Una mejor solución es redefinir la centralidad de proximidad promediando en términos de la media armónica.

$$C'_i = \frac{1}{n-1} \sum_{j \neq i} \frac{1}{d_{ij}}.$$

De esta forma si  $i, j$  están en diferentes componentes, la aportación de  $\frac{1}{d_{ij}}$  es cero. Además a los nodos más cercanos se le da mayor peso que a los más lejanos. En una red con solamente una componente conexa la distancia media es

$$l = \frac{1}{n^2} \sum_{ij} d_{ij} = \frac{1}{n} \sum_i l_i.$$

Para varias componentes, tenemos como antes el mismo problema. Para vértices en distintas componentes su distancia es infinita. Una forma de solucionarlo es promediar sobre la misma componente conexa. Así

$$l = \frac{\sum_m \sum_{i,j \in \{C_m\}} d_{ij}}{\sum_m n_m^2}.$$

Una mejor aproximación puede hacerse usando la media armónica.

$$l' = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i \neq j} \frac{1}{d_{ij}} = \frac{1}{n} \sum_i C'_i.$$

### 7.2.6 Centralidad de intermediación

La centralidad de intermediación mide el grado en el que un vértice se encuentra sobre caminos entre otros vértices. Los vértices con alta intermediación son aquellos que al removerse de una red causarían mayor disturbio en la comunicación.

Consideremos una red no dirigida con a lo más un camino más corto entre cada par de vértices. Sea  $n_{st}^i$  igual a 1 si el vértice  $i$  está sobre un camino más corto entre  $s$  y  $t$ , y 0 si no. Entonces, la centralidad de intermediación está dada por

$$x_i = \sum_{s,t \in V(G)} n_{st}^i.$$

En general  $s$  y  $t$  se consideran que están sobre el camino más corto entre  $s$  y  $t$  y que no se excluye el caso cuando  $s = t$ . También notemos que el camino que va

de  $s$  a  $t$  es considerado distinto que el camino que va de  $t$  a  $s$ . Con esta última en consideración, esta definición puede ser usada tal cual para gráficas dirigidas. Cuando tenemos un árbol, la centralidad de intermediación se puede relacionar con el índice de Wiener o el índice de Zseged, que, como ya se mencionó, en el caso de árboles coinciden. Dado un árbol  $T$ , como el camino de que va de un vértice a otro es único y por tanto es el más corto, se tiene que

$$\begin{aligned} Z_s(T) = W(T) &= \sum_{s,t \in V(T)} d(s,t) \\ &= \sum_{s,t \in V(T)} \sum_{i=1}^n (1_{\{v_i \in c(s,t)\}} - 1) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{s,t \in V(T)} 1_{\{v_i \in c(s,t)\}} - \sum_{s,t \in V(T)} 1 \\ &= \sum_{i=1}^n x_i - n^2, \end{aligned}$$

donde  $c(s,t)$  denota al camino que une a  $s$  con  $t$ . Hay una extensión natural en el caso en el que hay más de un camino más corto entre dos vértices. Éste consiste en dar un peso a cada camino inversamente proporcional al número de caminos. Así podemos expresar la centralidad de indeterminación para una red general redefiniendo  $n_{st}^i$  como el número de caminos más cortos de  $s$  a  $t$  que pasan por  $i$ . Y definiendo  $g_{st}$  como el número total de caminos geodésicos de  $s$  a  $t$ . Luego, la centralidad de intermediación de un vértice  $i$  es

$$x_i = \sum_{st} \frac{n_{st}^i}{g_{st}}.$$

La centralidad de intermediación difiere de otras medidas que se han dado, pues no mide que tan bien conectado está un vértice, si no que mide que tanto aparece en el camino que uno a otros vértices. Otra propiedad interesante de la centralidad de intermediación es que sus valores típicamente son distribuidos sobre un rango amplio. El máximo valor posible se logra cuando el vértice se encuentra sobre el camino más corto entre todos los otros pares de vértices, esto ocurre en el vértice central de una gráfica estrella, cuya centralidad de intermediación está dada por  $n^2 - n + 1$ . Por otro lado, el menor valor posible de la centralidad de intermediación es  $2n - 1$ , que se da cuando la red tiene una hoja.

Para obtener un valor entre cero y uno, se suele normalizar usando el número de caminos posibles. Así,

$$x_i = \frac{1}{n^2} \sum_{st} n_{st}^i.$$

Otra opción es dividir entre el máximo valor intermediación con lo que obtenemos

$$x_i = \frac{1}{n^2 - n + 1} \sum_{st} n_{st}^i.$$

La centralidad de intermediación como se ha definido somalente considera los caminos más cortos, pero un mensaje no siempre viaja por el camino más

corto. Hay otras variantes de la intermediación. Por ejemplo, la intermediación de flujo. Está basada en cual es el máximo flujo que puede pasar a través de una gráfica. Considerando que cada arista puede soportar un flujo de una unidad el máximo flujo que puede pasar entre un vértice fuente,  $s$ , y un vértice objetivo,  $t$ , es igual al número de caminos disjuntos (por aristas) que hay entre  $s$  y  $t$ . De esta forma, para la intermediación de flujo podemos tomar  $n_{st}^i$  como la cantidad de caminos independientes entre  $s$  y  $t$  que pasan por  $i$ . Sin embargo esto trae un gran problema, Ya que los caminos disjuntos entre dos vértices no necesariamente son únicos. Para resolver esto, se toma el máximo valor posible entre las distintas selecciones de caminos.

La intermediación por flujo cuenta más caminos que al considerar los caminos más cortos. Sin embargo, hay muchos caminos que no toma en cuenta. Otra variante que cuenta todos los caminos es la intermedición de caminata aleatoria. En esta variante la intermediación es definida de la siguiente manera:  $x_i = \sum_{st} n_{st}^i$ , siendo ahora  $n_{st}^i$  la cantidad de veces en el que una caminata aleatoria de  $s$  a  $t$  pasa por  $i$ .

### 7.2.7 Centralidad de subgráfica

Estrada y Rodriguez-Velazquez introdujeron esta medida de centralidad en el 2005 [19]. La centralidad de subgráfica caracteriza la participación de cada nodo en todas las subgráficas de una red dando mayor peso a las gráficas más chicas que a las más grandes. La centralidad de subgráfica puede ser obtenida a partir del espectro de la red (El espectro de la gráfica asociada).

Varias centralidades no diferencian vértices con distinto lugar dentro de la estructura de la gráfica. Por ejemplo, en una gráfica regular, la centralidad de grado o la de eigenvector asignan el mismo valor a cualquier vértice. Para capturar la diferencia en estas estructuras Estrada y Rodriguez-Velazquez consideraron las subgráficas conexas a las que pertenece cada nodo, para hacer esto se fijaron en que en una gráfica  $G = (V, E)$ . Para un vértice  $v \in V$  se considera cada uno de los caminos cerrados que van de  $v$  a  $v$ , cada uno de estos camino define una subgráfica de  $G$  que es conexa y que contiene a  $v$ . La forma de definir estos caminos es la siguiente. A un camino cerrado  $v = u_0 \sim u_1, \dots, \sim u_k = v$  se le asigna la subgráfica con conjunto de vértices  $\{u_1, \dots, u_k - 1\}$  y conjunto de aristas  $\{(u_0, u_1), (u_1, u_2) \dots, (u_{k-1}, u_k)\}$ . Notemos que los nodos y aristas descritos de esta manera pueden repetirse y distintos caminos pueden describir una misma subgráfica.

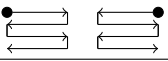

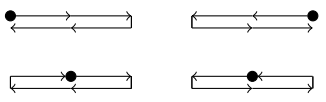

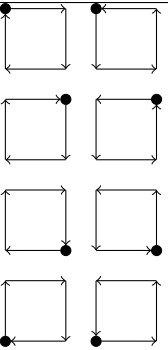

Camino de tamaño 4	Subgráfica correspondiente
	
	
	

Tabla 7.1: Gráficas obtenidas de los caminos de tamaño 4

El número de caminos cerrados de tamaño  $k$  que empiezan en el vértice  $i$  está dado por el momento espectral  $\mu_k(i) = (A^k)_{ii}$ , donde  $A = A_G$ . Al considerar las gráficas definidos por los caminos de tamaños  $1, 2, \dots, k$  podemos ver que las gráficas más pequeñas aparecen una cantidad de veces máyor. Así, para considerar todas las subgráficas que tienen a un vértice  $i$  se quiere considerar la serie,

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mu_k(i).$$

Sin embargo, esta serie no converge, por lo que se debe definir la centralidad de subgráfica como

$$C_s(i) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mu_k(i)}{k!} \tag{7.14}$$

que sigue dando un mayor peso a las gráficas más chicas.

Veamos ahora una forma en la que se puede expresar la centralidad de subgráfica por medio de el espectro de  $G$ . Empecemos por ver que efectivamente (7.14) es convergente. Si  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  son los valores propios de  $G$  y  $\lambda_1$  es el mayor, entonces

$$\sum_{i=1}^n (A^k)_{ii} = Tr(A^k) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k \leq n\lambda_1^k,$$

y por tanto  $(A^k)_{ii} \leq \lambda_1^k$ . De esta forma

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mu_k(i)}{k!} \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_1^k}{k!} = e^{\lambda_1}.$$

Del teorema de descomposición espectral (Teorema 2.1.2) podemos escribir la matriz de adyacencia como  $A_G = UDU^t$ , con  $U$  unitaria, con filas formadas por los vectores propios de  $A$  y  $D$  una matriz diagonal formada por los valores propios de  $A$ . Por lo tanto  $(A_G)^k = UD^kU^t$ . Así

$$\mu_k(i) = (A^k)_{ii} = \sum_{j=1}^n U_{ji} \lambda_j^k U_{ij}^t = \sum_{j=1}^n \lambda_j^k (v_j^i)^2,$$

donde  $v_j^i$  es la  $i$ -ésima entrada del vector propio asociado  $\lambda_j$ . Así

$$C_s(i) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^n \frac{\lambda_j^k (v_j^i)^2}{k!},$$

que precisamente es la entrada  $(i, i)$  de la exponencial de la matriz de adyacencia  $e^{A_G}$ .

### 7.2.8 Energía de vértices

Un refinamiento de la definición de energía de gráficas fue introducida en 2018, por Arizmendi y Juárez Romero, donde se define lo que se podría ver como el aporte que cada vértice de una gráfica tiene en la energía total de dicha gráfica [3]. Usando el hecho de que  $\mathcal{E}(G) = \text{Tr}(|A_G|)$ , donde  $A_G$  es la matriz de adyacencia de  $G$  y el valor absoluto de  $A_G$  se define como  $|A_G| = (A_G A_G^*)^{\frac{1}{2}}$ , se define la energía de un vértice  $v_i$  de  $G$  como

$$\mathcal{E}_G(v_i) = |A_G|_{ii}.$$

De esta forma

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{i=1}^n \mathcal{E}_G(v_i).$$

Consideremos  $\phi_i : \mathcal{M}_n \rightarrow \mathbb{C}$  como  $\phi_i(A) = A_{ii}$ . Este funcional positivo es muy útil para encontrar la energía de vértices ya que  $\mathcal{E}_G(v_i) = \phi_i(|A_G|)$ .

**Teorema 7.2.1** *Sea  $G$  una gráfica,  $v_i \in V(G)$  y  $d_i$  el grado de  $v_i$ , entonces*

$$\mathcal{E}(v_i) \leq \sqrt{d_i}.$$

**Demostración:** Sea  $A$  la matriz de adyacencia de  $G$ . Usando la desigualdad de Hölder para  $\phi_i$  (Lema 2.1.4) con  $p = q = 2$  y las funciones  $f(A) = |A|$  y  $g(A) = I_n$  tenemos

$$\phi_i(|A|) \leq \phi_i(|A|^2)^{1/2} \phi_i(I_n^2)^{1/2}.$$

Así

$$\mathcal{E}_G(v_i) \leq \sqrt{\phi_i(A^2)} = \sqrt{d_i}.$$

■

Para acotar la energía de vértices por abajo haremos uso de los siguientes resultados.



**Teorema 7.2.2** Para una gráfica  $G$  con vértice  $v_1, \dots, v_n$  y valores propios  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  la energía de cada vértice se puede escribir como

$$\mathcal{E}_G(v_i) = \sum_{j=1}^n p_{ij} |\lambda_j|,$$

donde  $\sum_{i=1}^n p_{ij} = 1$  y  $\sum_{j=1}^n p_{ij} = 1$ . Más aún,  $p_{ij} = u_{ij}^2$ , donde  $U = u_{ij}$  es una matriz ortogonal formada por los vectores propios de  $G$ .

**Demostración:** Usando el Lema 2.1.2 con la función  $f(x) = |x|$  y recordando que  $f(A) = |A|$  se sigue el resultado.

**Teorema 7.2.3** Sean  $d_i$  los grados de los vértices y  $\lambda_i$  los valores propios de una gráfica  $G$ , entonces

$$d_i = \sum_{j=1}^n p_{ij} \lambda_j^2,$$

donde  $p_{ij} \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^n p_{ij} = 1$  y  $\sum_{i=1}^n p_{ij} = 1$ . Al igual que en el teorema anterior  $p_{ij} = u_{ij}^2$ , donde  $U = u_{ij}$  es una matriz ortogonal formada por los vectores propios de  $G$ .

**Demostración:** Sea  $A$  la matriz de adyacencia de  $G$ . Como  $A_{ii}^2 = d_i$ , del Lema (2.1.2) usando  $f(x) = x^2$  se obtiene el resultado.

**Teorema 7.2.4** Sea  $G$  una gráfica con por lo menos una arista,  $v_1, \dots, v_n$  sus vértices,  $d_i$  su grado correspondiente y  $\Delta$  el grado máximo, entonces

$$\mathcal{E}_G(v_i) \geq \frac{d_i}{\Delta}.$$

**Demostración:** Como  $|x| \geq x^2$  para  $x \in [-1, 1]$ , Como  $\lambda_1 \leq \Delta$  y por tanto  $\lambda_i \leq \Delta$  con lo que

$$\left| \frac{\lambda_j}{\Delta} \right| \geq \left( \frac{\lambda_j}{\Delta} \right)^2,$$

es decir

$$p_{ij} |\lambda_j| \geq p_{ij} \frac{\lambda_j^2}{\Delta}.$$

Sumando sobre los distintos valores de  $j$ , tenemos

$$\sum_{j=1}^n \mathcal{E}_G(v_i) = p_{ij} |\lambda_j| \geq \sum_{j=1}^n p_{ij} \frac{\lambda_j^2}{\Delta} = \frac{d_i}{\Delta}.$$

**Teorema 7.2.5** Sea  $G$  una gráfica de tamaño  $n$  con al menos una arista y sean  $k > 2$ ,  $0 < p, q$  tal que  $1 = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ , entonces

$$\frac{(\phi_j(|A|^k))^q}{(\phi_j(|A|^{p(k-1)+1}))^{\frac{q}{p}}} \leq \mathcal{E}(v_j),$$

para  $j = 1, \dots, n$ .

**Demostración:** Usando el lema de Hölder (Lema 2.1.4) con  $f(A) = |A|^{k-\frac{1}{q}}$  y  $g(A) = |A|^{\frac{1}{q}}$  obtenemos

$$\begin{aligned}\phi_j(|A|^k) &= \phi_j(|A|^{k-\frac{1}{q}}|A|^{\frac{1}{q}}) \leq \left(\phi_j((|A|^{k-\frac{1}{q}})^p)\right)^{1/p} \left(\phi_j((|A|^{\frac{1}{q}})^q)\right)^{1/q} \\ &\leq \left(\phi_j(|A|^{pk-\frac{p}{q}})\right)^{1/p} \mathcal{E}(v_j)^{1/q} \\ &= \left(\phi_j(|A|^{pk-p(1-\frac{1}{p})})\right)^{1/p} \mathcal{E}(v_j)^{1/q} \\ &= \left(\phi_j(|A|^{p(k-1)+1})\right)^{1/p} \mathcal{E}(v_j)^{1/q}.\end{aligned}$$

Dividiendo entre  $(\phi_j(|A|^{p(k-1)+1}))^{1/p}$  y elevando a la  $q$  obtenemos la desigualdad deseada. ■

**Corolario 7.2.1** *Para una gráfica  $G$  de tamaño  $n$  con por lo menos una arista se tiene que*

$$\frac{d_j^{3/2}}{M_4(G, j)^{1/2}} \leq \mathcal{E}(v_j),$$

donde  $M_4(G, j)$  es la cantidad de caminos cerrados de tamaño 4 que empiezan en el vértice  $j$  y  $d_j$  su grado.

**Demostración:** Tomamos  $k = 2, p = 3$  y  $q = 3/2$ , entonces

$$\frac{\phi_j(A^2)^{3/2}}{\phi_j(A^4)^{1/2}} \leq \mathcal{E}(v_j).$$

Notando que  $\phi_j(A^2) = d_j$  y  $\phi_j(A^4) = M_4(G, j)$  obtenemos el resultado. ■

En [2] relacionan la energía de gráficas con el índice de Randić, para esto primero demuestran el siguiente teorema [2].

**Teorema 7.2.6** *Sean  $v_i$  y  $v_j$  dos vértices conectados de una gráfica simple (no dirigida)  $G$ , entonces  $\mathcal{E}(v_i)\mathcal{E}(v_j) \geq 1$ .*

**Demostración:** Sea  $A(G)$  la matriz de adyacencia de  $G$ . Luego, podemos escribir  $A(G) = UDU^t$  Donde  $U = \{u_{kl}\}$  es ortogonal y  $D = \{d_{kl}\}$  es una matriz diagonal con  $d_{kk} = \lambda_k$  y los  $\lambda_k$ 's son los valores propios de  $A(G)$ . Luego, por el Teorema 7.2.2,  $\mathcal{E}(v_i) = \sum_k u_{ik}^2 |\lambda_k|$  y  $\mathcal{E}(v_j) = \sum_k u_{jk}^2 |\lambda_k|$ . Además  $A(G)_{ij} = \sum_k u_{ik} u_{jk} \lambda_k$ . Ya que  $v_i$  y  $v_j$  están conectados, entonces  $A(G)_{ij} = 1$ . Consideramos ahora los siguientes vectores

$$v = (u_{i1}\sqrt{|\lambda_1|}, \dots, u_{in}\sqrt{|\lambda_n|})$$

y

$$w = (u_{j1}\text{sign}(\lambda_1)\sqrt{|\lambda_1|}, \dots, u_{jn}\text{sign}(\lambda_n)\sqrt{|\lambda_n|}).$$

Luego,

$$\begin{aligned}\langle v, w \rangle^2 &= \left( \sum_k u_{ik} u_{jk} \lambda_k \right)^2 = 1, \\ \|v\|^2 &= \sum_k u_{ik} |\lambda_k| = \mathcal{E}(v_i),\end{aligned}$$

y

$$\|w\|^2 = \sum_k u_{jk} |\lambda_k| = \mathcal{E}(v_j).$$

Por la desigualdad de Cauchy-Schwarz se sigue que

$$1 = \langle v, w \rangle \leq \|v\| \|w\| = \mathcal{E}(v_i) \mathcal{E}(v_j)$$

■

El siguiente teorema [2], muestra que la energía de una gráfica es por lo menos dos veces el índice de Randić.

**Teorema 7.2.7** *Sea  $G$  una gráfica, entonces*

$$\mathcal{E}(G) \geq 2R(G),$$

donde  $R(G)$ , es el índice de Randić de  $G$ .

**Demostración:** Sea  $G = (V, E)$ . Para cada arista  $e = vw$  se define  $\mathcal{E}(e) = \mathcal{E}(v)/deg(v) + \mathcal{E}(w)/deg(w)$ . Por un lado,

$$\begin{aligned} \sum_{e \in E} \mathcal{E}(e) &= \sum_{e \in E} \left( \frac{\mathcal{E}(v)}{deg(v)} + \frac{\mathcal{E}(w)}{deg(w)} \right) \\ &= \sum_{uv \in E} \frac{\mathcal{E}(v)}{deg(v)} + \sum_{uv \in E} \frac{\mathcal{E}(u)}{deg(u)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{v \in V} \sum_{w \sim v} \frac{\mathcal{E}(v)}{deg(v)} + \frac{1}{2} \sum_{w \in V} \sum_{v \sim w} \frac{\mathcal{E}(w)}{deg(w)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{v \in V} \mathcal{E}(v) + \frac{1}{2} \sum_{w \in V} \mathcal{E}(w) \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{E}(G) + \frac{1}{2} \mathcal{E}(G) \\ &= \mathcal{E}(G). \end{aligned}$$

Por otro lado, por la desigualdad entre la media aritmética y la media geométrica, considerando la arista  $e = uv$  y usando el Teorema 7.2.6, tenemos que

$$\mathcal{E}(e) = \frac{\mathcal{E}(v)}{deg(v)} + \frac{\mathcal{E}(w)}{deg(w)} \geq 2 \sqrt{\frac{\mathcal{E}(v)\mathcal{E}(u)}{deg(v)deg(w)}} \geq 2 \frac{1}{\sqrt{deg(v)deg(w)}}.$$

Sumando sobre todas las aristas de  $G$ , se sigue que

$$\mathcal{E}(G) = \sum_{e \in E(G)} \mathcal{E}(e) \geq 2 \sum_{vw \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{deg(v)deg(w)}} = 2R(G).$$

■



# Bibliografía

- [1] H Kamarulhaili N Alawiah, Nader Jafari Rad, Akbar Jahanbani, and Hailiza Kamarulhaili. New upper bounds on the energy of a graph. *Match. Commun. Math. Comput. Chem*, 79:287–301, 2018.
- [2] Gerardo Arizmendi and Octavio Arizmendi. Energy of a graph and randic index. *Linear Algebra and its Applications*, 609:332–338, 2021.
- [3] Octavio Arizmendi, Jorge Fernandez Hidalgo, and Oliver Juarez-Romero. Energy of a vertex. *Linear Algebra and its Applications*, 557:464–495, 2018.
- [4] Ali Reza Ashrafi and Amir Loghman. Pi index of zig-zag polyhex nanotubes. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 55(2):447–452, 2006.
- [5] Albert-László Barabási. Network science book. *Network Science*, 625, 2014.
- [6] Norman Biggs, E Keith Lloyd, and Robin J Wilson. *Graph Theory, 1736-1936*. Oxford University Press, 1986.
- [7] Béla Bollobás and Paul Erdos. Graphs of extremal weights. *Ars combinatoria*, 50:225–233, 1998.
- [8] Béla Bollobás, Paul Erdős, and Amites Sarkar. Extremal graphs for weights. *Discrete mathematics*, 200(1-3):5–19, 1999.
- [9] Gilles Caporossi and Pierre Hansen. Variable neighborhood search for extremal graphs: 1 the autographix system. *Discrete Mathematics*, 212(1-2):29–44, 2000.
- [10] Dragos M Cvetkovic, Peter Rowlinson, and Slobodan Simic. *An introduction to the theory of graph spectra*. Cambridge University Press Cambridge, 2010.
- [11] Kinkar Ch Das. Sharp bounds for the sum of the squares of the degrees of a graph. *Kragujevac journal of Mathematics*, 25(25):19–41, 2003.
- [12] Kinkar Ch Das and I Gutman. Some properties of the second zagreb index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 52(1):3–1, 2004.
- [13] Dominique de Caen. An upper bound on the sum of squares of degrees in a graph. *Discrete Mathematics*, 185(1-3):245–248, 1998.
- [14] José Antonio de la Peña, Ivan Gutman, and Juan Rada. Estimating the estrada index. *Linear Algebra and its Applications*, 427(1):70–76, 2007.

- [15] Reinhard Diestel. Graph theory. 2005. electronic edition.
- [16] AA Dobrynin and I Gutman. On a graph invariant related to the sum of all distances in a graph. *Publications De*, 1994.
- [17] Zdeněk Dvořák, Bernard Lidický, and Riste Škrekovski. Randić index and the diameter of a graph. *European Journal of Combinatorics*, 32(3):434–442, 2011.
- [18] Ernesto Estrada. Characterization of 3d molecular structure. *Chemical Physics Letters*, 319(5-6):713–718, 2000.
- [19] Ernesto Estrada and Juan A Rodriguez-Velazquez. Subgraph centrality in complex networks. *Physical Review E*, 71(5):056103, 2005.
- [20] I. Gutman and N. Trinajstić. Graph theory and molecular orbitals. total  $\pi$ -electron energy of alternant hydrocarbons. *Chemical Physics Letters*, 17(4):535–538, 1972.
- [21] Ivan Gutman. Acyclic systems with extremal hückel  $\pi$ -electron energy. *Theoretica chimica acta*, 45(2):79–87, 1977.
- [22] Ivan Gutman. A new hyper-wiener index. *Croatica chemica acta*, 77(1-2):61–64, 2004.
- [23] Ivan Gutman and Kinkar Ch Das. The first zagreb index 30 years after. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 50(1):83–92, 2004.
- [24] Ivan Gutman and Andrey A Dobrynin. The szeged index—a success story. *Graph Theory Notes NY*, 34:37–44, 1998.
- [25] Ivan Gutman, Ernesto Estrada, and Juan A Rodríguez-Velázquez. On a graph-spectrum-based structure descriptor. *Croatica chemica acta*, 80(2):151–154, 2007.
- [26] Haruo Hosoya. Topological index. a newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 44(9):2332–2339, 1971.
- [27] Haruo Hosoya. Topological index and fibonacci numbers with relation to chemistry. *Fibonacci Quart*, 11(3):255–266, 1973.
- [28] Yumei Hu, Xueliang Li, and Yuain Yuan. Trees with minimum general randic index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 52:119–128, 2004.
- [29] Yumei Hu, Xueliang Li, and Yuan Yuan. Trees with maximum general randić index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 52:129–146, 2004.
- [30] Gutman Ivan. The energy of a graph. *Ber Math Statist Sekt Forschungs Graz*, 103:1–22, 1978.
- [31] Padmakar V Khadikar, Sneha Karmarkar, and Vijay K Agrawal. A novel  $\pi$  index and its applications to qspr/qsar studies. *Journal of chemical information and computer sciences*, 41(4):934–949, 2001.

- [32] Douglas J. Klein, Istvan Lukovits, and Ivan Gutman. On the definition of the hyper-wiener index for cycle-containing structures. *Journal of chemical information and computer sciences*, 35(1):50–52, 1995.
- [33] Jack H Koolen and Vincent Moulton. Maximal energy graphs. *Advances in Applied Mathematics*, 26(1):47–52, 2001.
- [34] Shuchao Li, Xuechao Li, and Wei Jing. On the extremal merrifield–simmons index and hosoya index of quasi-tree graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 157(13):2877–2885, 2009.
- [35] Xueliang Li and Yongtang Shi. A survey on the randic index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 59(1):127–156, 2008.
- [36] Jian-ping Liu and Bo-lian Liu. Bounds of the estrada index of graphs. *Applied Mathematics-A Journal of Chinese Universities*, 25(3):325–330, 2010.
- [37] AR Ashrafi-A Loghman. Pi index of armchair polyhex nanotube. *Ars Combinatoria*, 80:193–199, 2006.
- [38] László Lovász and József Pelikán. On the eigenvalues of trees. *Periodica Mathematica Hungarica*, 3(1-2):175–182, 1973.
- [39] Bernard J McClelland. Properties of the latent roots of a matrix: The estimation of  $\pi$ -electron energies. *The Journal of Chemical Physics*, 54(2):640–643, 1971.
- [40] Mohammad J Nadjafi-Arani, Gholam Hossein Fath-Tabar, and AR Ashrafi. Extremal graphs with respect to the vertex pi index. *Applied mathematics letters*, 22(12):1838–1840, 2009.
- [41] Mark Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, 03 2010.
- [42] K. Pattabiraman and P. Paulraja. Vertex and edge padmakar–ivan indices of the generalized hierarchical product of graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 160(9):1376 – 1384, 2012.
- [43] Milan Randic. Characterization of molecular branching. *Journal of the American Chemical Society*, 97(23):6609–6615, 1975.
- [44] Harry Wiener. Structural determination of paraffin boiling points. *Journal of the American Chemical Society*, 69(1):17–20, 1947. PMID: 20291038.
- [45] Bo Zhou. On estrada index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 60:485–492, 2008.