Cotas superiores e inferiores para diversos índices topológicos en grafos uniciclicos

Álvaro Martínez-Pérez
Universidad de Castilla-La Mancha

José M. Rodríguez
Universidad Carlos III de Madrid

May 22, 2023

Abstract

En este trabajo tratamos de obtener cotas óptimas para una amplia familia de índices topológicos sobre grafos unicíclicos, así como caracterizar los correspondientes grafos extremales. Entre los índices topológicos tratados se incluyen el primer índice de Zagreb, el índice *sum exdeg* variable, el segundo índice de Zagreb multiplicativo y los índices de Narumi-Katayama. Nuestros resultados proporcionan cotas superiores e inferiores óptimas para estos índices topológicos en grafos unicíclicos, fijando o no el grado máximo o el número de vértices de grado 1.

1 Introducción

Un descriptor topológico es un número que representa una estructura química a través del grafo molecular. Un descriptor topológico se llama índice topológico si se correlaciona con una propiedad molecular. Los índices topológicos se usan para estudiar las propiedades fisico-químicas de los compuestos químicos ya que capturan algunas propiedades en un simple número.

Una posible estrategia para definir un índice topológico es utilizar los grados de los vértices, como en el caso del primer y el segundo índice de Zagreb, M_1 y M_2, (ver [2] y [1]) respectivamente:

$$M_1(G) = \sum_{u\in V(G)} d_u^2, \qquad M_2(G) = \sum_{uv\in E(G)} d_u d_v,$$

donde uv denota la arista del grafo G que conecta los vértices u y v, y d_u es el grado del vértice u.

Miličević y Nikolić definen el *primer y el segundo índice de Zagreb variable* ([3]) como

$$M_1^\alpha(G) = \sum_{u\in V(G)} d_u^\alpha, \qquad M_2^\alpha(G) = \sum_{uv\in E(G)} (d_u d_v)^\alpha,$$

con $\alpha \in \mathbb{R}$.

En este caso, M_1^0 es n, M_1^1 es $2m$, M_1^2 es el primer índice de Zagreb M_1, M_1^{-1} es el índice inverso ID, M_1^3 es el índice olvidado F, etc.; también, M_2^0 es m, $M_2^{-1/2}$ es el índice de Randić, M_2^1 es el segundo índice de Zagreb M_2, M_2^{-1} es el índice modificado de Zagreb, etc. La idea detrás de los descriptores moleculares variables es que las varibles se pueden determinar durante la regresión para que el error de estimación para una propiedad concreta sea el mínimo posible.

Un importante campo de estudio en el ámbito de los índices topológicos es encontrar cotas para su valor en función de algunos parámetros. El objetivo de nuestro trabajo era usar una aproximación generalizada para obtener cotas (superiores e inferiores) óptimas para una amplia familia de índices topológicos restringiéndonos al caso de grafos unicíclicos, es decir, un grafo que contiene exactamente un ciclo.

2 Algunos resultados

Nótose que si G es un grafo unicíclico con n vértices entonces G tiene exactamente n aristas.

Dado $n \geq 3$, sea S_{2n} el conjuno de n-tuplas $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n)$ con $x_i \in \mathbb{Z}^+$ tales que $x_1 \geq x_2 \geq \cdots \geq x_n$ y $\sum_{i=1}^n x_i = 2n$.

Observación 2.1. *Sea G cualquier grafo unicíclico con n vértices $v_1, \dots, v_n$, ordenados de tal modo que si $\mathbf{x} = \mathbf{x}_G = (x_1, \dots, x_n)$ es la n-tupla donde x_i es el grado del vérice v_i, entonces $x_i \geq x_{i+1}$ para todo $1 \leq i \leq n-1$. Entonces, $\mathbf{x} \in S_{2n}$. A esta n-tupla la llamamos* secuencia de grados *del grafo G.*

Sea U_n^3 el grafo unicíclico obtenido añadiendo sobre uno de los vérices de C_3, $n-3$ hojas (vértices de grado 1). Nótese que U_n^3 es el único grafo cuyos vértices tienen la secuencia de grados

$$(n-1, 2, 2, 1, \dots, 1).$$

Dada cualquier función $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$, definimos un índice generalizado

$$I_f(G) = \sum_{u \in V(G)} f(d_u).$$

Además, si f toma valores positivos, definimos el índice

$$II_f(G) = \prod_{u \in V(G)} f(d_u).$$

Teorema 2.2. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función convexa, entonces*

$$nf(2) \leq I_f(G) \leq f(n-1) + 2f(2) + (n-3)f(1).$$

Además, la cota inferior se alcanza si G es un ciclo y la cota superior se alcanza si $G = U_n^3$.

Teorema 2.3. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función cóncava, entonces*

$$f(n-1) + 2f(2) + (n-3)f(1) \leq I_f(G) \leq nf(2).$$

Además, la cota inferior se alcanza si $G = U_n^3$ y la cota superior se alcanza si G es un ciclo.

Teorema 2.4. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función tal que $\log f$ es convexa, entonces*

$$f(2)^n \leq II_f(G) \leq f(n-1)f(2)^2 f(1)^{n-3}.$$

Además, la cota inferior se alcanza si G es un ciclo y la cota superior se alcanza si $G = U_n^3$.

Teorema 2.5. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función tal que $\log f$ es cóncava, entonces*

$$f(n-1)f(2)^2 f(1)^{n-3} \leq II_f(G) \leq f(2)^n.$$

Además, la cota inferior se alcanza si $G = U_n^3$ y la cota superior se alcanza si G es un ciclo.

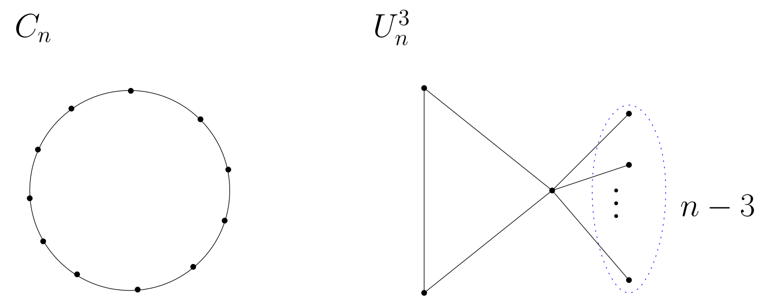


Figure 1: Si f es convexa, C_n da la cota inferior y U_n^3 la superior. Si f is cóncava, al revés.

Dado $n \geq 4$ y $\Delta \geq 3$, sea $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ la n-tupla:

- $y_1 = \Delta$,
- $y_j = 2$ for every $1 < j \leq n - \Delta + 2$,
- $y_j = 1$ for every $n - \Delta + 2 < j \leq n$.

Para todo $n \geq 4$ y $3 \leq \Delta \leq n-1$, sea $\mathcal{H}_n^\Delta$ el conjunto de grafos obtenidos a partir del ciclo C_k con $3 \leq k \leq n-\Delta+2$ pegando sobre el mismo vértice del ciclo, $\Delta-2$ (grafos) caminos de longitudes $m_1, m_2, \ldots, m_{\Delta-2} \geq 0$ de forma que $k + m_1 + m_2 + \cdots + m_{\Delta-2} = n$. Nótese que $G \in \mathcal{H}_n^\Delta$ si y solo si es un grafo unicíclico cuya secuencia de grados es $\mathbf{y}$.

Teorema 2.6. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices, máximo grado $\Delta \geq 3$ y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función convexa, entonces*

$$I_f(G) \geq f(\Delta) + (n - \Delta + 1)f(2) + (\Delta - 2)f(1),$$

y la igualdad se alcanza si y solo si $G \in \mathcal{H}_n^\Delta$.

Si $q \geq 2$ y $n \neq 2\Delta - 2$, sean $r = n - q(\Delta - 1) + 1$ y $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_n)$ tales que

- $z_j = \Delta$, para todo $1 \leq j \leq q$,
- $z_j = r$ si $j = q + 1$,
- $z_j = 1$ para todo $q + 1 < j \leq n$,

Sea $\mathcal{K}_n^\Delta$ el conjunto de grafos unicíclicos con secuencia de grados $\mathbf{z}$. Se comprueba que $\mathcal{K}_n^\Delta \neq \emptyset$.

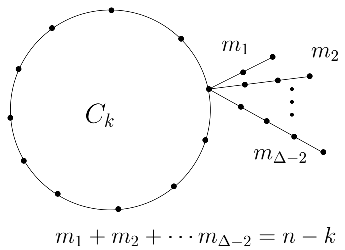
Teorema 2.7. *Si G es un grafo unicíclico con $n \geq 4$ vértices, máximo grado $\Delta \geq 3$, $q = \left\lfloor \frac{n}{\Delta-1} \right\rfloor$ y $f : [1, \infty) \to \mathbb{R}$ es una función convexa, entonces*

- *if $q = 1$ or $n = 2\Delta - 2$,*
$$I_f(G) \leq f(\Delta) + f(n - \Delta + 1) + f(2) + (n - 3)f(1),$$
- *if $q > 1$ and $n \neq 2\Delta - 2$,*
$$I_f(G) \leq qf(\Delta) + f(n - q(\Delta - 1) + 1) + (n - q - 1)f(1),$$

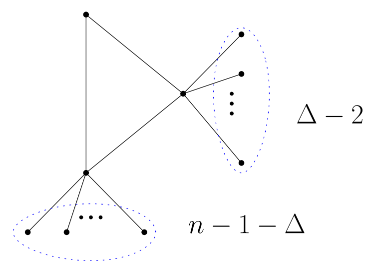
y la igualdad se alcanza si y solo si $G \in \mathcal{K}_n^\Delta$.

Resultados análogos se obtienen, invirtiendo las desigualdades, si la función f es cóncava en lugar de convexa.

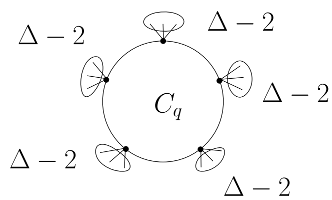
$G \in \mathcal{H}_n^\Delta$



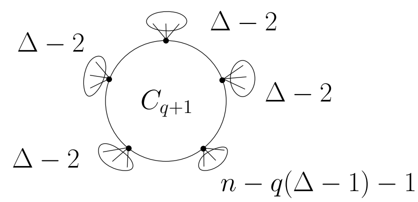
K_n^Δ if $q = 1$ or $n = 2\Delta - 2$



$G \in \mathcal{K}_n^\Delta$ if $q > 2,\ n = q(\Delta - 1)$



$G \in \mathcal{K}_n^\Delta$ if $q > 1,\ n > q(\Delta - 1)$



References

[1] I. Gutman, B. Ruščcić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Graph theory and molecular orbitals. XII. Acyclic polyenes, *J. Chem. Phys.* **62** (1975) 3399–3405.

[2] I. Gutman, N. Trinajstić, Graph theory and molecular orbitals. Total π–electron energy of alternant hydrocarbons, *Chem. Phys. Lett.* **17** (1972) 535–538.

[3] A. Miličević, S. Nikolić, On variable Zagreb indices, *Croat. Chem. Acta* **77** (2004) 97–101.

[4] Á. Martínez-Pérez, J.M. Rodríguez, Upper and lower bounds for topological indices on unicyclic graphs, Topol. Appl. (2023), 108591, doi: https://doi.org/10.1016/j.topol.2023.108591.