

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

1 8 0 3

# Índice de Hosoya de cadenas hexagonales VDB-ponderadas

**Mateo López Arango**

Universidad de Antioquia
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Instituto de Matemáticas
Medellín, Colombia
2025

# Índice de Hosoya de cadenas hexagonales VDB-ponderadas

**Mateo López Arango**

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de:

**Matemático**

Asesor:

Roberto Cruz Rodes, Ph.D.

Universidad de Antioquia

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Instituto de Matemáticas

Medellín, Colombia

2025

# Agradecimientos

A mis padres, Arelis y Sigifredo, por su apoyo incondicional y constante en todos los aspectos de mi vida académica y personal.

A mi asesor, Roberto, por su acompañamiento, apoyo y disposición durante todas las etapas de la elaboración de este trabajo. Su guía y conocimientos han sido esenciales para el desarrollo de este escrito.

Al profesor Juan Rada, por sus sugerencias y correcciones a las últimas versiones de este documento.

# Resumen

El objetivo principal de este trabajo es el estudio del índice de Hosoya $Z(G;\varphi)$ de grafos ponderados $(G;\varphi)$, donde $G$ es una cadena hexagonal con una función de peso inducida por un índice topológico basado en el grado de los vértices, denotado por $\varphi$. Una cadena hexagonal es un tipo especial de sistema hexagonal que representa de manera natural los hidrocarburos bencenoides, los cuales son de gran importancia en la Química. Por otro lado, los índices topológicos basados en el grado de los vértices son descriptores moleculares que desempeñan un papel significativo en la Teoría de Grafos Químicos, especialmente en los estudios de la relación cuantitativa estructura-propiedad (QSPR) y la relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR).

Específicamente, si $G$ es una cadena hexagonal y $\varphi$ es un índice topológico basado en el grado de los vértices, presentamos un método para calcular $Z(G;\varphi)$ en términos de productos de cuatro tipos de matrices de tamaño $4 \times 4$ asociadas a $\varphi$. Como consecuencia, bajo ciertas condiciones sobre $\varphi$, demostramos que la cadena hexagonal lineal $\varphi$-ponderada alcanza el valor mínimo del índice de Hosoya, entre todas las cadenas hexagonales $\varphi$-ponderadas.

*Palabras clave:* índice de Hosoya de grafos ponderados, cadenas hexagonales, índices topológicos basados en el grado de los vértices.

# Índice general

**1. Introducción** **1**

**2. Preliminares** **3**
2.1. Conceptos básicos . . . . . 3
2.2. Sistemas hexagonales, sistemas hexagonales catacondensados y cadenas hexagonales . . . . . 6
2.3. Índices topológicos . . . . . 7
2.3.1. Índice de Hosoya de un grafo ponderado . . . . . 7
2.3.2. Índices basados en el grado de los vértices . . . . . 9

**3. Índice de Hosoya de cadenas hexagonales ponderadas** **11**

**4. Índice VDB-Hosoya de cadenas hexagonales** **16**
4.1. Índice VDB-Hosoya de cadenas hexagonales . . . . . 16
4.2. Valor mínimo del índice VDB-Hosoya entre las cadenas hexagonales . . 20

**5. Conclusiones** **28**

**Bibliografía** **29**

# CAPÍTULO 1

## Introducción

La representación de moléculas mediante grafos, en los cuales los vértices corresponden a los átomos y las aristas representan los enlaces covalentes entre ellos (ver Figura 1.1), es ampliamente utilizada en diversos modelos de la Química Matemática.

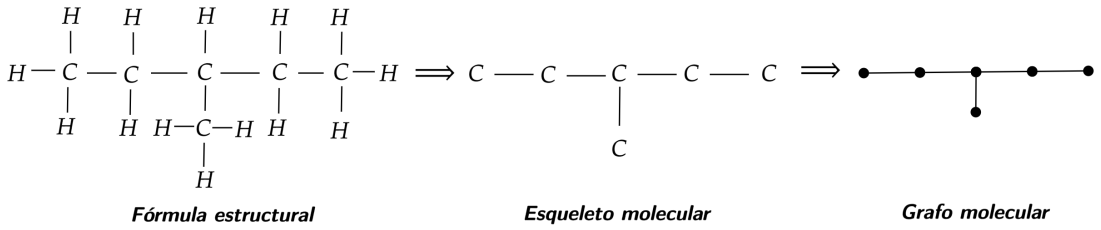


Figura 1.1: Representación esquemática de una molécula por medio de un grafo.

Los índices topológicos son valores numéricos asociados al grafo molecular de un compuesto químico, que permiten correlacionar la estructura química con diversas propiedades físicas, la reactividad química o la actividad biológica. Estos índices desempeñan un papel importante, especialmente en los estudios de relación cuantitativa estructura-propiedad (QSPR) y relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR) [13, 16].

Uno de estos índices topológicos es el índice de Hosoya, introducido por Haruo Hosoya en 1971 en el artículo [11]. En este trabajo, se obtuvo una buena correlación entre los puntos de ebullición de una familia de alcanos y los correspondientes valores del índice de Hosoya. Para una revisión de los aspectos matemáticos del índice de Hosoya, pueden consultarse los artículos [12, 18] y las referencias bibliográficas que allí se citan.

Por otro lado, los índices topológicos basados en el grado de los vértices (índices VDB, para abreviar) han sido, y continúan siendo, objeto de una extensa investigación en la literatura matemática y química reciente [4, 7, 8, 13, 14].

El concepto de índice de Hosoya de un grafo ponderado fue introducido recientemente por Cruz, Gutman y Rada en [2] como una extensión natural del índice de Hosoya de un grafo. Los autores presentan el índice de Hosoya de grafos VDB-ponderados, el

cual se basa en la combinación de dos tipos de índices ampliamente utilizados en la Química Matemática: los índices VDB y el índice de Hosoya. En su estudio, los autores analizan el índice aplicado a la familia de árboles con $n$ vértices.

En este trabajo, presentamos un método para calcular el índice de Hosoya del grafo ponderado $(G, \varphi)$, cuando $G$ es una cadena hexagonal con un peso inducido por un índice topológico basado en el grado de los vértices $\varphi$. Específicamente, mostramos que el índice de Hosoya de $(G, \varphi)$ se puede calcular en términos de un producto de matrices de $4 \times 4$ asociadas al índice topológico VDB $\varphi$, evaluado en un vector fijo $X_0$ también asociado a $\varphi$. Como consecuencia, resolvemos el problema del valor mínimo del índice de Hosoya sobre el conjunto de las cadenas hexagonales VDB-ponderadas.

El estudio aquí propuesto se estructura de la siguiente manera: en el Capítulo 2 se presentan los resultados preliminares y la terminología esencial que serán utilizados a lo largo del desarrollo del tema; en el Capítulo 3 se analiza el índice de Hosoya de las cadenas hexagonales ponderadas; y en el Capítulo 4 se aborda el caso de una cadena VDB-ponderada, resolviendo el problema del valor mínimo del índice de Hosoya para las cadenas hexagonales VDB-ponderadas.

# CAPÍTULO 2

## Preliminares

El propósito de este capítulo es familiarizar al lector con la terminología y la notación que se utilizarán a lo largo del texto. Introduciremos algunos conceptos básicos de la Teoría de Grafos [1] y, posteriormente, definiremos algunas ideas fundamentales sobre los sistemas hexagonales [9].

### 2.1. Conceptos básicos

**Definición 2.1.** Un *grafo (simple)* es un par ordenado $G = (V(G), E(G))$, donde $V(G)$ es un conjunto finito no vacío y $E(G)$ es un conjunto de pares no ordenados de elementos de $V(G)$, es decir,

$$E(G) \subseteq \{\{u, v\} : u, v \in V(G), u \neq v\}.$$

Los elementos de $V(G)$ se llaman *vértices* de $G$, y los elementos de $E(G)$ se llaman *aristas* de $G$. De este modo, las colecciones $V(G)$ y $E(G)$ se llaman, respectivamente, *conjunto de vértices* y *conjunto de aristas* de $G$. Además, una arista $\{u, v\} \in E(G)$ se suele denotar simplemente por $uv$.

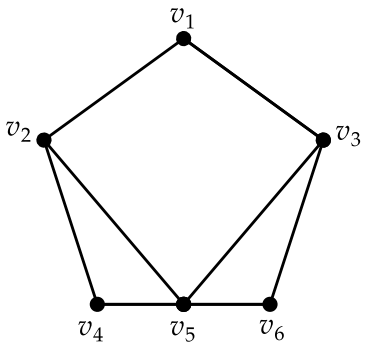


Figura 2.1: Grafo $G = (V(G), E(G))$ del Ejemplo 2.2

*Ejemplo* 2.2. Consideremos los conjuntos

$$V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\},$$
$$E(G) = \{v_1v_2, v_1v_3, v_2v_4, v_2v_5, v_3v_5, v_3v_6, v_4v_5, v_5v_6\}.$$

El par ordenado $G = (V(G), E(G))$ representa un grafo. Este grafo puede ser ilustrado mediante un diagrama, como el de la Figura 2.1, donde cada vértice se representa por un punto y cada arista se representa por un segmento de recta o un arco que une los dos puntos correspondientes a la arista.

**Definición 2.3.** Decimos que un grafo $H$ es un *subgrafo* de un grafo $G$ si $V(H) \subseteq V(G)$ y $E(H) \subseteq E(G)$.

**Definición 2.4.** Sea $G$ un grafo. Decimos que:

1. Los vértices $u, v \in V(G)$ con $u \neq v$ son *adyacentes* (o *vecinos*) en $G$, si $uv$ es una arista de $G$.

2. La arista $e \in E(G)$ es *incidente* al vértice $u \in V(G)$, si existe $v \in V(G)$ tal que $e = uv$.

3. Las aristas $e_1, e_2 \in E(G)$ con $e_1 \neq e_2$ son *adyacentes* si existe un vértice $u \in V(G)$ tal que $e_1$ y $e_2$ son incidentes a $u$. En este caso, decimos que $e_1$ y $e_2$ comparten un vértice en común.

**Definición 2.5.** Sea $G$ un grafo.

1. El conjunto de vecinos de un vértice $v \in V(G)$ se llama *vecindad* de $v$ y se denota por $N(v)$.

2. El *grado* de un vértice $v \in V(G)$ es la cardinalidad de $N(v)$.

**Definición 2.6.** Sea $G$ un grafo y sean $u$ y $v$ vértices en $G$.

1. Un *recorrido de u a v* (o un *uv-recorrido*) es una secuencia finita $v_0 v_1 \dots v_{n-1} v_n$ de vértices de $G$, tal que $v_0 = u$, $v_n = v$, y para todo $i = 1, 2, \dots, n$, se cumple que $v_{i-1}$ y $v_i$ son vecinos.

2. Un *camino de u a v* (o un *uv-camino*) es un recorrido de $u$ a $v$ que no repite vértices.

3. Un *ciclo* es un recorrido $v_1 v_2 \cdots v_n$ en $G$ tal que $v_1 v_2 \cdots v_{n-1}$ es un camino y $v_n = v_1$.

**Definición 2.7.** Sea $G$ un grafo y sean $u, v \in V(G)$. Decimos que $u$ y $v$ están *conectados* si existe un $uv$-camino en $G$.

**Definición 2.8.** Un grafo $G$ se dice *conexo* si, para todo $u, v \in V(G)$, existe un $uv$-camino en $G$.

**Definición 2.9.** Un *árbol* es un grafo conexo que no contiene ciclos.

**Definición 2.10.** Sea $\varnothing \neq V' \subseteq V(G)$. El *subgrafo de G inducido por V'*, denotado por $G[V']$, es el subgrafo de $G$ cuyo conjunto de vértices es $V'$ y cuyo conjunto de aristas está compuesto por aquellas aristas de $G$ cuyos vértices pertenecen a $V'$.

**Definición 2.11.** Sea $\varnothing \neq E' \subseteq E(G)$. El *subgrafo de G inducido por E'*, denotado por $G[E']$, es el subgrafo de $G$ cuyo conjunto de aristas es $E'$ y cuyo conjunto de vértices está formado por todos los vértices que son incidentes en alguna arista de $E'$. Este subgrafo se denomina un *subgrafo arista-inducido* de $G$.

**Definición 2.12** (Eliminación de vértices y aristas en un grafo)**.** Sea $G$ un grafo, con conjunto de vértices $V$ y conjunto de aristas $E$.

1. Si $S \subsetneq V$, el subgrafo de $G$ obtenido al eliminar los vértices en $S$ es el subgrafo $G[V \setminus S]$, el cual se denota por $G - S$. Si $S = \{v\}$, entonces $G - S$ se denota simplemente por $G - v$.

2. Si $X \subseteq E$, el subgrafo de $G$ obtenido al eliminar las aristas en $X$ es el subgrafo $G[E \setminus X]$, el cual se denota por $G - X$. Si $X = \{e\}$, entonces $G - X$ es denotado simplemente por $G - e$.

*Observación* 2.1. Notemos que, cuando un vértice es eliminado de $G$, todas las aristas incidentes a él también se eliminan de $G$. En cambio, la eliminación de una arista de $G$ no afecta a los vértices de $G$.

**Definición 2.13.** Sea $G$ un grafo conexo. Decimos que $G$ es $k$-conexo si es necesario eliminar al menos $k$ vértices para que el grafo resultante deje de ser conexo.

**Definición 2.14.** Decimos que un grafo $G$ es *planar* si existe una representación de $G$ en el plano tal que sus aristas se intersecan únicamente en los vértices. En este contexto, un *grafo plano* de $G$ es cualquier representación de $G$ en el plano que cumpla con esta condición.

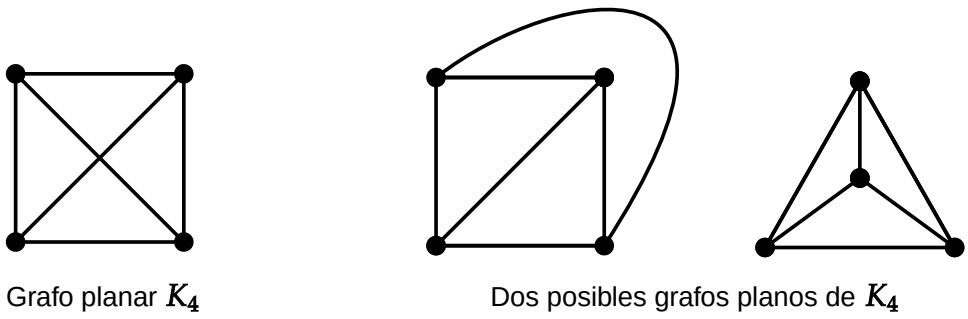


Figura 2.2: Un grafo planar con dos grafos planos

*Ejemplo* 2.15. En la Figura 2.2 se puede observar el grafo planar $K_4$ junto con dos representaciones planas de $K_4$.

*Observación* 2.2. Notemos que, si $G$ es un grafo plano, entonces $G$ particiona el plano en un número finito de regiones conexas. Las clausuras topológicas de cada una de estas regiones se denominan *caras interiores*. La región no acotada se denomina *cara exterior*. De este modo, cada grafo plano tiene exactamente una cara exterior. En la Figura 2.3 se muestra un grafo plano con cuatro caras: $C_1, C_2$ y $C_3$ son caras interiores y $C_4$ es la cara exterior.

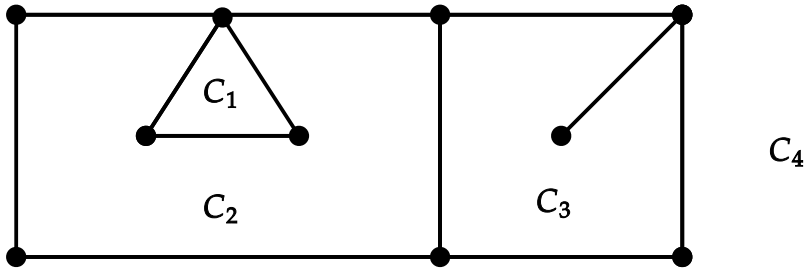


Figura 2.3: Grafo plano con cuatro caras

## 2.2. Sistemas hexagonales, sistemas hexagonales catacondensados y cadenas hexagonales

**Definición 2.16.** Un *sistema hexagonal* es un grafo plano 2-conexo en el que todas las caras interiores son hexágonos regulares, congruentes entre sí.

**Definición 2.17.** El grafo dual interno $DI(\mathcal{H})$ de un sistema hexagonal $\mathcal{H}$ es un grafo plano en el que $V(DI(\mathcal{H}))$ es el conjunto de hexágonos de $\mathcal{H}$, y dos aristas de $DI(\mathcal{H})$ son adyacentes si, y solo si, los correspondientes hexágonos comparten una arista en común. (Ver Figura 2.4.)

**Definición 2.18.** Un *sistema hexagonal catacondensado* es un sistema hexagonal cuyo grafo dual interno es un árbol.

**Definición 2.19.** Una *cadena hexagonal* es un sistema hexagonal catacondensado cuyo grafo dual interno es un camino. Denotaremos la colección de todas las cadenas hexagonales con $h$ hexágonos por $\mathcal{C}_h$.

En las cadenas hexagonales, se distinguen varios tipos de hexágonos: los hexágonos terminales (dos en total, uno inicial y otro final), los hexágonos angulares y los hexágonos lineales (ver Figura 2.5).

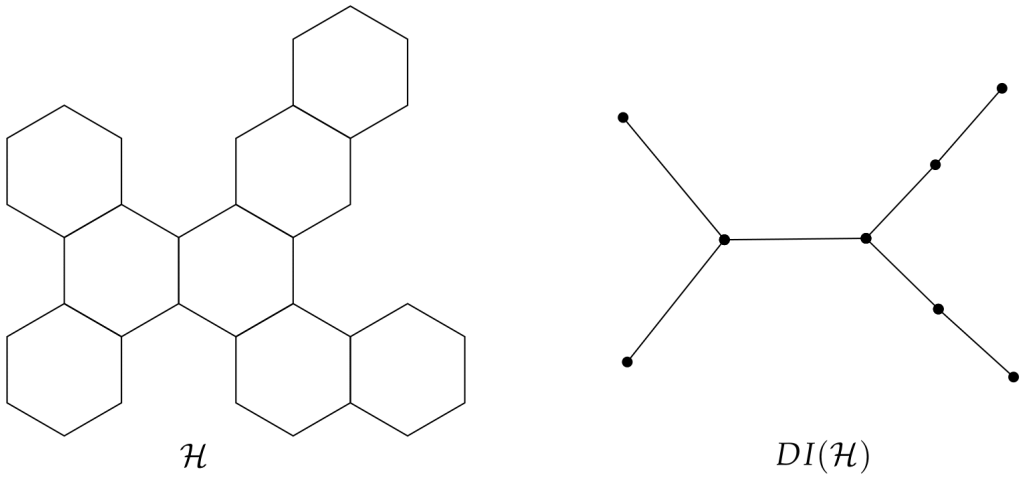


Figura 2.4: Sistema hexagonal catacondensado $\mathcal{H}$ y su respectivo grafo dual interno $DI(\mathcal{H})$

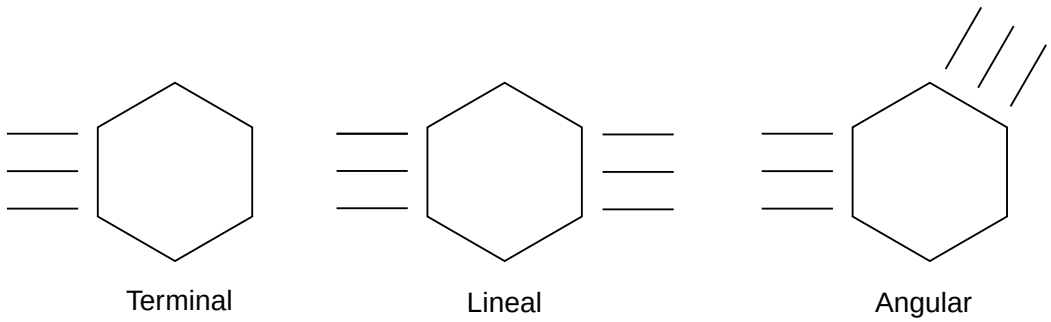


Figura 2.5: Tipos de hexágonos en las cadenas hexagonales

**Definición 2.20.** Una *cadena hexagonal lineal*, o simplemente *cadena lineal*, es una cadena hexagonal en la que todos los hexágonos son lineales o terminales. A la cadena lineal con $h$ hexágonos se denota por $L_h$. Notemos que $\mathcal{C}_1 = \{L_1\}$ y que $\mathcal{C}_2 = \{L_2\}$.

## 2.3. Índices topológicos

### 2.3.1. Índice de Hosoya de un grafo ponderado

**Definición 2.21.** Sea $G = (V(G), E(G))$ un grafo simple. Un conjunto de aristas $M \subseteq E(G)$ se llama *emparejamiento* de $G$ si ningún par de aristas de $M$ comparten un vértice común. Un emparejamiento de $G$ con $k$ aristas se denomina *k-emparejamiento*. Se denota por $m(G, k)$ el número de $k$-emparejamientos de $G$, y se asume que $m(G, 0) = 1$.

**Definición 2.22** ([11])**.** El *índice de Hosoya* de un grafo simple $G$, denotado por $Z(G)$, se

define como

$$Z(G) = \sum_{k \geq 0} m(G, k).$$

**Definición 2.23.** Un *grafo ponderado* es un par $(G; \omega)$, donde $G = (V, E)$ es un grafo simple y $\omega : E \to \mathbb{R}^+$ es una función de peso que asigna un número real positivo a cada arista de $G$. En este caso, también diremos que $G$ es un grafo $\omega$-ponderado.

**Definición 2.24** ([2])**.** Sea $(G; \omega)$ un grafo ponderado y $k$ un entero no negativo. El número de $k$-emparejamientos de $(G; \omega)$ se denota por $m((G; \omega), k)$ y se define como:

$$m((G; \omega), 0) = 1,$$

y para $k \geq 1$,

$$m((G; \omega), k) = \sum_{U \in \mathcal{M}_k} \left[ \prod_{u \in U} \omega(u) \right],$$

donde $\mathcal{M}_k$ es el conjunto de los $k$-emparejamientos de $G$.

**Definición 2.25** ([2])**.** El índice de Hosoya de $(G; \omega)$, denotado por $Z(G; \omega)$, se define como:

$$Z(G; \omega) = \sum_{k \geq 0} m((G; \omega), k).$$

Claramente, si $\omega(e) = 1$ para todo $e \in E(G)$, entonces se obtienen los conceptos usuales de $k$-emparejamientos y del índice de Hosoya del grafo subyacente $G$.

*Observación* 2.3. Sean $(G; \omega)$ un grafo ponderado y $H$ un subgrafo de $G$. Denotamos por $(H; \omega)$ al grafo ponderado $(H; \omega|_{E(H)})$, donde $\omega|_{E(H)}$ es la restricción de $\omega$ a $E(H)$.

**Proposición 2.26** ([2])**.** El índice de Hosoya de un grafo ponderado satisface las siguientes propiedades:

1. Si $(G_1; \omega), \ldots, (G_r; \omega)$ son las componentes conexas ponderadas del grafo ponderado $(G; \omega)$, entonces

$$Z(G; \omega) = \prod_{i=1}^{r} Z(G_i; \omega). \tag{2.1}$$

2. Sea $e = uv$ una arista de $G$. Entonces

$$Z(G; \omega) = Z(G - uv; \omega) + \omega(e) Z(G - u - v; \omega). \tag{2.2}$$

3. Si $u$ es un vértice aislado de $G$, entonces

$$Z(G; \omega) = Z(G - u; \omega). \tag{2.3}$$

Generalizamos el concepto de vector de Hosoya de un grafo, introducido en [3], al caso de un grafo ponderado.

**Definición 2.27.** Sea $uv$ una arista del grafo ponderado $(G;\omega)$. Definimos el vector de Hosoya de $(G;\omega)$ en $uv$, denotado por $Z_{uv}(G;\omega)$, como el vector columna

$$Z_{uv}(G;\omega) = (Z(G;\omega); Z(G-u;\omega), Z(G-v;\omega), Z(G-u-v;\omega))^{\intercal}.$$

Notemos que

$$Z_{uv}(G;\omega) = PZ_{vu}(G;\omega),$$

donde $P$ es la matriz permutación

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

En el caso en que el grafo ponderado $(G;\omega)$ esté formado únicamente por la arista $st$ con peso $\omega_{st}$, el vector de Hosoya será denotado por $X_0(\omega)$ y estará dado por

$$X_0(\omega) = (1+\omega_{st}, 1, 1, 1)^{\intercal}.$$

### 2.3.2. Índices basados en el grado de los vértices

**Definición 2.28.** Un índice topológico basado en el grado de los vértices (índice VDB, para abreviar) $\varphi$ se define para un grafo $G$ como

$$\varphi = \varphi(G) = \sum_{uv \in E} \varphi_{d_G(u), d_G(v)}$$

donde $d_G(u)$ denota el grado del vértice $u \in V(G)$, y $\varphi_{i,j}$ es una función bivariada simétrica (es decir, $\varphi_{i,j} = \varphi_{j,i}$).

Algunos de los índices topológicos VDB más conocidos son los siguientes:

1. El índice First Zagreb [10], denotado por $\mathcal{FZ}$ y definido por $\varphi_{i,j} = i + j$;
2. El índice Second Zagreb [10], denotado por $\mathcal{SZ}$ y definido por $\varphi_{i,j} = ij$;
3. El índice Randić [15], denotado por $\mathcal{R}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{ij}}$;
4. El índice Harmonic [19], denotado por $\mathcal{H}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \frac{2}{i+j}$;
5. El índice Geometric-Arithmetic [17], denotado por $\mathcal{GA}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \frac{2\sqrt{ij}}{i+j}$;

6. El índice Sum-Connectivity [20], denotado por $\mathcal{SC}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{i+j}}$;

7. El índice Atom-Bond-Connectivity [5], denotado por $\mathcal{ABC}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \sqrt{\frac{i+j-2}{ij}}$;

8. El índice Augmented Zagreb [6], denotado por $\mathcal{AZ}$ y definido por $\varphi_{i,j} = \left(\frac{ij}{i+j-2}\right)^3$.

# CAPÍTULO 3

## Índice de Hosoya de cadenas hexagonales ponderadas

Nuestro principal interés en este capítulo es el estudio del índice de Hosoya de cadenas hexagonales ponderadas. Para tal fin, presentamos procedimientos de reducción para calcular el vector de Hosoya de una cadena hexagonal ponderada. Estos procedimientos generalizan los procedimientos introducidos en [3] para el cálculo del vector de Hosoya de cadenas hexagonales.

**Proposición 3.1.** Sea $(G;\omega)$ el grafo ponderado representado en la Figura 3.1. Entonces

$$Z_{uv}(G;\omega) = Q(\omega)Z_{st}(H;\omega),$$

donde

$$Q(\omega) = \begin{pmatrix} (1+\omega_{ux})(1+\omega_{vy})+\omega_{uv} & \omega_{xs}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv}) & \omega_{yt}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv}) & \omega_{yt}\omega_{xs}(1+\omega_{uv}) \\ 1+\omega_{vy} & \omega_{xs}(1+\omega_{vy}) & \omega_{yt} & \omega_{yt}\omega_{xs} \\ 1+\omega_{ux} & \omega_{xs} & \omega_{yt}(1+\omega_{ux}) & \omega_{yt}\omega_{xs} \\ 1 & \omega_{xs} & \omega_{yt} & \omega_{yt}\omega_{xs} \end{pmatrix}$$

*Demostración.* Eliminando las aristas independientes $xs$ y $yt$ de $G$ (ver Figura 3.1) y usando las relaciones (2.1), (2.2) y (2.3) obtenemos que

$$\begin{aligned} Z(G;\omega) &= Z(G-yt-xs;\omega) + \omega_{xs}Z(G-yt-x-s;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}Z(G-y-t-xs;\omega) + \omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-y-t-x-s;\omega) \\ &= [(1+\omega_{ux})(1+\omega_{vy})+\omega_{uv}]Z(H;\omega) + \omega_{xs}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv})Z(H-s;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv})Z(H-t;\omega) + \omega_{yt}\omega_{xs}(1+\omega_{uv})Z(H-s-t;\omega) \\ &= \begin{pmatrix} 1+\omega_{ux}+\omega_{uv}+\omega_{vy}+\omega_{ux}\omega_{vy} \\ \omega_{xs}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv}) \\ \omega_{yt}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv}) \\ \omega_{yt}\omega_{xs}(1+\omega_{uv}) \end{pmatrix}^{\mathsf{T}} \cdot Z_{st}(H;\omega) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
Z(G-u;\omega) &= Z(G-u-yt-xs;\omega)+\omega_{xs}Z(G-u-yt-x-s;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}Z(G-u-y-t-xs;\omega)+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-u-y-t-x-s;\omega)\\
&=(1+\omega_{vy})Z(H;\omega)+\omega_{xs}(1+\omega_{vy})Z(H-s;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}Z(H-t,\omega)+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(H-s-t;\omega)\\
&=(1+\omega_{vy},\omega_{xs}(1+\omega_{vy}),\omega_{yt},\omega_{yt}\omega_{xs})\cdot Z_{st}(H;\omega)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Z(G-v;\omega) &= Z(G-v-yt-xs;\omega)+\omega_{xs}Z(G-v-yt-x-s;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}Z(G-v-y-t-xs;\omega)+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-v-y-t-x-s;\omega)\\
&=(1+\omega_{ux})Z(H;\omega)+\omega_{xs}Z(H-s;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}(1+\omega_{ux})Z(H-t,\omega)+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(H-s-t;\omega)\\
&=(1+\omega_{ux},\omega_{xs},\omega_{yt}(1+\omega_{ux}),\omega_{yt}\omega_{xs})\cdot Z_{st}(H;\omega)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Z(G-u-v;\omega) &= Z(G-u-v-yt-xs;\omega)+\omega_{xs}Z(G-u-v-yt-x-s;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}Z(G-u-v-y-t-xs;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-u-v-y-t-x-s;\omega)\\
&=Z(H;\omega)+\omega_{xs}Z(H-s;\omega)+\omega_{yt}Z(H-t;\omega)\\
&\quad+\omega_{yt}\omega_{xs}Z(H-s-t;\omega)\\
&=(1,\omega_{xs},\omega_{yt},\omega_{yt}\omega_{xs})\cdot Z_{st}(H;\omega)
\end{aligned}
$$

□

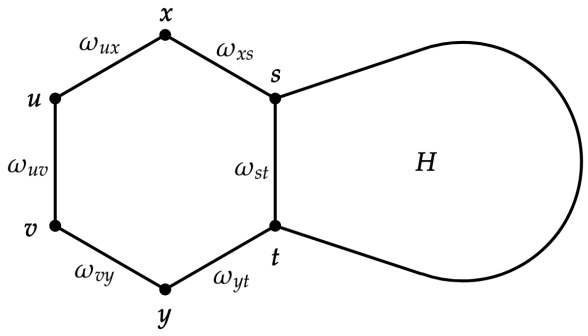


Figura 3.1: Grafo usado en las Proposiciones 3.1 y 3.2

**Proposición 3.2.** Sea $(G,\omega)$ el grafo ponderado representado en la Figura 3.1. Entonces,

$$Z_{vy}(G;\omega)=S(\omega)Z_{st}(H;\omega),$$

donde

$$S(\omega) = \begin{pmatrix} (1+\omega_{vy})(1+\omega_{ux})+\omega_{uv} & \omega_{xs}(1+\omega_{vy}+\omega_{uv}) & \omega_{yt}(1+\omega_{ux}+\omega_{uv}) & \omega_{yt}\omega_{xs}(1+\omega_{uv}) \\ 1+\omega_{ux} & \omega_{xs} & \omega_{yt}(1+\omega_{ux}) & \omega_{yt}\omega_{xs} \\ 1+\omega_{ux}+\omega_{uv} & \omega_{xs}+\omega_{xs}\omega_{uv} & 0 & 0 \\ 1+\omega_{ux} & \omega_{xs} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

*Demostración.* Eliminando las aristas independientes $uv, xs$ y $yt$ de $G$ (ver Figura 3.1) y usando las relaciones (2.1), (2.2) y (2.3) obtenemos que

$$\begin{aligned} Z(G) &= Z(G-yt-xs-uv;\omega) + \omega_{uv}Z(G-yt-xs-u-v;\omega) \\ &\quad + \omega_{xs}Z(G-yt-uv-x-s;\omega) + \omega_{xs}\omega_{uv}Z(G-yt-x-s-u-v;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}Z(G-xs-uv-y-t;\omega) + \omega_{yt}\omega_{uv}Z(G-xs-y-t-u-v;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-uv-y-t-x-s;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}\omega_{xs}\omega_{uv}Z(G-y-t-x-s-u-v;\omega) \\ &= [(1+\omega_{vy})(1+\omega_{ux})+\omega_{uv}]Z(H;\omega) + [\omega_{xs}(1+\omega_{vy})+\omega_{xs}\omega_{uv}]Z(H-s;\omega) \\ &\quad + [\omega_{yt}(1+\omega_{ux})+\omega_{yt}\omega_{uv}]Z(H-t;\omega) \\ &\quad + [\omega_{yt}\omega_{xs}+\omega_{yt}\omega_{xs}\omega_{uv}]Z(H-s-t;\omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G-v;\omega) &= Z(G-v-yt-xs;\omega) + \omega_{xs}Z(G-v-yt-x-s;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}Z(G-v-xs-y-t;\omega) + \omega_{yt}\omega_{xs}Z(G-v-y-t-x-s;\omega) \\ &= (1+\omega_{ux})Z(H;\omega) + \omega_{xs}Z(H-s;\omega) + \omega_{yt}(1+\omega_{ux})Z(H-t;\omega) \\ &\quad + \omega_{yt}\omega_{xs}Z(H-s-t;\omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G-y;\omega) &= Z(G-y-xs-uv;\omega) + \omega_{uv}Z(G-y-xs-u-v;\omega) \\ &\quad + \omega_{xs}Z(G-y-uv-x-s;\omega) + \omega_{xs}\omega_{uv}Z(G-y-x-s-u-v;\omega) \\ &= [(1+\omega_{ux})+\omega_{uv}]Z(H;\omega) + [\omega_{xs}+\omega_{xs}\omega_{uv}]Z(H-s;\omega) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(G-v-y;\omega) &= Z(G-v-y-xs;\omega) + \omega_{xs}Z(G-v-y-x-s;\omega) \\ &= (1+\omega_{ux})Z(H;\omega) + \omega_{xs}Z(H-s;\omega) \end{aligned}$$

□

*Observación* 3.1. Cuando el contexto permita identificar la función de peso $\omega$, escribiremos simplemente $Q = Q(\omega), S = S(\omega)$ y $X_0 = X_0(\omega)$.

Como ilustraremos en el siguiente ejemplo, las Proposiciones 3.1 y 3.2 pueden utilizarse para calcular el índice de Hosoya de cualquier cadena hexagonal ponderada.

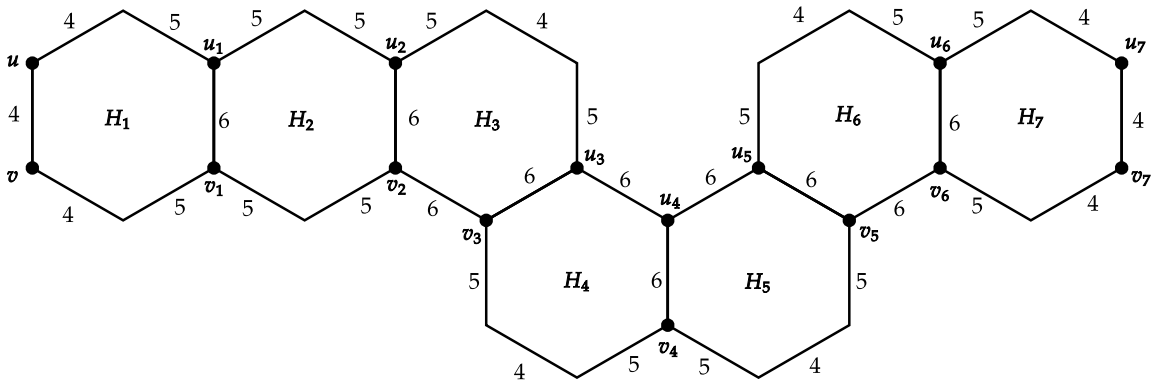


Figura 3.2: Grafo usado en el Ejemplo 3.3

.

*Ejemplo* 3.3. Calculemos el índice de Hosoya de la cadena hexagonal ponderada $(H;\omega)$ que se ilustra en la Figura 3.2. Para cada $j = 2,\ldots,6$, denotamos por $(H^{(j)};\omega)$ a la subcadena hexagonal ponderada de $(H;\omega)$ que inicia en la arista $u_{j-1}v_{j-1}$ y termina en la arista $u_7v_7$. Aplicando las Proposiciones 3.1 y 3.2 obtenemos que

$$\begin{aligned}
Z_{uv}(H;\omega) &= Q_{H_1}Z_{u_1v_1}\left(H^{(2)};\omega\right) = Q_{H_1}Q_{H_2}Z_{u_2v_2}\left(H^{(3)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}Z_{u_3v_3}\left(H^{(4)};\omega\right) = Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PZ_{v_3u_3}\left(H^{(4)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PS_{H_4}Z_{v_4u_4}\left(H^{(5)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PS_{H_4}S_{H_5}Z_{v_5u_5}\left(H^{(6)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PS_{H_4}S_{H_5}PZ_{u_5v_5}\left(H^{(6)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PS_{H_4}S_{H_5}PS_{H_6}Z_{u_6v_6}\left(H^{(7)};\omega\right)\\
&= Q_{H_1}Q_{H_2}S_{H_3}PS_{H_4}S_{H_5}PS_{H_6}Q_{H_7}X_0,
\end{aligned}$$

donde

$$Q_{H_1} = \begin{pmatrix} 29 & 45 & 45 & 125\\ 5 & 25 & 5 & 25\\ 5 & 5 & 25 & 25\\ 1 & 5 & 5 & 25 \end{pmatrix}, Q_{H_2} = \begin{pmatrix} 42 & 60 & 60 & 175\\ 6 & 30 & 5 & 25\\ 6 & 5 & 30 & 25\\ 1 & 5 & 5 & 25 \end{pmatrix}, Q_{H_7} = \begin{pmatrix} 42 & 48 & 48 & 112\\ 6 & 24 & 4 & 16\\ 6 & 4 & 24 & 16\\ 1 & 4 & 4 & 16 \end{pmatrix},$$

$$S_{H_3} = S_{H_4} = S_{H_5} = S_{H_6} = \begin{pmatrix} 40 & 60 & 60 & 180\\ 5 & 5 & 30 & 30\\ 10 & 30 & 0 & 0\\ 5 & 5 & 0 & 0 \end{pmatrix}, X_0 = \begin{pmatrix} 5\\ 1\\ 1\\ 1 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto,

$$Z_{uv}(H;\omega) = (60088205420000, 13540312100000, 13729597100000, 4955396980000)^{\mathsf{T}}$$

En particular, $Z(H;\omega) = 60088205420000$.

# CAPÍTULO 4

## Índice VDB-Hosoya de cadenas hexagonales

En este capítulo, estaremos particularmente interesados en grafos ponderados con una función de peso inducida por un índice topológico basado en el grado de los vértices. Recordemos que un índice topológico VDB $\varphi$ está definido para un grafo $G$ como

$$\varphi = \varphi(G) = \sum_{uv \in E} \varphi_{d_G(u), d_G(v)},$$

donde $d_G(u)$ denota el grado del vértice $u \in G$, y $\varphi_{i,j}$ es una función bivariada simétrica (es decir, $\varphi_{i,j} = \varphi_{j,i}$). Consideremos el grafo ponderado $(G; \varphi)$ con una función de peso $\varphi : E \to \mathbb{R}$ definida como

$$\varphi(uv) = \varphi_{d_G(u), d_G(v)},$$

para todo $uv \in E(G)$. En este caso, decimos que $(G; \varphi)$ es un grafo VDB-ponderado y, además, decimos que el índice $Z(G; \varphi)$ es el *índice VDB-Hosoya*.

*Ejemplo* 4.1. La cadena hexagonal ponderada que se muestra en la Figura 3.2 es un ejemplo de un grafo VDB-ponderado, en el cual el índice topológico VDB utilizado es el índice First Zagreb.

### 4.1. Índice VDB-Hosoya de cadenas hexagonales

Nuestro objetivo principal en esta sección es demostrar que, si $H$ es una cadena hexagonal, el vector de Hosoya del grafo VDB-ponderado $(H; \varphi)$ se obtiene al evaluar el vector

$$X_0 = (1 + \varphi_{2,2}, 1, 1, 1)^\intercal$$

en un producto de las siguientes matrices $4 \times 4$:

$$Q_1(\varphi) = \begin{pmatrix} (1+\varphi_{2,2})^2 + \varphi_{2,2} & \varphi_{2,3}(1+2\varphi_{2,2}) & \varphi_{2,3}(1+2\varphi_{2,2}) & \varphi_{2,3}^2(1+\varphi_{2,2}) \\ 1+\varphi_{2,2} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,2}) & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}^2 \\ 1+\varphi_{2,2} & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,2}) & \varphi_{2,3}^2 \\ 1 & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}^2 \end{pmatrix}$$

$$Q_2(\varphi) = \begin{pmatrix} (1+\varphi_{2,3})^2+\varphi_{3,3} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,3}+\varphi_{3,3}) & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,3}+\varphi_{3,3}) & \varphi_{2,3}^2(1+\varphi_{3,3}) \\ 1+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,3}) & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}^2 \\ 1+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,3}) & \varphi_{2,3}^2 \\ 1 & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}^2 \end{pmatrix}$$

$$Q_3(\varphi) = \begin{pmatrix} (1+\varphi_{2,3})^2+\varphi_{3,3} & \varphi_{2,2}(1+\varphi_{2,3}+\varphi_{3,3}) & \varphi_{2,2}(1+\varphi_{2,3}+\varphi_{3,3}) & \varphi_{2,2}^2(1+\varphi_{3,3}) \\ 1+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,2}(1+\varphi_{2,3}) & \varphi_{2,2} & \varphi_{2,2}^2 \\ 1+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,2} & \varphi_{2,2}(1+\varphi_{2,3}) & \varphi_{2,2}^2 \\ 1 & \varphi_{2,2} & \varphi_{2,2} & \varphi_{2,2}^2 \end{pmatrix}$$

y

$$S(\varphi) = \begin{pmatrix} (1+\varphi_{3,3})(1+\varphi_{2,2})+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}(1+\varphi_{3,3}+\varphi_{2,3}) & \varphi_{3,3}(1+\varphi_{2,2}+\varphi_{2,3}) & \varphi_{3,3}\varphi_{2,3}(1+\varphi_{2,3}) \\ 1+\varphi_{2,2} & \varphi_{2,3} & \varphi_{3,3}(1+\varphi_{2,2}) & \varphi_{3,3}\varphi_{2,3} \\ 1+\varphi_{2,2}+\varphi_{2,3} & \varphi_{2,3}+\varphi_{2,3}^2 & 0 & 0 \\ 1+\varphi_{2,2} & \varphi_{2,3} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

*Observación* 4.1. En caso de que el contexto permita identificar la función de peso $\varphi$, se escribirán simplemente $Q_1 = Q_1(\varphi), Q_2 = Q_2(\varphi), Q_3 = Q_3(\varphi), S = S(\varphi)$ y $X_0 = X_0(\varphi)$.

Sea $H \in \mathcal{C}_h$ una cadena hexagonal con $h$ hexágonos $H_1, H_2, \ldots, H_h$. Consideremos la secuencia de vértices $u, u_1, u_2, \ldots, u_{h-1}, u_h, v_h, v_{h-1} \ldots, v_2, v_1, v$ en $H$ construida como se describe a continuación. Sean $u$ y $v$ dos vértices adyacentes de grado 2 en el hexágono inicial, ambos sin vecinos de grado 3. Si recorremos el perímetro de $H$ iniciando en $u$ y terminando en $v$, entonces $u_1, u_2, \ldots, u_{h-1}$ son los vértices de grado 3 que pertenecen a los hexágonos $H_1$,..., $H_h$, respectivamente. Los vértices $u_h$ y $v_h$ tienen grado 2 en $H_h$, y están situados a distancia 2 y 3 de $u_{h-1}$, respectivamente. Además, los vértices $v_{h-1} \ldots, v_2, v_1$ son los vértices de grado 3 que pertenecen a $H_{h-1}$,..., $H_1$, respectivamente.

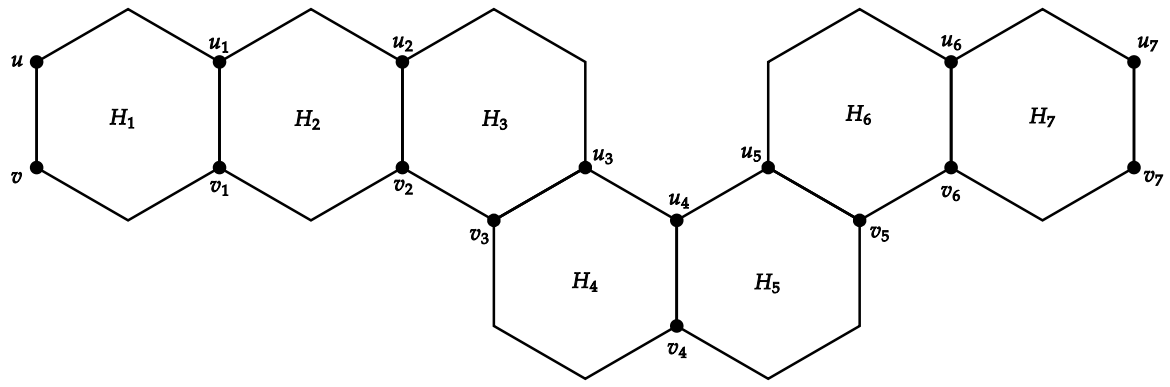


Figura 4.1: Cadena hexagonal en $\mathcal{C}_7$.

.

Notemos que $u_iv_i \in E(H)$ para $i = 1, \ldots, h$. Además, para $i = 2, \ldots, h-1$, tenemos que $H_i$ es un hexágono lineal si $d(u_{i-1}, u_i) = 2$ o un hexágono angular si $d(u_{i-1}, u_i) \in 1, 3$. En la Figura 4.1 se representa una cadena hexagonal en $\mathcal{C}_7$ junto con su secuencia de vértices $u, u_1, \ldots, u_7, v_7, \ldots, v_1, v$. En esta cadena hexagonal, $H_1$ es el hexágono inicial, $H_2$ es un hexágono lineal, $H_3$, $H_4$, $H_5$ y $H_6$ son hexágonos angulares, y $H_7$ es el hexágono final.

**Teorema 4.2.** Sea $H \in \mathcal{C}_h$ una cadena hexagonal con $h$ hexágonos y con secuencia de vértices $u, u_1, \ldots, u_h, v_h, \ldots, v_1, v$ como se describió anteriormente. Entonces,

$$Z_{uv}(H; \varphi) = Q_1 M_2 \cdots M_{h-1} Q_3 X_0,$$

donde

$$M_j = \begin{cases} PSP & \text{si } d(u_{j-1}, u_j) = 1, \\ Q_2 & \text{si } d(u_{j-1}, u_j) = 2, \\ S & \text{si } d(u_{j-1}, u_j) = 3. \end{cases}$$

para $j = 2, \ldots, h-1$.

*Demostración.* Sea $1 \leq j \leq h$, denotamos por $(H^{(j)}; \varphi)$ a la subcadena hexagonal ponderada de $(H; \varphi)$ que inicia en el hexágono $H_j$ y termina en el hexágono $H_h$. Notemos que $(H^{(1)}; \varphi) = (H; \varphi)$. De la Proposición 3.1 tenemos que

$$Z_{uv}(H; \varphi) = Q_1 Z_{u_1 v_1}(H^{(2)}; \varphi).$$

Si $2 \leq j \leq h-1$, de las Proposiciones 3.1 y 3.2, consideramos tres casos:

1. Si $d(u_{j-1}, u_j) = 1$,

$$\begin{aligned} Z_{u_{j-1}v_{j-1}}(H^{(j)}; \varphi) &= PZ_{v_{j-1}u_{j-1}}(H^{(j)}; \varphi) \\ &= PSZ_{v_j, u_j}(H^{(j+1)}; \varphi) \\ &= PSPZ_{u_j v_j}(H^{(j+1)}; \varphi). \end{aligned}$$

2. Si $d(u_{j-1}, u_j) = 2$,

$$Z_{u_{j-1}v_{j-1}}(H^{(j)}; \varphi) = Q_2 Z_{u_j v_j}(H^{(j+1)}; \varphi).$$

3. Si $d(u_{j-1}, u_j) = 3$,

$$Z_{u_{j-1}v_{j-1}}(H^{(j)}; \varphi) = SZ_{u_j v_j}(H^{(j+1)}; \varphi).$$

Finalmente, de la Proposición 3.1 tenemos que

$$Z_{u_{h-1}v_{h-1}}(H^{(h)}; \varphi) = Q_3 X_0.$$

Por lo tanto,

$$Z_{uv}(H;\varphi) = Q_1 M_2 \cdots M_{h-1} Q_3 X_0,$$

donde

$$M_j = \begin{cases} PSP & \text{si} \quad d(u_{j-1}, u_j) = 1, \\ Q_2 & \text{si} \quad d(u_{j-1}, u_j) = 2, \\ S & \text{si} \quad d(u_{j-1}, u_j) = 3, \end{cases}$$

para $j = 2, \ldots, h-1$. □

*Ejemplo* 4.3. Consideremos la cadena hexagonal que se muestra en la Figura 4.1 ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$. Entonces, por el Teorema 4.2, tenemos que

$$Z_{uv}(H;\varphi) = Q_1 Q_2 SPSPPSPSQ_3 X_0 = Q_1 Q_2 SPSSPSQ_3 X_0,$$

dado que $P^2$ es la matriz identidad.

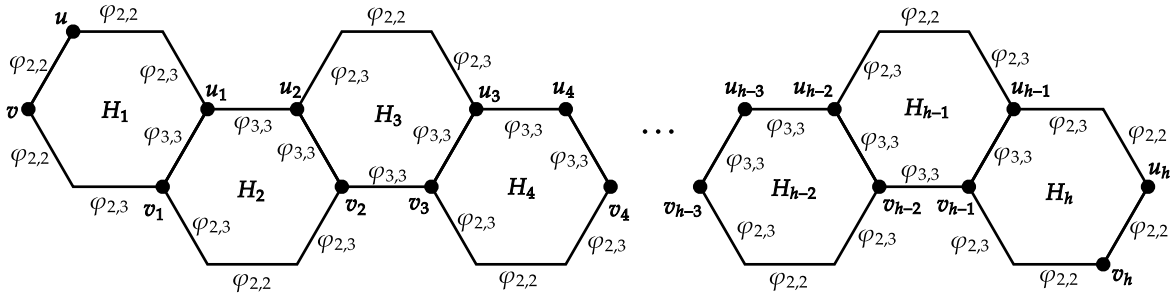


Figura 4.2: Cadena hexagonal zig-zag ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$ para $h$ par.

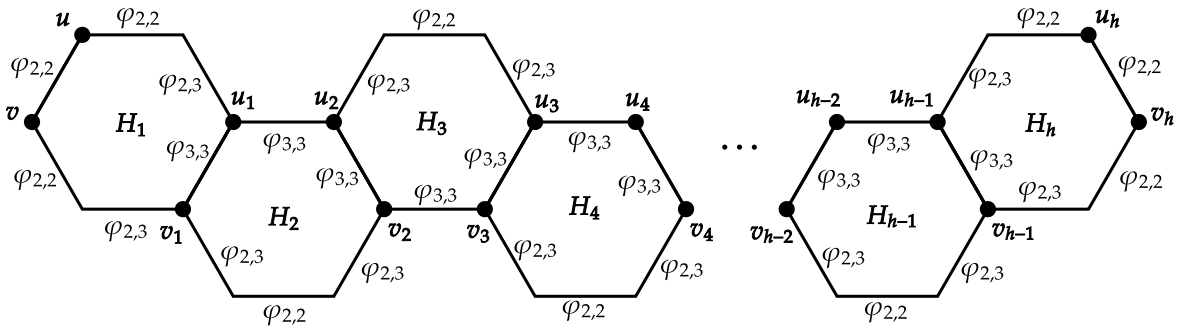


Figura 4.3: Cadena hexagonal zig-zag ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$ para $h$ impar.

*Ejemplo* 4.4. Consideremos la cadena zig-zag con $h$ hexágonos $Z_h$ ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$ (ver la Figura 4.2 si $h$ es par y la Figura 4.3 si $h$ es impar).

Entonces, por el Teorema 4.2,

$$Z_{uv}(Z_h;\varphi) = \begin{cases} Q_1(PSPS)^{\frac{h-2}{2}}Q_3X_0 & \text{si } h \text{ es par,} \\ \\ Q_1(PSPS)^{\frac{h-3}{2}}PSPQ_3X_0 & \text{si } h \text{ es impar.} \end{cases}$$

*Ejemplo* 4.5. Consideremos la cadena hexagonal lineal con $h$ hexágonos $L_h$ ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$ (ver Figura 4.4). Entonces, por el Teorema 4.2, tenemos que

$$Z_{uv}(L_h;\varphi) = Q_1Q_2^{h-2}Q_3X_0.$$

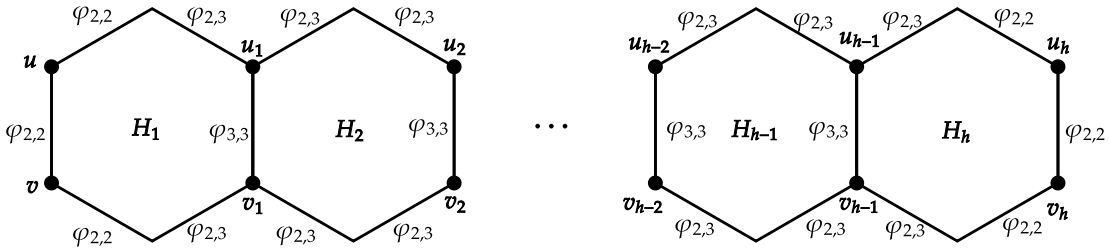


Figura 4.4: Cadena hexagonal lineal ponderada con un índice topológico VDB $\varphi$.

## 4.2. Valor mínimo del índice VDB-Hosoya entre las cadenas hexagonales

Es bien conocido que, entre las cadenas hexagonales, la cadena lineal posee el índice de Hosoya mínimo [18]. En esta sección, veremos que, bajo ciertas condiciones sobre el índice topológico VDB, esta propiedad se mantiene para el índice VDB-Hosoya. Si $A$ es una matriz de tamaño $m \times n$ cuyas entradas son números reales no negativos escribimos $A \geq 0$.

**Proposición 4.6.** Sea $\varphi$ un índice topológico VDB tal que $x_k = (S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$. Consideremos las cadenas hexagonales $H_{k,1}$, $H_{k,2}$ y $H_{k,3}$ de la Figura 4.5. Entonces

$$Z(H_{k,1};\varphi) \leq Z(H_{k,2};\varphi),$$

$$Z(H_{k,1};\varphi) \leq Z(H_{k,3};\varphi),$$

para todo $k \geq 2$.

*Demostración.* En virtud del Teorema 4.2,

$$\begin{aligned} Z_{uv}(H_{k,1};\varphi) &= Q_1MQ_2^{k-1}Q_3X_0, \\ Z_{uv}(H_{k,2};\varphi) &= Q_1MSQ_2^{k-2}Q_3X_0, \\ Z_{uv}(H_{k,3};\varphi) &= Q_1MPSPQ_2^{k-2}Q_3X_0, \end{aligned}$$

donde $M$ es un producto de matrices asociado al índice topológico VDB $\varphi$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} Z(H_{k,1};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1MQ_2^{k-1}Q_3X_0 = y^\intercal Q_2^{k-1}Q_3X_0, \\ Z(H_{k,2};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1MSQ_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal SQ_2^{k-2}Q_3X_0, \\ Z(H_{k,3};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1MPSPQ_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal PSPQ_2^{k-2}Q_3X_0, \end{aligned}$$

donde $y^\intercal = e_1^\intercal Q_1M$ con $e_1^\intercal = (1,0,0,0)^\intercal$.

Notemos que

$$\begin{aligned} Z(H_{k,2};\varphi) - Z(H_{k,1};\varphi) &= y^\intercal(S-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal x_k, \\ Z(H_{k,3};\varphi) - Z(H_{k,1};\varphi) &= y^\intercal(PSP-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal(PSP-PQ_2P)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \\ &= y^\intercal P(S-Q_2)PQ_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal P(S-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3PX_0 \\ &= y^\intercal P(S-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal Px_k, \end{aligned}$$

dado que $PQ_2 = Q_2P$, $PQ_3 = Q_3P$ y $PX_0 = X_0$. En consecuencia, como $x_k \geq 0$ para todo $k \geq 2$ y $y^\intercal \geq 0$, tenemos que $Z(H_{k,2};\varphi) \geq Z(H_{k,1};\varphi)$ y $Z(H_{k,3};\varphi) \geq Z(H_{k,1};\varphi)$. □

*Ejemplo* 4.7. Aplicando la Proposición 4.6, tenemos que la secuencia de cadenas hexagonales de la Figura 4.6 satisface que

$$Z(C_1;\varphi) \geq Z(C_2;\varphi) \geq Z(C_3;\varphi) \geq Z(C_4;\varphi) \geq Z(C_5;\varphi),$$

cuando $(S-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$.

Como consecuencia de la Proposición 4.6, obtenemos una condición que garantiza que la minimalidad del índice VDB-Hosoya de la cadena lineal en comparación con el de las demás cadenas hexagonales.

**Teorema 4.8.** Sea $\varphi$ un índice topológico VDB tal que $x_k = (S-Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$. Si $h \geq 3$, entonces

$$Z(L_h;\varphi) \leq Z(H;\varphi),$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h$.

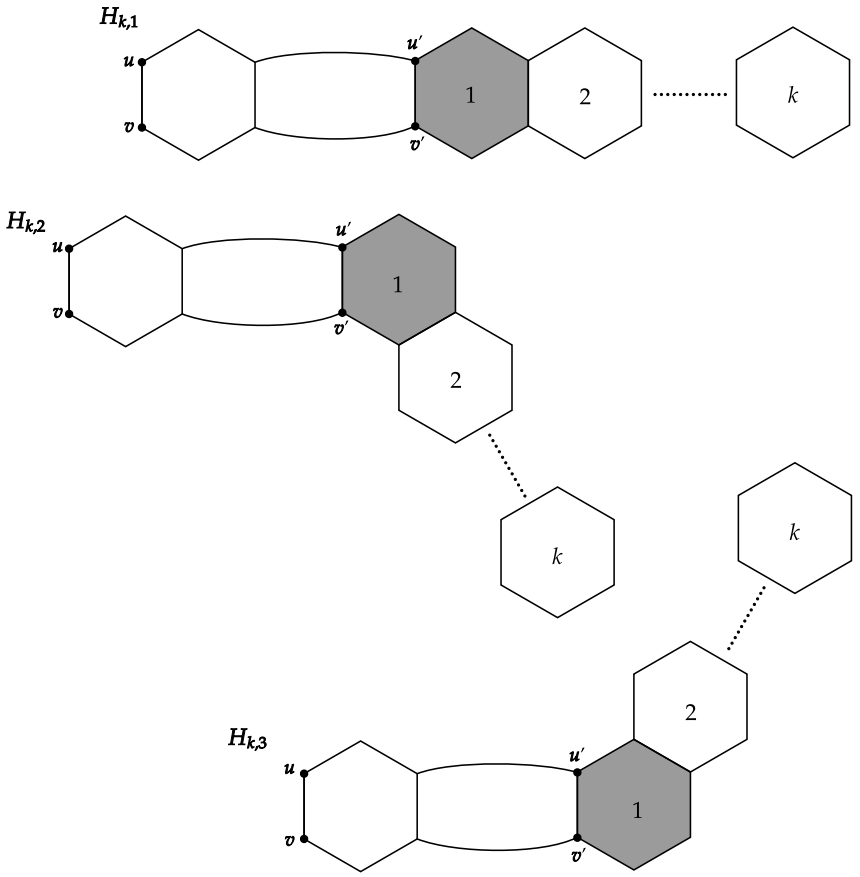


Figura 4.5: Grafos usados en la Proposición 4.6

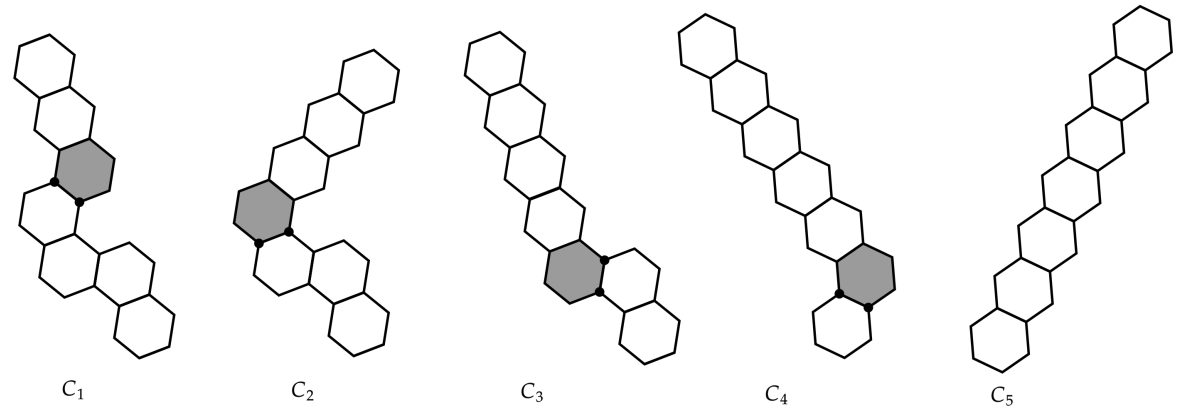


Figura 4.6: $Z(C_1;\varphi) \geq Z(C_2;\varphi) \geq Z(C_3;\varphi) \geq Z(C_4;\varphi) \geq Z(C_5;\varphi)$

*Demostración.* Por inducción sobre el número de hexágonos angulares. Si $H = L_h$, entonces el número de hexágonos angulares es cero y hemos terminado. Supongamos que el resultado es válido para cualquier cadena hexagonal en $\mathcal{C}_h$ con $r \geq 0$ hexágonos angulares, y sea $H$ una cadena hexagonal con $r+1$ hexágonos angulares. Entonces, $H$ es de la forma $H_{k,2}$ o $H_{k,3}$ de la Figura 4.5. Aplicando la Proposición 4.6 obtenemos una

cadena hexagonal $H' \in \mathcal{C}_h$ con $r$ hexágonos angulares y, por la hipótesis de inducción,

$$Z(H;\varphi) \geq Z(H';\varphi) \geq Z(L_h;\varphi).$$

□

**Corolario 4.9.** Sean $h \geq 3$ y $\varphi \in \{\mathcal{R}, \mathcal{H}, \mathcal{GA}, \mathcal{SC}, \mathcal{AZ}\}$. Entonces,

$$Z(L_h;\varphi) \leq Z(H;\varphi),$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h$.

*Demostración.* En virtud del Teorema 4.8, basta con verificar que, para cada uno de los índices $\mathcal{R}, \mathcal{H}, \mathcal{GA}, \mathcal{SC}, \mathcal{AZ}$, se cumple que $x_k \geq 0$ para todo $k \geq 2$.

Sea $A = (S - Q_2)Q_2$.

1. Para el índice Randić $\mathcal{R}$,

$$AQ_2 = \begin{pmatrix} 0.2248 & 0.0722 & 0.0701 & 0.0228 \\ 0.2248 & 0.0676 & 0.0748 & 0.0228 \\ 1.2249 & 0.3981 & 0.3775 & 0.1241 \\ 1.2249 & 0.3935 & 0.3821 & 0.1241 \end{pmatrix}, \; x_3 = \begin{pmatrix} 0.5456 \\ 0.5456 \\ 2.9733 \\ 2.9733 \end{pmatrix}, \; x_2 = \begin{pmatrix} 0.1579 \\ 0.1579 \\ 0.8605 \\ 0.8605 \end{pmatrix}.$$

2. Para el índice Geometric-Arithmetic $\mathcal{GA}$,

$$AQ_2 = \begin{pmatrix} 3.454 & 2.2577 & 2.3132 & 1.5637 \\ 1.9467 & 0.3822 & 2.2072 & 0.8879 \\ 12.1669 & 8.8918 & 6.2193 & 4.987 \\ 12.1669 & 8.007 & 7.1041 & 4.987 \end{pmatrix}, \; x_3 = \begin{pmatrix} 13.2019 \\ 7.4611 \\ 44.9513 \\ 44.9513 \end{pmatrix}, \; x_2 = \begin{pmatrix} 1.6485 \\ 0.9366 \\ 5.2198 \\ 5.2198 \end{pmatrix}.$$

3. Para el índice Sum-Connectivity $\mathcal{SC}$,

$$AQ_2 = \begin{pmatrix} 0.2512 & 0.0874 & 0.086 & 0.0303 \\ 0.2143 & 0.0665 & 0.0811 & 0.0258 \\ 1.2564 & 0.4457 & 0.4118 & 0.1484 \\ 1.2564 & 0.4377 & 0.4198 & 0.1484 \end{pmatrix}, \; x_3 = \begin{pmatrix} 0.6084 \\ 0.5187 \\ 3.0289 \\ 3.0289 \end{pmatrix}, \; x_2 = \begin{pmatrix} 0.1644 \\ 0.1398 \\ 0.8009 \\ 0.8009 \end{pmatrix}.$$

4. Para el índice Harmonic $\mathcal{H}$,

$$A = \begin{pmatrix} 0.134 & 0.0393 & 0.0297 & 0.0089 \\ 0.1187 & 0.0091 & 0.0507 & 0.0075 \\ 0.4267 & 0.1483 & 0.0331 & 0.0171 \\ 0.4267 & 0.1227 & 0.0587 & 0.0171 \end{pmatrix}, \; x_2 = \begin{pmatrix} 0.301 \\ 0.2643 \\ 0.8933 \\ 0.8933 \end{pmatrix}.$$

5. Para el índice Augmented Zagreb $\mathcal{AZ}$,

$$AQ_2Q_2 = \begin{pmatrix} 60950346.835 & 186649648.1159 & 194649136.1159 & 747590606.5364 \\ 9454391.4735 & 9369109.3975 & 50923029.3975 & 112557185.0549 \\ 9447251.4514 & 45796083.4866 & 10144499.4866 & 113126370.8926 \\ 9447251.4514 & 29018867.4866 & 26921715.4866 & 113126370.8926 \end{pmatrix},$$

$$x_4 = \begin{pmatrix} 1677442512.2835 \\ 257938847.1115 \\ 254092216.9287 \\ 254092216.9287 \end{pmatrix},\ x_3 = \begin{pmatrix} 10358277.2649 \\ 1563926.2581 \\ 1543909.5176 \\ 1543909.5176 \end{pmatrix},\ x_2 = \begin{pmatrix} 62194.6582 \\ 9280.1406 \\ 8110.125 \\ 8110.125 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, en virtud del Teorema 4.8, para todo $\varphi \in \{\mathcal{R}, \mathcal{H}, \mathcal{GA}, \mathcal{SC}, \mathcal{AZ}\}$, se cumple que

$$Z(L_h; \varphi) \leq Z(H; \varphi),$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h$. En otras palabras, la cadena lineal es la cadena hexagonal con el valor mínimo del índice VDB-Hosoya. □

Los índices topológicos VDB $\varphi \in \{\mathcal{FZ}, \mathcal{SZ}, \mathcal{ABC}\}$ no satisfacen la condición del Teorema 4.8. Sin embargo, es posible obtener un resultado similar al enunciado en el Teorema 4.8 para la subfamilia $\mathcal{C}_h^*$ de cadenas hexagonales que no tienen hexágonos angulares adyacentes.

A continuación, se ofrece una descripción detallada de la subfamilia $\mathcal{C}_h^*$.

Sea $H \in \mathcal{C}_h$ una cadena hexagonal con $r \geq 2$ hexágonos angulares $H_1, \ldots, H_r$. Para cada $i \in \{1, \ldots, r-1\}$ definamos $p_i \geq 0$ como la cantidad de hexágonos (lineales) entre $H_i$ y $H_{i+1}$.

Denotemos por $\mathcal{C}_{h,r}$ el conjunto de todas las cadenas hexagonales con $0 \leq r \leq h-2$ hexágonos angulares. Notemos que $\mathcal{C}_h = \bigcup_{r=0}^{h-2} \mathcal{C}_{h,r}$ y que $\mathcal{C}_{h,0} = \{L_h\}$. Además, para $2 \leq r \leq h-2$ definamos

$$\mathcal{C}_{h,r}^1 := \{H \in \mathcal{C}_{h,r} \colon p_i \geq 1 \text{ para todo } i = 1, \ldots, r-1\},$$

Teniendo en cuenta la notación anterior, consideremos la subfamilia de cadenas hexagonales dada por

$$\mathcal{C}_h^* := \left( \bigcup_{r>1} \mathcal{C}_{h,r}^1 \right) \cup \mathcal{C}_{h,1} \cup \mathcal{C}_{h,0},$$

es decir, la familia de cadenas hexagonales que no tienen hexágonos angulares adyacentes.

**Proposición 4.10.** Sea $\varphi$ un índice topológico VDB tal que $x'_k = Q_2(S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$. Supongamos que las cadenas hexagonales $H_{k,1}$, $H_{k,2}$ y $H_{k,3}$ de la Figura 4.5 pertenecen a $\mathcal{C}_h^*$. Entonces,

$$Z(H_{k,1};\varphi) \leq Z(H_{k,2};\varphi),$$

$$Z(H_{k,1};\varphi) \leq Z(H_{k,3};\varphi),$$

para todo $k \geq 2$.

*Demostración.* La demostración es similar a la demostración del Teorema 4.6. Por el Teorema 4.2,

$$\begin{aligned}
Z(H_{k,1};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1 M Q_2 Q_2^{k-1} Q_3 X_0 = y^\intercal Q_2 Q_2^{k-1} Q_3 X_0, \\
Z(H_{k,2};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1 M Q_2 S Q_2^{k-2} Q_3 X_0 = y^\intercal Q_2 S Q_2^{k-2} Q_3 X_0, \\
Z(H_{k,3};\varphi) &= e_1^\intercal Q_1 M Q_2 P S P Q_2^{k-2} Q_3 X_0 = y^\intercal Q_2 P S P Q_2^{k-2} Q_3 X_0,
\end{aligned}$$

donde $M$ es un producto de matrices asociado al índice topológico VDB $\varphi$ y, además, $y^\intercal = e_1^\intercal Q_1 M$ con $e_1^\intercal = (1,0,0,0)^\intercal$. Entonces

$$\begin{aligned}
Z(H_{k,2};\varphi) - Z(H_{k,1};\varphi) &= y^\intercal Q_2(S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal x'_k \geq 0, \\
Z(H_{k,3};\varphi) - Z(H_{k,1};\varphi) &= y^\intercal Q_2(PSP - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \\
&= y^\intercal Q_2(PSP - PQ_2P)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \\
&= y^\intercal PQ_2(S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 = y^\intercal P x'_k \geq 0.
\end{aligned}$$

Por lo tanto, $Z(H_{k,2};\varphi) \geq Z(H_{k,1};\varphi)$ y $Z(H_{k,3};\varphi) \geq Z(H_{k,1};\varphi)$. □

*Ejemplo* 4.11. Aplicando la Proposición 4.10, tenemos que la secuencia de cadenas hexagonales de la Figura 4.7 satisface que

$$Z(C_1;\varphi) \geq Z(C_2;\varphi) \geq Z(C_3;\varphi) \geq Z(C_4;\varphi),$$

cuando $Q_2(S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$.

**Teorema 4.12.** Sea $\varphi$ un índice topológico VDB tal que $x'_k = Q_2(S - Q_2)Q_2^{k-2}Q_3X_0 \geq 0$ para todo $k \geq 2$. Si $h \geq 4$ , entonces

$$Z(L_h;\varphi) \leq Z(H;\varphi),$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h^*$.

*Demostración.* La demostración es similar a la del Teorema 4.8, utilizando la Proposición 4.10 en lugar de la Proposición 4.6. □

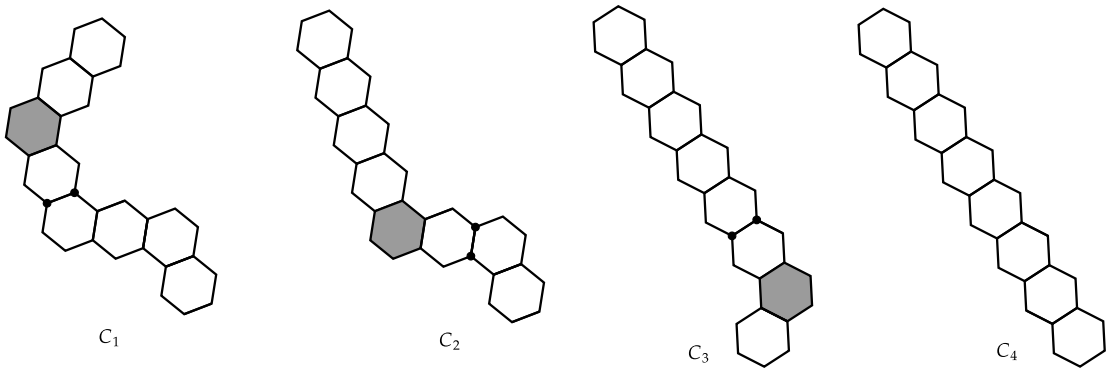


Figura 4.7: $Z(C_1;\varphi) \geq Z(C_2;\varphi) \geq Z(C_3;\varphi) \geq Z(C_4;\varphi)$

**Corolario 4.13.** Sean $h \geq 4$ y $\varphi \in \{\mathcal{FZ}, \mathcal{SZ}, \mathcal{ABC}\}$. Entonces,

$$Z(L_h;\varphi) \leq Z(H;\varphi),$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h^*$.

*Demostración.* En virtud del Teorema 4.12, basta con verificar que, para cada uno de los índices $\mathcal{FZ}, \mathcal{SZ}, \mathcal{ABC}$, se cumple que $x'_k \geq 0$ para todo $k \geq 2$.

Sea $A = Q_2(S - Q_2)Q_2Q_2$.

1. Para el índice First Zagreb $\mathcal{FZ}$,

$$AQ_2Q_2 = \begin{pmatrix} 3810385661 & 8615526480 & 8156542105 & 21834212650 \\ 243292398 & 314988515 & 744676015 & 1388121450 \\ 1077622398 & 2674466640 & 2078763515 & 6180902700 \\ 620276958 & 1398299940 & 1339706190 & 3559218575 \end{pmatrix},$$

$$x'_5 = \begin{pmatrix} 46443479269 \\ 2952591342 \\ 13146473842 \\ 7569689582 \end{pmatrix}, \; x'_4 = \begin{pmatrix} 621036222 \\ 39459246 \\ 175822371 \\ 101247991 \end{pmatrix}, \; x'_3 = \begin{pmatrix} 8138436 \\ 511098 \\ 2309848 \\ 1331533 \end{pmatrix}, \; x'_2 = \begin{pmatrix} 90193 \\ 4974 \\ 26224 \\ 15254 \end{pmatrix}.$$

2. Para el índice Second Zagreb $\mathcal{SZ}$,

$$AQ_2Q_2 = \begin{pmatrix} 30488306320 & 81288914496 & 77469467712 & 250374385728 \\ 1407771400 & 1576663584 & 5753868576 & 11560822560 \\ 5751751720 & 17512289952 & 12438170016 & 47234217888 \\ 3097097080 & 8257581024 & 7869589728 & 25433809632 \end{pmatrix},$$

$$x_5' = \begin{pmatrix} 369557957840 \\ 17064021800 \\ 69718717640 \\ 37540847960 \end{pmatrix}, x_4' = \begin{pmatrix} 3589757624 \\ 165753980 \\ 677223404 \\ 364658756 \end{pmatrix}, x_3' = \begin{pmatrix} 34454132 \\ 1590890 \\ 6499922 \\ 3499958 \end{pmatrix}, x_2' = \begin{pmatrix} 291830 \\ 13475 \\ 55055 \\ 29645 \end{pmatrix}.$$

3. Para el índice Atom-Bond-Connectivity $\mathcal{ABC}$,

$$A = \begin{pmatrix} 2.1774 & 1.125 & 0.5902 & 0.3579 \\ 0.7184 & 0.313 & 0.1743 & 0.084 \\ 2.8894 & 1.5378 & 1.0694 & 0.6188 \\ 2.158 & 1.1013 & 0.8585 & 0.4676 \end{pmatrix}, \; x_3' = \begin{pmatrix} 5.7901 \\ 1.7977 \\ 8.1585 \\ 6.1113 \end{pmatrix}, \; x_2' = \begin{pmatrix} 0.7537 \\ 0.1839 \\ 1.2732 \\ 0.9613 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto, en virtud del Teorema 4.12, si $\varphi \in \{\mathcal{FZ}, \mathcal{SZ}, \mathcal{ABC}\}$, entonces

$$Z(L_h, \varphi) \leq Z(H, \varphi)$$

para todo $H \in \mathcal{C}_h^*, h \geq 4$. En otras palabras, la cadena lineal alcanza el índice VDB-Hosoya mínimo sobre la familia $\mathcal{C}_h^*$ de cadenas hexagonales que no tienen hexágonos angulares adyacentes. □

# CAPÍTULO 5

## Conclusiones

En este trabajo, calculamos el índice de Hosoya para la cadena hexagonal ponderada $(H;\varphi)$, donde los pesos están determinados por un índice basado en el grado de los vértices, denominado índice VDB. En nuestro resultado principal (ver Teorema 4.2), presentamos una expresión para calcular el índice de Hosoya de $(H;\varphi)$ en términos de un producto de matrices $4 \times 4$ asociadas al índice topológico VDB $\varphi$.

También se establecieron condiciones sobre $\varphi$ para garantizar que la cadena lineal VDB-ponderada sea la cadena hexagonal VDB-ponderada con $h$ hexágonos de menor índice de Hosoya. Como consecuencia, demostramos que el resultado mencionado se cumple para los índices Randić, Harmonic, Geometric-Arithmetic, Sum-Connectivity y Augmented-Zagreb.

Aunque los índices First Zagreb, Second Zagreb y Atom-Bond-Connectivity no satisfacen la condición mencionada, obtuvimos un resultado similar para la subfamilia de cadenas hexagonales que no contienen hexágonos angulares adyacentes.

Como trabajo futuro, proponemos resolver el siguiente problema:

**Problema 5.1.** Demostrar que la cadena hexagonal lineal VDB-ponderada es la cadena hexagonal VDB-ponderada con $h$ hexágonos minimal con respecto al índice de Hosoya para los índices First Zagreb, Second Zagreb y Atom-Bond-Connectivity.

Un resultado conocido es que la cadena hexagonal zig-zag es la mayor cadena hexagonal con respecto al índice de Hosoya [18]. Este hecho nos motiva a proponer otro problema:

**Problema 5.2.** Determinar la cadena hexagonal VDB-ponderada maximal con respecto al índice de Hosoya para varios índices topológicos VDB conocidos.

# Bibliografía


[1] R. Balakrishnan & K. Ranganathan. *A textbook of graph theory*. Springer Science & Business Media, 2012.

[2] R. Cruz, I. Gutman, & J. Rada. Hosoya index of VDB-weighted graphs. *Discrete Appl. Math.*, 317:18–25, 2022.

[3] R. Cruz, C. Marín, & J. Rada. Computing the Hosoya index of catacondensed hexagonal systems. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 77(3):749–764, 2017.

[4] R. Cruz & J. Rada. The path and the star as extremal values of vertex-degree-based topological indices among trees. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 82(3):715–732, 2019.

[5] E. Estrada, L. A. Torres, L. Rodríguez, & I. Gutman. An atom-bond connectivity index: modelling the enthalpy of formation of alkanes. *Indian J. Chem.*, 37A:849–855, 1998.

[6] B. Furtula, A. Graovac, & D. Vukičević. Augmented Zagreb index. *J. Math. Chem.*, 48:370–380, 2010.

[7] I. Gutman. Degree-based topological indices. *Croat. Chem. Acta*, 86(4):351–361, 2013.

[8] I. Gutman. Geometric approach to degree-based topological indices: Sombor indices. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 86(1):11–16, 2021.

[9] I. Gutman & S. J. Cyvin. *Introduction to the theory of benzenoid hydrocarbons*. Springer Science & Business Media, 2012.

[10] I. Gutman & N. Trinajstić. Graph theory and molecular orbitals. Total $\varphi$-electron energy of alternant hydrocarbons. *Chem. Phys. Lett.*, 17(4):535–538, 1972.

[11] H. Hosoya. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. *Bull. Chem.*

*Soc. Jpn.*, 44(9):2332–2339, 1971.

[12] H. Hosoya. Mathematical meaning and importance of the topological index Z. *Croat. Chem. Acta*, 80(2):239–249, 2007.

[13] V. Kulli. Graph indices. *Handbook of Research on Advanced Applications of Graph Theory in Modern Society*, páginas 66–91, 2020.

[14] J. Rada & R. Cruz. Vertex-degree-based topological indices over graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 72(3):603–616, 2014.

[15] M. Randic. Characterization of molecular branching. *J. Am. Chem. Soc.*, 97(23):6609–6615, 1975.

[16] R. Todeschini & V. Consonni. *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*. Wiley-VCH: Weinheim, Germany, 2009.

[17] D. Vukičević & B. Furtula. Topological index based on the ratios of geometrical and arithmetical means of end-vertex degrees of edges. *J. Math. Chem.*, 46:1369–1376, 2009.

[18] S. Wagner & I. Gutman. Maxima and minima of the Hosoya index and the Merrifield-Simmons index: a survey of results and techniques. *Acta Appl. Math.*, 112:323–346, 2010.

[19] L. Zhong. The harmonic index for graphs. *Appl. Math. Lett.*, 25(3):561–566, 2012.

[20] B. Zhou & N. Trinajstić. On a novel connectivity index. *J. Math. Chem.*, 46:1252–1270, 2009.