Energía de un grafo

Luis Gerardo Arruti Sebastián

Escuela Superior de Física y Matemáticas

September 21, 2018

Grafos

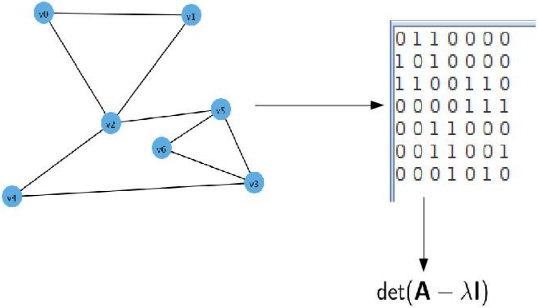
Grafo (simple no dirigido)

$$G = (V, A)$$

$$V \equiv \textit{conjunto}$$

$$A \equiv \textit{relación}$$

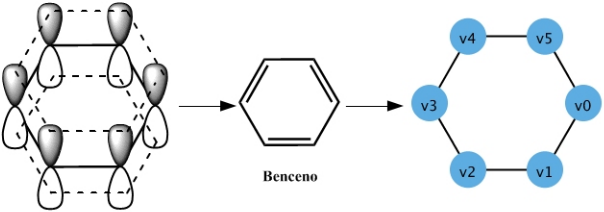
Grafos y álgebra lineal



Transfondo histórico

Teoría de Hückel de Orbitales Moleculares THOM

Teoría de orbitales moleculares



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

La aproximación de Hückel propone:

$$[\hat{H}]_{ij} = \begin{cases} \alpha, \text{ si i=j} \\ \beta, \text{ si el átomo i está enlazado con el j} \\ 0, \text{ en otro caso} \end{cases}$$

Así pues, podemos escribir a $\hat{H}$ como sigue:

$$\hat{H} = \alpha I_n + \beta A(G)$$

Donde $A(G)$ es la matriz de adyacencia de un grafo

Transfondo histórico

Los valores de la energía propios de cada átomo E_i satisfacen:

$$E_i = \alpha + \beta\lambda_i$$

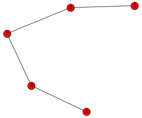
Con λ_i valor propio de $A(G)$ En la aproximación de Hückel se define la energía total de tipo π como:

$$E(G) = \sum_{i=1}^{n} \mid \lambda_i \mid$$

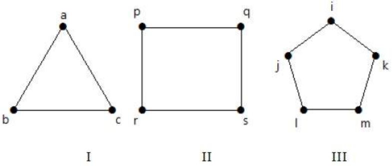
La definición es aplicable a cualquier grafo

Grafos importantes

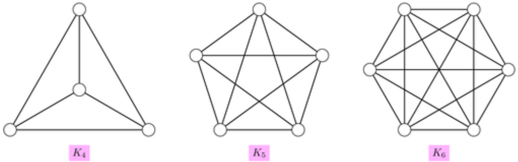
Camino (P_n)



Ciclo (C_n)



Grafo Completo (K_n)



Teorema de Sachs

Sea $G = (V, A)$ un grafo de N vértices.

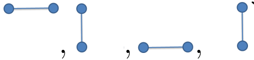
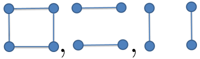
$$S_m := \{H \subseteq G \mid H \text{ tiene m vértices y sus componentes son únicamente grafos } K_2 \text{ o } C_l\}$$

Teorema (Horst Sachs):
Si $P(G, x) = \sum_{i=0}^{n} c_i x^{N-i}$, entonces $c_0 = 1$ y

$$c_i = \sum_{H \in S_n} (-1)^{c(H)} 2^{r(H)}$$

Teorema de Sachs

Estimemos $P\left(C_4, x\right)$

- $S_1 = \emptyset = S_3 \implies c_1 = 0 = c_3$
- $S_2 = \Big\{$  $\Big\} \implies c_2 = -1^1 * 2^0 * 4 = -4$
- $S_4 = \Big\{$  $\Big\} \implies c_4 = -1^1 * 2^1 + -1^2 * 2 =$ $-2 + 2 = 0$

$$\therefore P\left(C_4, x\right) = x^4 - 4x^2$$

Teorema de reducción general

Si $G = (V, A)$, $a \in A$, entonces

$$P(G, x) = P(G \setminus a, x) - P(G \setminus V(a), x) - 2 \sum_{a \in C_k \subseteq G} P(G \setminus V(C_k), x)$$

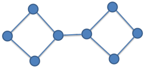
Adicionalmente, se sabe que, sí $G = G_1 \dot{\cup} G_2$, entonces

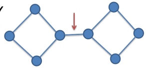
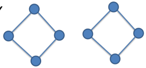
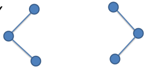
$$P(G, x) = P(G_1, x) * P(G_2.x)$$

Convenimos que

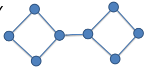
$$P(\emptyset, x) = 1$$

Teorema de reducción general

Aplicándolo a 

$P\Big($  $, x\Big) = P\Big($  $, x\Big) - P\Big($  $, x\Big)$

$$= P(C_4, x)^2 - P(P_3, x)^2 = (x^4 - 4x^2)^2 - (x^3 - 2x)^2 =$$

$\therefore P\Big($  $, x\Big) = x^8 - 9x^6 + 20x^4 - 4x^2$

Fórmula integral de Coulson

Teorema(Coulson)
Si $G = (V, A)$ tiene N vertices y a $P(G, x)$ por polinomio característico, entonces:

$$E(G) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(N - ix\frac{P'(G, ix)}{P(G, ix)} \right) dx$$

Referencias

- *Cvetković, Dragoš M*. Spectra of graphs: Theory and application.
- *Gutman, Ivan*. Graph Energy.
- *Gutman, Ivan*. Mathematical Concepts in Organic Chemistry.

Gracias por su atención.