UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Sobre el número total de apareamientos y conjuntos independientes en gráficas con conexidad a lo más *k*

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

MATEMÁTICO

P R E S E N T A:

FRANCISCO PÁEZ PÉREZ

DIRECTORA DE TESIS:
M. en C. LOIRET ALEJANDRÍA DOSAL TRUJILLO

CIUDAD DE MÉXICO **2018**

Hoja de datos de jurado

1. Datos del alumno

Apellido paterno:	Páez
Apellido materno:	Pérez
Nombre:	Francisco
Teléfono	5512853726
Universidad:	Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad:	Ciencias
Carrera:	Matemáticas
Número de cuenta:	091390767

2. Datos del tutor:

Grado:	M. en C.
Nombre(s):	Loiret Alejandría
Apellido paterno:	Dosal
Apellido materno:	Trujillo

3. Datos del Sinodal 1

Grado:	Dra.
Nombre(s):	Hortensia
Apellido paterno:	Galeana
Apellido materno:	Sánchez

4. Datos del Sinodal 2

Grado:	Mat.
Nombre(s):	Laura
Apellido paterno:	Pastrana
Apellido materno:	Ramírez

5. Datos del Sinodal 3

Grado:	Dra.
Nombre(s):	Berta
Apellido paterno:	Zavala
Apellido materno:	Santana

6. Datos del Sinodal 4

Grado:	Dr.
Nombre(s):	Ilán Abraham
Apellido paterno:	Goldfeder
Apellido materno:	Ortiz

7. Datos del trabajo escrito

Título:	Sobre el número total de apareamientos y conjuntos independientes en una gráfica con conexidad a lo más k
Número de páginas:	97
Año:	2018

Dedicado a mi familia:

A mi madre Josefina Pérez Cárdenas,
por dejarme soñar, enseñarme a volar
y por todo tu amor.
A mi padre, Francisco Páez Cuéllar
por enseñarme a vivir
y apoyarme cuando quiero seguir.
A mi hermana Alejandra Sánchez Pérez,
por ser mi madre cuando lo deseaba,
y por ser el ejemplo que decidí seguir.

A mis hermanos: Jessica Hernández,
Cruz y Amado (Q.E.P.D.) Sánchez,
Pedro Páez y Gabriel Carmona,
por ser una fuerza en mi vida.
A mis amados sobrinos: Gabriela y Alejandro Carmona,
por ser la inspiración para seguir caminando;
Adan Sánchez, Ingrid, Vanessa y Francisco Páez,
Alejandra, Jorge y Juan Sánchez, con amor.

A mi, Francisco Páez Pérez,
por enseñarme a amar cada minuto,
por darme chance de llegar al final
y por sentir y crear.

Agradecimientos

A la M. en C. Loiret Alejandría Dosal, por apoyarme tanto y por aparecer en el momento indicado con el tema indicado, gracias por ser ese gran ser humano y por dar tanto amor, mi querida Jana es un placer conocerte.

A la M. en C. Jessica Hernández Pineda, por ser uno de los mejores ejemplos de vida, por dejarme admirarte y por el apoyo en la revisión del capítulo 4 de este trabajo.

A Josefina Pérez Cárdenas, por darme la vida y el amor suficiente para poder fortalecer mis emociones.

A Francisco Páez Cuéllar, por tratar de enseñarme a ser disciplinado y por darme amor.

A Alejandra Sánchez Pérez, por amarme y apoyarme en cada momento de mi vida, por ser mi amada hermana.

A mi hermano Cruz Sánchez, por todo el amor cuando era niño.

A mi hermano Amado Sánchez (Q.E.P.D.), por hacerme reír todos los días, tus recuerdos aún me hacen feliz.

A mi hermano Pedro Páez, por ser un apoyo en mi vida.

A mi sobrina Gabriela Carmona, porque todos los días desde que naciste te he amado de una manera impresionante.

A mi sobrino Alejandro Carmona, porque me siento tan dichoso de verte crecer fuerte y feliz.

A mi sobrino Adán Sánchez, por ser el primero que me hizo feliz en este rubro, eres mi nene aún.

A mis sobrinos, Ingrid Páez por ser ese dulce que le hacía falta a mi vida, a Vanessa Páez, por tener esa fuerza que me da ganas de seguir, a Pedro Páez, por tener la chispa de la felicidad, a Ricardo González por enseñarme a respetar mi entorno y demostrarme que el amor va más allá de la sangre, a Lourdes González, por los pasteles del mini-horno y las risas de toda una vida, a Jorge Sánchez por darme la dicha de verte feliz, Juan Sánchez, porque me recuerdas tanto a mi hermano y me llena de felicidad recordar lo feliz que él era cuando naciste, Alejandra Sánchez, porque eres el amor que representa la vida de mi hermano.

A mis tíos, Blanca Rosa Pineda, Romualdo Hernández, Silvia Pérez, Artemia Pineda y Ana María Pérez, a mis primos, Saúl Pineda, por el apoyo y Omar Hernández, por ser mi primito que tanto quiero, mi hermano pequeño, a mi muy amada primita Erica Hernández por jugar a las muñecas y ser cómplices de travesuras; a las mujeres que llenaron de dicha mi vida al dar a luz a mis sobrinos Juana González, Georgina Gutiérrez y Yolanda Martínez, y a mi cuñado Gabriel Carmona, todo el amor para mi familia.

A mis mejores amigos de toda la vida, Alonso Martínez, Joselyn Pasarán, Aida Morales y Verónica Ledezma, la vida tiene mucho sentido gracias a ustedes, agradezco tanto amor mutuo.

A mis amados amigos del Colegio de Bachilleres número 3, Karla Ortíz, Adrián Ortiz, Nely Mejía, Yaquelin Lara, Daniela Olivares, Omar Pérez, Julia González y Víctor Hugo Pérez, por ser tan solidarios y amorosos, a los profesores de esta escuela, Luis Méndez, Lili gracias por tan buenas clases, y a Elvia por contagiarme su amor a la Química.

A mis amados amigos de la preparatoria número 8, Marco, Claudia y Rosalía, por tanta diversión sin prejuicios.

A los maestros de vida, Alejandro Rivera, Miguel Corona, Pamela Jiménez, Juan Alberto Lozano, Ángel Carbajal e Iván Villagómez, gracias por enseñarme a amar y respetar la vida y por enseñarme que el amor es eterno.

A mi amada Facultad de Química y todos esos químicos que amo tanto, Quintila, Gerardo Ángeles, Leobardo Rojas, Octavio, Fatima, Belen, Lena y a los profesores en esa Facultad, la M. en C. Adriana Ortíz, al profesor Ruben Daniel Coello y Jaime Carrillo.

A la banda de la Facultad de Ciencias de la UNAM. A los matemáticos, Manuel Díaz, Rocío Juárez, Josefina, Erick Vargas, Semeli, Gilberto Diego, Francisco González, Raybel García, mi querido José Juan López, Elisa Bautista y Jorge Ortíz Espejel por la confianza para apoyarlos con los cursos.

A Los físicos, Angélica Zarazúa, Germán Toxqui, David Porta, Nadxiieli Delgado, Daniela, Gerardo Rangel y Carlos Echeverría,por esos momentos tan divertidos. A las biólogas Gaby e Ilse. A los actuarios Zaira, Maribel, Pamela, Edna, Madelein, Mariana Alcántara y mi Perlita amada.

A todos los profesores de la facultad, en especial a aquellos que me dejaron un recuerdo maravilloso Berta Zavala, Laura Pastrana, Aarón Aparicio, Rafael Rojas, Gabriela Campero, Mario Francisco, Loiret Dosal, Gabriel Ocampo, Catalina Stern y Rubén Cruz.

A todos aquellos con los que he tenido la oportunidad de compartir conocimiento, a Carlos y Omar Bravo Aguílar, a Ana Monserrat, al grupo de Álgebra Superior II, a Jessica Apanco, a Ángel, a Isaac, a los que se hicieron con el tiempo buenos amigos Daniel Rivera Bautista, Sonia , Ana Solís y Fabián Hazael.

Un agradecimiento especial a mis Sinodales, a la Dra. Hortensia Galeana, a la Mat. Laura Pastrana, a la Dra. Berta Zavala Santana y al Dr. Ilál goldfeder.

Agradezco a la Dra. Catalina Stern por motivarme para concluir y a Guillermo Pineda por recordarme que en la vida hay seres capaces de hacer lo humanamente posible por ayudar a otros y por tener la convicción de crear un mundo mejor.

Agradezco infinitamente a la vida, a la capacidad de los seres humanos de crear, amar, respetar, compartir y aceptar.

Agradezco el estar aquí y me agradezco la oportunidad de disfrutarlo.

En cada instante de todos los días
se crea un bello recuerdo.
-Francisco Páez Pérez

El conocimiento empieza en el asombro.
-Sócrates

Introducción

Este trabajo se debe un poco a mi gusto por la Química y la Teoría de Gráficas, los temas que aquí se abordan tienen un impacto dentro de la Química Combinatoria. Esta rama de la Química se encarga del estudio y la predicción de la formación de diferentes compuestos con base en los ya conocidos, a los que denomina “Biblioteca Química”, a partir de estos utiliza métodos matemáticos de síntesis para predecir la probabilidad de formación y de estabilidad de nuevos compuestos, y su comportamiento y propiedades fisicoquímicas, es principalmente utilizada en la producción de fármacos y en la Química Orgánica. La Teoría de Gráficas es una herramienta muy fuerte para la Química, ya que las moléculas pueden modelarse como gráficas conexas en las que cada elemento es representado por un vértice y el enlace químico entre dos átomos por una arista.

Así, al estudiar ciertas propiedades de las gráficas asociadas a los compuestos, se encuentra una relación casi natural entre estas y las propiedades físicas de dichos compuestos químicos.

En el contexto de la Química Combinatoria se llaman índices topológicos a ciertas propiedades que se relacionan directamente con la estructura de la materia, tal como el índice de Hosoya, que fue introducido por Haruo Hosoya en 1971, el cual cuenta el número total de apareamientos en una gráfica y el índice de Merrifield-Simmons, introducido por Richard E. Merrifield y Howard E. Simmons en 1989, este cuenta el número total de conjuntos independientes en una gráfica.

En este trabajo estudiaremos a detalle los resultados obtenidos por Kexiang Xu, Jianxi Li y Lingping Zhong en [1]; estos resultados determinan qué gráficas poseen índices de Hosoya y Merrifield-Simmons máximos y mínimos, dentro de los conjuntos de gráficas conexas con conexidad puntual y lineal a lo más k, con $1 \leq k \leq n-1$.

En el primer capítulo se presentan los elementos necesarios de la Teoría de Gráficas que nos servirán para trabajar con comodidad y demostrar con argumentos sólidos los resultados que se presentan en el artículo. En el segundo capítulo se da la teoría que envuelve a los temas centrales que son la conexidad en gráficas, los apareamientos y los conjuntos independientes en una gráfica.

El tercer capítulo se basa en el desarrollo del artículo y en él, se demuestran a detalle los teoremas, lemas y proposiciones que lo comprenden. Así como una diversidad de ejemplos que clarifican la importancia de dichos resultados.

Por último, el cuarto capítulo tiene como finalidad ilustrar de manera general como se aplican los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons dentro del área de la Química Orgánica, para mostrar la relación que existe entre el número total de apareamientos y de conjuntos independientes de las gráfica asociadas a algunos compuestos químicos con su punto de ebullición.

Índice general

Capítulo 1

Conceptos preliminares

1.1. Elementos de la Teoría de Gráficas

En este capítulo daremos los elementos básicos de la Teoría de Gráficas, algunos teoremas, corolarios y observaciones derivados de los conceptos elementales. El orden de la presentación de cada resultado es importante, ya que se utilizaran en forma consecutiva, por lo que se dará por sentado un resultado una vez obtenido. En este trabajo tomaremos como primer elemento de los números naturales al cero.

La Teoría de Gráficas es el estudio de una pareja de conjuntos discretos y algunas de sus propiedades. Una gráfica se define como $\boldsymbol{G}$:= ($\boldsymbol{V(G)}$, $\boldsymbol{A(G)}$), en donde el primer conjunto es finito y diferente del vacío, es llamado el conjunto de los vértices de $\boldsymbol{G}$ y es denotado por $\boldsymbol{V(G)}$, y el conjunto $\boldsymbol{A(G)}$ es llamado el conjunto de las aristas de $\boldsymbol{G}$, donde $A(G)$ es un conjunto de parejas no ordenadas de elementos $V(G)$, tales que si $\{x, y\} \in A(G)$ tenemos que $x \neq y$. La gráfica más sencilla es la trivial, que es un solo vértice y su conjunto de aristas es vacío.

Por comodidad denotamos a la pareja $\{x, y\}$ simplemente como xy, notemos que son pares no ordenados, así xy=yx, donde x, y son llamados los ***extremos*** de la arista xy y decimos que x es ***adyacente*** a y y viceversa o bien que x y y son mutuamente ***vecinos***. Si xy no pertenece a $\boldsymbol{A(G)}$, entonces decimos que x y y no son adyacentes. En muchas ocasiones denotaremos a los elementos de $A(G)$, como a_i, o simplemente a, en lugar de xy, de esta manera diremos que a incide en x y y, si estos son sus extremos. Cuando tenemos dos aristas, tales que $a_1 = xy$ y $a_2 = xz$, $y \neq z$, decimos que a_1 y a_2 son ***aristas adyacentes***, es decir, si dos aristas inciden en un mismo vértice, entonces son adyacentes.

La gráfica $G_1 = (\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7, v_8, v_9\}, \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, a_8\})$ se representa geométricamente en la figura 1.1.

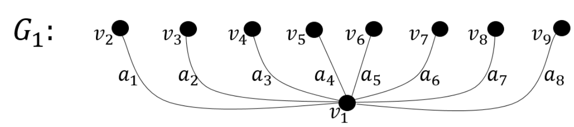


Figura 1.1: Gráfica simple

1.1.1. Subgráficas

En general en el estudio de las estructuras matemáticas, se estudian sus subestructuras, en grupos los subgrupos, en espacios vectoriales los subespacios vectoriales y en Teoría de las Gráficas las subgráficas.

Sean $H = (V(H), A(H))$ y $G = (V(G), A(G))$ dos gráficas, tales que $V(H) \subseteq V(G)$ y $A(H) \subseteq V(G)$. Decimos que H es ***subgráfica*** de G y denotamos por $H \leq G$.

Una vez definidas las subgráficas, veamos que hay diferentes tipos de ellas, esto depende de los subconjuntos que tomamos. Así, tenemos a las ***subgráficas generadoras*** que son aquellas en las que se cumplen las condiciones $V(H) = V(G)$ y $A(H) \subseteq A(G)$, por otro lado, las ***subgráficas inducidas***, que se subdividen en ***subgráficas inducidas por un subconjunto de vértices*** las cuales cumplen que $B \subseteq V(G)$ y $A(H) = \{xy \in A(G)\colon x, y \in B\}$, denotamos por $G[B]$ a la subgráfica inducida por B y las ***subgráficas inducidas por un subconjunto de aristas*** definidas por $V(H) = \{x, y \in V(G)\colon xy \in S\}$ y $S \subset A(G)$, denotando a la subgráfica inducida por S, como $G[S]$. En particular la subgráfica inducida por el conjunto $V(G) - \{x\}$ se denota por $G - x$, en caso de que se tome un conjunto con más de un vértice, tenemos $B \subset V(G)$, $V(G) - B$ que se denota por $G - B$. De manera similar si $a \in A(G)$, tenemos que $A(G) - \{a\}$ se denota por $G - a$, en donde también se puede tomar un conjunto $S \subseteq A(G)$, obteniendo $A(G) - S$ y denotamos por $G - S$.

Veamos en la figura 1.2 a la Gráfica G_3, de ella podemos obtener una subgráfica generadora, como H_1 en la figura 1.3.

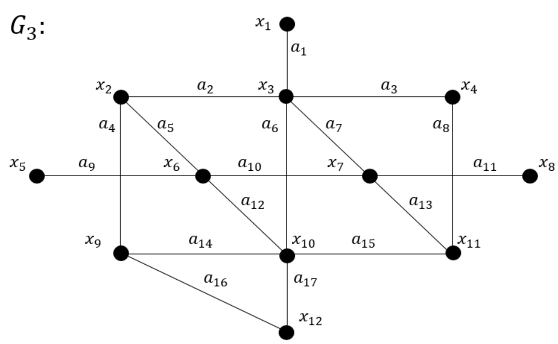


Figura 1.2: Gráfica G_3

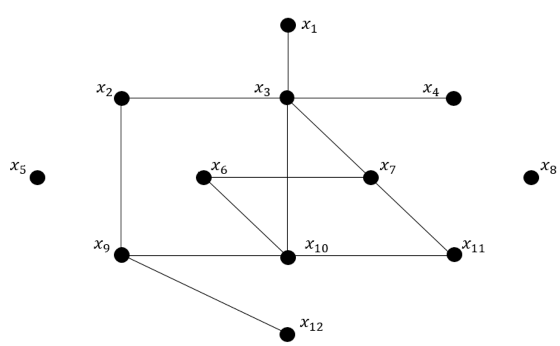


Figura 1.3: Subgráfica generadora de G_3

Si consideramos al conjunto $V_2 = \{x_1, x_3, x_5, x_6, x_7, x_8, x_{11}\}$, podemos observar en la figura 1.4 a la gráfica H_2, que es la gráfica inducida por $V_2 \subset V(G_3)$. Notemos que H_2 tiene a todas las aristas de G_3 con extremos en V_2, y de igual manera para un subconjunto de aristas, podemos ver en la figura 1.5 a H_3, la subgráfica inducida por $A_3 = \{a_2, a_3, a_5, a_6, a_8, a_9, a_{10}, a_{11}, a_{12}\}$, tal que $A_3 \subset A(G_3)$. En H_3 se incluyen a los extremos (vértices) de cada arista.

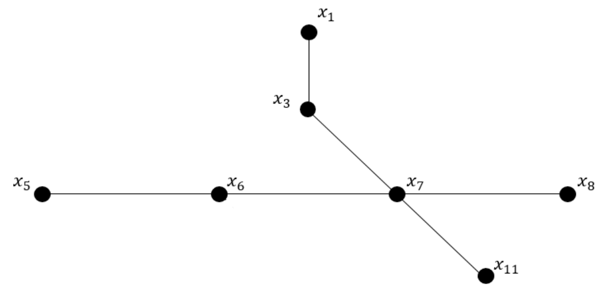


Figura 1.4: Subgráfica inducida por $V_2 \subseteq V(G_3)$

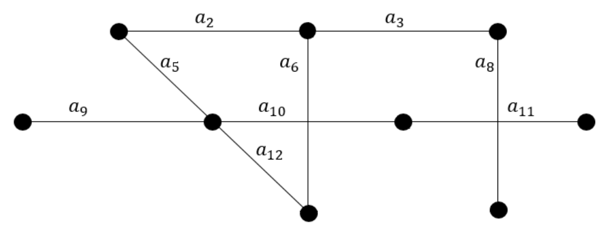


Figura 1.5: Subgráfica inducida por $A_3 \subseteq A(G_3)$

Ahora, para $x_1 \in V(G_3)$, haciendo $G_3 - x_{12}$, obtenemos la gráfica representada en la figura 1.6, así mismo para $V_5 \subset V(G_3)$, tal que $V_5 = \{x_1, x_5, x_7, x_{11}, x_{12}\}$, obtenemos $G_3 - V_5$ que es la subgráfica representada en la figura 1.7.

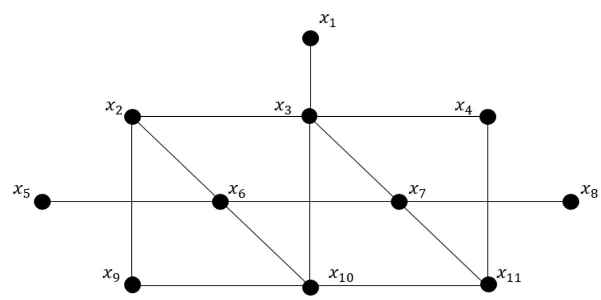


Figura 1.6: $G_3 - x_{12}$

Cuando a G_3 le quitamos la arista a_{12}, como en la figura 1.8, obtenemos la gráfica $G_3 - a_{12}$, esto se puede generalizar para un subconjunto de aristas, sea $A_7 \subset A(G_3)$, tal que $A_7 = \{a_1, a_2, a_5, a_7, a_8, a_{12}, a_{15}\}$, así, tenemos $G_3 - A_7$ representada en la figura1.9.

Cabe señalar que cuando se borra un vértice en una gráfica, se elimina el vértice y las aristas que inciden en él, mientras que cuando se borra una arista de la gráfica, sólo se elimina la adyacencia entre sus extremos.

Observación 1.1.1. *Se puede ver que en toda gráfica G:*

- *La gráfica trivial es una subgráfica de G y se obtiene al borrar vértices de G, excepto uno.*

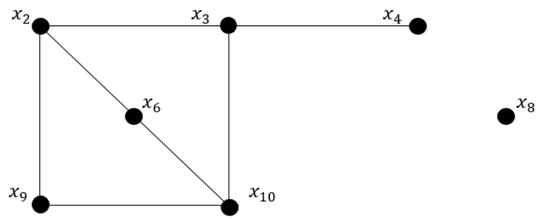


Figura 1.7: $V_5 \subset V(G_3)$

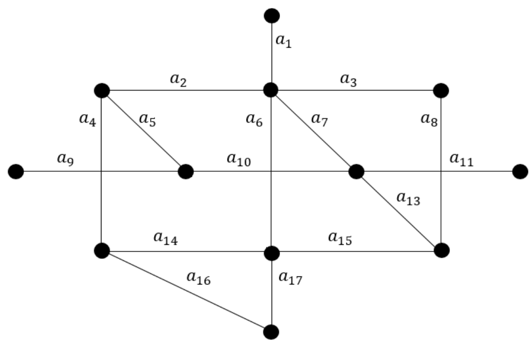


Figura 1.8: $G_3 - a_{12}$

- *$G - S$, con S un subconjunto de aristas, es siempre una gráfica generadora, ya que sólo se borran las aristas de S en G y el conjunto de vértices de $G - S$ es el mismo que el de G.*

1.1.2. Orden, tamaño y grado de una gráfica

El ***orden*** de una gráfica G, es el número de elementos en $V(G)$ y el ***tamaño*** de G, es la cantidad de aristas en $A(G)$. Utilizamos n_G y m_G para referirnos al orden y el tamaño de la gráfica G, respectivamente (en ocasiones sólo se utilizarán n, m en lugar de n_G y m_G).

Para un vértice v, definimos el ***el grado de v*** en G, como el número de aristas de G que inciden en v y lo denotamos por d_G***(v)***. Cuando es evidente la gráfica de referencia escribimos simplemente $d(v)$. Definimos ***la vecindad de v*** como el conjunto N_G***(v)***$= \{u \in V(G) : vu \in A(G)\}$; es decir, $N_G(v)$ es el conjunto de vecinos de v en G. Observemos que en una gráfica simple, $d_G(v) = |N_G(v)|$.

Definimos y denotamos a la ***vecindad cerrada*** de v, con $v \in V(G)$, como el conjunto $N_G[v] = N(v) \cup \{v\}$. Para $S \subset V(G)$, decimos que la vecindad de S en G, está dada por el conjunto $N_G(S) = \{u \in V(G) : uv \in A(G) \text{ y } v \in S\}$, por lo que la vecindad cerrada de S en G se define como $N_G[S] = N_G(S) \cup S$.

Si en una gráfica se tiene un vértice v tal que $d(v) = 0$, llamamos a v ***vértice aislado***; en el caso en que $d(v) = 1$, decimos que v es un ***vértice terminal***.

El grado máximo de G, es $\Delta(G) = \text{máx}\{d(v) : v \in V(G)\}$, de manera similar, ***el grado mínimo*** de G es $\delta(G) = \text{mín}\{d(v) : v \in V(G)\}$. De las definiciones de grado máximo y grado mínimo de G se tiene que $\delta(G) \leq d(v) \leq \Delta(G)$, para todo $v \in V(G)$.

El siguiente resultado es conocido como ***el primer teorema de la Teoría de Gráficas***, este teorema describe la relación que existe entre la suma de los grados de los vértices de G

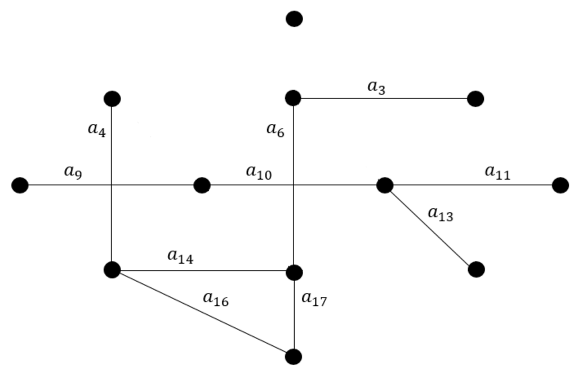


Figura 1.9: $G_3 - A_7$

y el tamaño de la gráfica.

Teorema 1.1.1. *En cualquier gráfica G,*

$$2m = \sum_{v \in V(G)} d(v).$$

Demostración. Notemos que una arista a se cuenta una vez por cada vértice en el que incide, así en la suma de todos los grados de los vértices de G, a es contada dos veces, por lo que la suma de los grados de los vértices de G es dos veces el tamaño de G. □

Una consecuencia inmediata del teorema anterior es el siguiente enunciado.

Corolario 1.1.1. *Para cualquier gráfica G, la cantidad de vértices de grado impar es par.*

Demostración. Sean $A = \{v \in V(G) : d(v) = 2k, k \in \mathbb{N}\}$ y $B = \{v \in V(G) : d(v) = 2k+1, k \in \mathbb{N}\}$ subconjuntos del conjunto de vértices de G. Se puede ver que $A \cup B = V(G)$ y $A \cap B = \emptyset$, ya que un grado siempre es par o impar, pero no los dos, por lo que:

$$2m = \sum_{v \in V(G)} d(v) = \sum_{v \in A \cup B} d(v) = \sum_{v \in A} d(v) + \sum_{u \in B} d(u).$$

Tenemos en cuenta que

$$2r = \sum_{v \in A} d(v), r \in \mathbb{N}.$$

Ya que la suma de enteros pares es par y cada elemento en A es de grado par. De esta manera concluimos que

$$2m = \sum_{v \in A} d(v) + \sum_{u \in B} d(u) = 2r + \sum_{u \in B} d(u),$$

$$2m = 2r + \sum_{u \in B} d(u).$$

De donde tenemos

$$2m - 2r = \sum_{u \in B} d(u).$$

$$2(m-r)=\sum_{u\in B} d(u).$$

Sabemos que la suma de enteros impares es par si y sólo si, el número de sumandos es par. $\square$

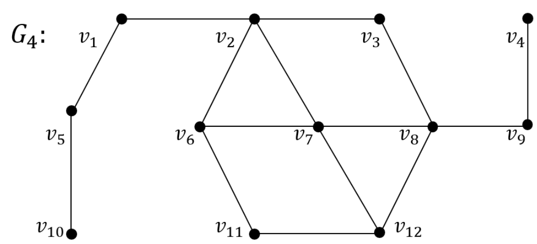


Figura 1.10: G_4

En la gráfica G_4, véase la figura 1.10, notemos que los vértices v_4 y v_{10} son terminales, el grado de v_1, v_3, v_5, v_9 y v_{11} es dos, el de v_6 y v_{12} es tres y por último v_2, v_7 y v_8 es cuatro, de esta manera sabemos que $\delta(G_4)=1$ y $\Delta(G_4)=4$, observando con atención, los grados de los demás vértices están acotados entre estos dos valores, es decir, ningún grado es menor que uno, ni mayor a cuatro, por lo que no existen vértices aislados en G_4.

Al fijarnos en $N_{G_4}(v_7)=\{v_2,v_6,v_8,v_{12}\}$, podemos observar que $|N_{G_4}(v_7)|=d(v_7)=4$, y esto pasa para cada uno de los vértices. Lo que ya se había señalado de manera general.

Así mismo, en esta gráfica tenemos quince aristas y la suma de los grados se reduce a la cuenta:

$$m_{G_4}=\frac{2(1)+5(2)+2(3)+3(4)}{2}=\frac{2+10+6+12}{2}=\frac{30}{2}=15.$$

Haciendo ver que se cumple el primer teorema de Teoría de Gráficas.

También podemos notar, a lo largo del texto, que en cada una de las gráficas hay al menos dos vértices con el mismo grado, por lo que podemos proponer el siguiente teorema.

Teorema 1.1.2. *En cualquier gráfica G no trivial, existen $u,v\in V(G)$ tales que, $d(u)=d(v)$.*

Demostración. Sea G una gráfica, tal que $V(G)=\{v_0,v_1,...,v_{n-1}\}$, ahora supongamos que el enunciado no es verdad, es decir, que cada vértice tiene un grado distinto, por lo que podemos reetiquetar a los vértices con la siguiente asignación:

$d(u_i)=i$, para cada $i=0,1,2,...,n-1$.

Así $d(u_0)=0$ y $d(u_{n-1})=n-1$, lo cual genera una contradicción, ya que existe un vértice que no es adyacente a ninguno y otro que es adyacente a todos.

Por lo tanto deben existir al menos dos vértices distintos $u,v\in V(G)$, tales que $d(u)=d(v)$. $\square$

1.1.3. Caminos en gráficas

Definición 1.1.1. ***Un camino*** *$\mathscr{C}$ en una gráfica G es una sucesión finita en la que se alternan vértices y aristas, es decir, $\mathscr{C} = (v_0, v_0v_1, v_1, v_1v_2, v_2, ..., v_{k-1}v_k, v_k)$, con $v_iv_{i+1} \in A(G)$, para toda $i \in \{0, 1, 2, ..., k-1\}$, de donde definimos la longitud de $\mathscr{C}$ como el número de aristas en $\mathscr{C}$, contando repeticiones, así $l(\mathscr{C}) = k$; para simplificar entenderemos que $\mathscr{C} = (v_0, v_0v_1, v_1, v_1v_2, v_2, ..., v_{k-1}v_k, v_k) = (v_0, v_1, v_2, ..., v_k)$. Es importante destacar que existen diferentes tipos de caminos. Tenemos* ***caminos cerrados****, que son aquellos en los que el primer vértice y el último vértice son iguales, en caso de no ser así, decimos que es un* ***camino abierto****. Llamamos a un camino* ***paseo*** *$\mathscr{P}$, si sus aristas no se repiten, una* ***trayectoria*** *T es un camino en el que no se repiten vértices, los* ***circuitos*** *σ son paseos cerrados y por último los* ***ciclos*** *Γ son caminos cerrados de $l(\Gamma) \geq 3$, en los que no se repiten vértices, salvo el primero y el último.*

A la trayectoria $T = (u = v_1, v_2, ..., v_n = v)$, también la denotamos por uTv y la trayectoria de regreso que pasa por los mismos vértices se denota por $T^{-1} = (v = v_n, v_{n-1}, ..., v_1 = u)$ o $vT^{-1}u$.

Para la gráfica G_4 (figura 1.10) tenemos:

1) $\mathscr{C}_1 = (v_1, v_2, v_7, v_8, v_3, v_2, v_1, v_5)$ es un camino abierto en G_4, que repite al vértice v_1 y la arista v_1v_2, en donde $l(\mathscr{C}_1) = 7$.

2) $\mathscr{C}_2 = (v_1, v_2, v_7, v_8, v_3, v_2, v_1)$ es un camino cerrado en G_4, ya que empieza y termina en v_1, con $l(\mathscr{C}_2) = 6$.

3) $\mathscr{P} = (v_5, v_1, v_2, v_6, v_7, v_8, v_{12}, v_7, v_2)$ es un paseo en G_4, con $l(\mathscr{P}) = 8$, ver figura 1.11.

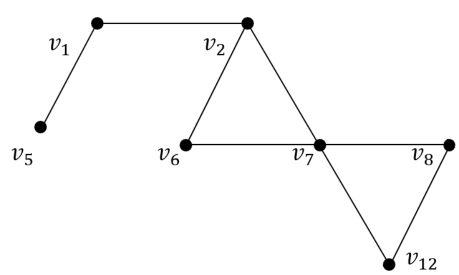


Figura 1.11: Un paseo en G_4

4) $T = (v_5, v_1, v_2, v_6, v_7, v_8)$ es una trayectoria en G_4, con $l(T) = 5$, véase figura 1.12.

5) Podemos observar en 1.13 a $\sigma = (v_7, v_2, v_6, v_7, v_8, v_{12}, v_7)$ que es un circuito en G_4, de longitud $l(\sigma) = 6$.

6) $\Gamma = (v_2, v_6, v_7, v_8, v_3, v_2)$, en la figura 1.14 es un ciclo en G_4, en donde $l(\Gamma) = 5$.

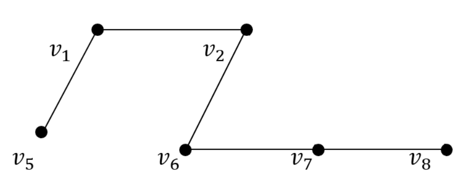


Figura 1.12: Ejemplo de trayectoria en G_4

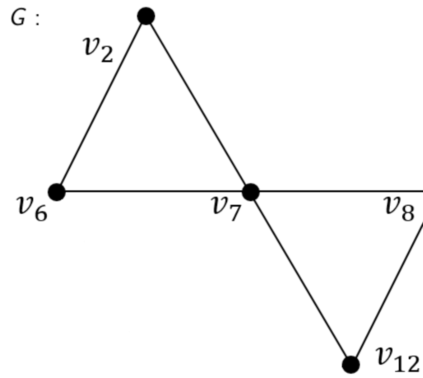


Figura 1.13: Un circuito en G_4

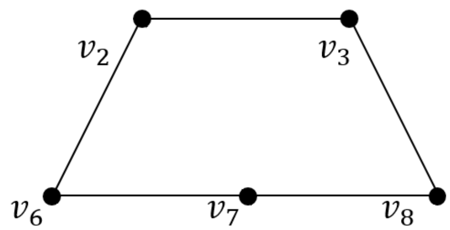


Figura 1.14: Ejemplo de ciclio en G_4

Es clara la diferencia entre un circuito y un ciclo, en el circuito se tiene la posibilidad de repetir más vértices y en el ciclo no, aunque ambos sean caminos cerrados.

Denotamos a un camino que va del vértice u al vértice v, como un *uv-camino* y abreviamos $u\mathscr{C}v$, de la misma manera que se hizo con las *uv-trayectorias* uTv.

Observación 1.1.2. *En toda gráfica G:*

- *Todo ciclo es un circuito, pero no todo circuito es un ciclo.*
- *Toda trayectoria es un paseo, pero no todo paseo es una trayectoria.*

Teorema 1.1.3. *Todo uv-camino contiene una uv-trayectoria.*

Demostración. Procederemos por inducción sobre la longitud del camino. Sea $\mathscr{C} = (u = u_0, u_1, ..., u_k = v)$ un uv-camino, con longitud $l(\mathscr{C}) = k$ y $k \in \mathbb{N}$. Como consideramos que $u \neq v$, tenemos que $k \geq 1$. Así, si tenemos que $l(\mathscr{C}) = 1$, entonces $u = u_0, u_1 = v$, entonces $\mathscr{C}$ es una uv-trayectoria entre u y v.

Ahora supongamos que todo uv-camino $\mathscr{C}'$ tal que $1 \leq l(\mathscr{C}') < k$, contiene una uv-trayectoria, llamada T' que cumple que $l(T') \leq l(\mathscr{C}')$.

Sea un uv-camino con longitud $l(\mathscr{C}) = k$, podemos considerar dos casos:

Caso 1. Si todos los vértices en el camino son distintos, entonces $\mathscr{C}$ es una uv-trayectoria.

Caso 2. Si $u_i = u_j$ para algunas i, j con $i \neq j$, supongamos sin pérdida de generalidad que $i < j$, así, si $\mathscr{C} = (u = u_0, u_1, ..., u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, ..., u_{j-1}, u_j, u_{j+1}, ..., v = u_k)$, entonces existe un camino $\mathscr{C}' = (u = u_0, u_1, ..., u_{i-1}, u_i = u_j, u_{j+1}, ..., v = u_k)$, que por su construcción es un uv-camino que cumple que $l(\mathscr{C}') < l(\mathscr{C})$. Por la hipótesis de inducción sabemos que $\mathscr{C}'$

contiene una uv-trayectoria T'. Como $T' \subseteq \mathscr{C}' \subsetneq \mathscr{C}$, el teorema se cumple.

$\square$

Teorema 1.1.4. *Todo camino cerrado $\mathscr{C}$ de longitud impar, contiene un ciclo Γ de longitud impar.*

Demostración. Inducción sobre la longitud del camino.

Sea $\mathscr{C} = (v_0, v_1, ..., v_{2k-1}, v_{2k}, v_{2k+1} = v_0)$ un camino cerrado, con $l(\mathscr{C}) = 2k+1$. Así para $k = 1$, tenemos que $\mathscr{C} = (v_0, v_1, v_2, v_0)$, entonces sabemos que $\{v_0v_1, v_1v_2, v_2v_0\} \subseteq A(G)$, como G es simple se tiene que $v_0 \neq v_1$, $v_1 \neq v_2$ y $v_0 \neq v_2$, por ello los vértices son diferentes dos a dos y por definición de ciclo $\mathscr{C} = \Gamma_3$, que es el ciclo de longitud 3.

Supongamos que todo camino cerrado $\mathscr{C}' = (v_0, v_1, ..., v_{2r+1} = v_0)$, que cumple que $3 \leq l(\mathscr{C}') = 2r+1 < 2k+1$, para algunas $r, k \in \mathbb{N}$, con $r < k$, contiene un ciclo de longitud impar $2s+1$.

De donde tenemos dos casos:

Caso 1. Sea $\mathscr{C} = (v_0, v_1, ..., v_{2k+1} = v_0)$ un camino cerrado de longitud $2k+1$. Si todos los vértices de $\mathscr{C}$ son diferentes, excepto el primero y el último, tenemos que $\mathscr{C}$ es ya un ciclo por definición, tal que $l(\mathscr{C}) = 2k+1$, con lo que $\mathscr{C} = \Gamma_{2k+1}$.

Caso 2. Si existen $v_i = v_j$, para algún $i \neq j$, sin pérdida de la generalidad tenemos $i < j$, así $\mathscr{C}_1 = (v_0, v_1, ..., v_{i-1}, v_i = v_j, v_{j+1}, ..., v_{2k}, v_{2k+1} = v_0)$ y $\mathscr{C}_2 = (v_i = v_j, v_{i+1}, ..., v_i = v_j)$, son dos caminos cerrados, en donde podemos ver que $l(\mathscr{C}) = l(\mathscr{C}_1) + l(\mathscr{C}_2) = 2k+1$, así, tenemos que $l(\mathscr{C}_1) = 2t+1$ o $l(\mathscr{C}_2) = 2r+1$, es decir, como la longitud de $\mathscr{C}$ es impar, uno de los sumandos debe ser impar y el otro par, supongamos sin pérdida de generalidad que $l(\mathscr{C}_2)$ es impar, así su longitud es menor que $2k+1$, por lo que se cumple la hipótesis de inducción. Por lo tanto $\mathscr{C}_2$ contiene un ciclo de longitud impar y por transitividad de la contención, $\mathscr{C}$ contiene un ciclo de longitud impar.

$\square$

Teorema 1.1.5. *Si G es una gráfica con grado mínimo δ, entonces:*

a) G contiene una trayectoria T de longitud al menos δ.

b) Si $\delta \geq 2$, entonces G contiene un ciclo de longitud al menos $\delta + 1$.

Demostración. Sea G una gráfica con grado mínimo δ.

a) Primero veamos si $\delta = 0$, entonces existe un vértice aislado, en tal caso existe una trayectoria en G con longitud cero, toda trayectoria de longitud cero es un vértice. Si $\delta = 1$ entonces existe $v \in V(G)$ tal que tiene un vecino en G, sea w dicho vecino, entonces $vw \in A(G)$, donde vw es una trayectoria de longitud uno. Ahora, Sea $T = (u = v_0, v_1, ..., v_{r-1}, v_r = v)$ una trayectoria en G de longitud máxima $l(T) = r$, tal que $r \in \mathbb{N}$. Entonces como $d(v_i) \geq \delta \geq 2$, para cada $v_i \in V(G)$, probemos que $r \geq \delta$. Sea $N(v) = \{w \in V(G) : wv \in A(G)\}$, sabemos que $|N(v)| = d(v) \geq \delta$, así v tiene dos o más vecinos, entonces existe $w \in V(G)$, tal que $wv \in A(G)$ y $w \neq v_{r-1}$, lo que nos lleva a pensar que $w \notin T$ o que $w \in T$. Ahora, si $w \notin T$ tenemos una trayectoria $T' = (u = v_0, v_1, ..., v_r = v, w)$, lo que contradice que T es máxima, por lo que cada uno de los vecinos de v está en T. Ahora, sea v_j el primer vecino de v en T, entonces $T_2 = (v_j, v_{j+1}, ..., v_{r-1}, v)$ es una trayectoria que cumple $r \geq l(T_2) \geq \delta$, ya que $N(v) \cup \{v\} \subseteq V(T_2)$.

b) Sabemos por el inciso anterior que existe una trayectoria $T = (v_j, v_{j+1}, ..., v)$ de longitud al menos $\delta \geq 2$, además $vv_j \in A(G)$, entonces el ciclo $\Gamma = (v_j, v_{j+1}, ..., v_{r-1}, v_r = v, v_j)$ con longitud $l(\Gamma) \geq \delta + 1$ está contenido en G, ya que $N(v) \cup \{v\} \subseteq V(\Gamma) \subset V(G)$.

$\square$

Definición 1.1.2. *Si $\mathscr{C}_1$ es un $uv-$camino y $\mathscr{C}_2$ es un $vw-$camino, tales que el último vértice de $\mathscr{C}_1$ es el primer vértice de $\mathscr{C}_2$, entonces podemos crear un nuevo camino $\mathscr{C}$ con ambos, en donde $u\mathscr{C}w = u\mathscr{C}_1 v\mathscr{C}_2 w$, a está unión de caminos la llamamos* ***concatenación****.*

Proposición 1.1.1. *Si T_1 y T_2 son dos $uv-$trayectorias en una gráfica G, tales que $T_1 \neq T_2$, entonces G contiene un ciclo.*

Demostración. Sean G una gráfica, T_1 y T_2 dos $uv-trayectorias$ distintas en G. Como T_1 y T_2 son distintas entonces las podemos representar como $T_1 = (u = v_0, ..., v_i, v_{i+1}, ..., v_r = v)$, con $0 \leq i \leq r$ y $T_2 = (u = v_0, ..., v_i, v_j, ..., v_s = v)$, con $0 \leq i \leq s$, en donde v_i es el último vértice igual en ambas trayectorias desde u, es decir, $v_{i+1} \neq v_j$.

Sea $v_k \in V(G)$, tal que $T_1 = (u = v_0, ..., v_i, v_{i+1}, ..., v_k, ..., v_r = v)$, con $0 \leq i+1 \leq k \leq r$ y $T_2 = (u = v_0, ..., v_i, v_j, v_{j+1}, ..., v_k, ..., v_s = v)$, con $0 \leq j \leq k \leq s$, es decir, v_k es el primer vértice que pertenece a ambas sucesiones, después de v_i, por lo que $v_i T_1 v_k T_2^{-1} v_i$ es un ciclo en G.

$\square$

Observación 1.1.3. *Debido a la proposición anterior, tenemos que existe un ciclo contenido en cualquier camino cerrado $\mathscr{C}$, cuando éste contiene dos $uv-trayectorias$ distintas.*

Definición 1.1.3. *Dos $uv-trayectorias$ T_1 y T_2 son* ***trayectorias internamente ajenas****, cuando sólo son iguales sus vértices inicial y final.*

Proposición 1.1.2. *Un ciclo Γ de longitud k siempre contiene exactamente dos trayectorias internamente ajenas entre cualesquiera dos vértices.*

Demostración. Sea Γ_k un ciclo de longitud k, sean $u_i, u_j \in V(\Gamma_k)$, tales que $u_i \neq u_j$, supongamos sin perdida de generalidad que $i < j$, escribiendo a $\Gamma_k = (u_1, u_2, ..., u_i, u_{i+1}..., u_j, ..., u_k, u_{k+1} = u_1)$ se tienen las trayectorias $T_1 = (u_i, u_{i+1}, ...u_j)$ y $T_2 = (u_i, u_{i-1}..., u_1 = u_{k+1}, u_{k-1}, ..., u_j)$ internamente ajenas entre u_i y u_j, por la definición de ciclo. Para demostrar que son exactamente esas, supongamos que existe otra cuyos vértice inicial es u_i y vértice final es u_j, así T_3 es una trayectoria internamente ajena a T_1 y T_2, por lo que podemos formar los ciclos $\Gamma_1 = u_i T_1 u_j T_2^{-1} u_i$ y $\Gamma_2 = u_i T_1 u_j T_3^{-1} u_i$ y $V(T_3) \not\subset V(T_2)$ y $V(T_2) \not\subset V(T_3)$, entonces $\Gamma_1 \neq \Gamma 2$, contradicción al suponer que no son únicas. Por lo tanto se cumple el enunciado.

$\square$

Definición 1.1.4. *Una gráfica G es* ***conexa*** *si y sólo si entre cualesquiera dos vértices u, v de G existe un $uv-camino$ (o $uv-trayectoria$). En caso contrario decimos que es* ***no conexa****, si una gráfica es no conexa contiene a varias gráficas conexas, ajenas en vértices y aristas, a las que llamamos* ***componentes conexas*** *de G, entre los vértices de una misma componente conexa siempre existe un camino, el número de componentes conexas de G se denota por $c(G)$.*

En la figura 1.15 observamos una gráfica conexa, en el inciso a) entre cualesquiera dos vértices hay un camino, en cambio en el inciso b) la gráfica H contiene tres gráficas conexas y es imposible encontrar un camino de los vértices de una de las componentes a los vértices de cualquiera de las otras dos.

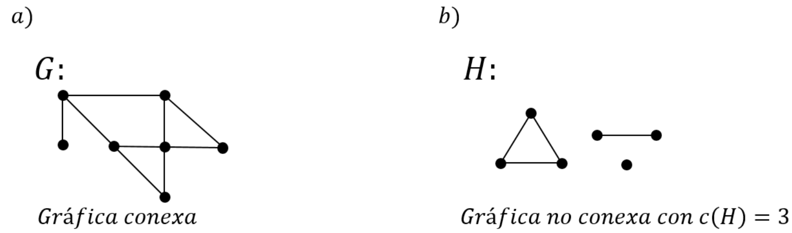


Figura 1.15: Gráficas conexas y no conexas

1.2. Tipos de gráficas, isomorfismos y operaciones con gráficas

1.2.1. Algunos tipos de gráficas

Las gráficas se pueden clasificar de diversas maneras, una forma de hacerlo es a través de las características de su estructura. Así podemos observar que algunas de ellas presentan una secuencia u orden en las relaciones que existen entre sus conjuntos de vértices y de aristas.

Definición 1.2.1. *Una **trayectoria** de orden n, denotada P_n, es una gráfica tal que $V(P_n) = \{u_1, u_2, ..., u_n\}$ $n \in \mathbb{N}$ y $P_n = (u_1, u_2, ..., u_n)$, ver figura 1.16.*

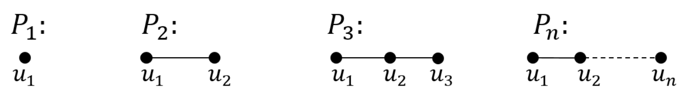


Figura 1.16: Algunas trayectorias

En las trayectorias el orden es n, por lo que el tamaño es $n-1$ y si $n \geq 2$, hay sólo dos vértices de grado uno y el resto tiene grado dos, es decir, en P_n con $n \geq 2$, siempre se tienen exactamente dos vértices terminales.

Definición 1.2.2. *Un **ciclo** de orden $n \geq 3$, denotado C_n, es una gráfica tal que $V(C_n) = \{u_1, u_2, ..., u_n\}$ y $A(C_n) = A(P_n) \cup \{u_n u_1\}$, $C_n = (u_1, u_2, ..., u_n, u_{n+1} = u_1)$, véase figura 1.17.*

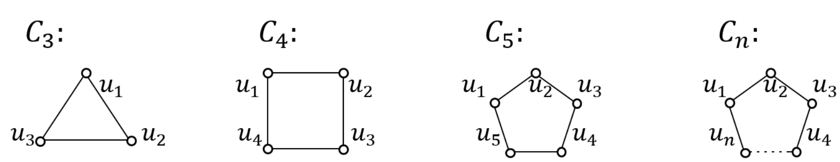


Figura 1.17: Ejemplos de ciclos

En los ciclos el orden y el tamaño siempre son iguales y todos los vértices son de grado dos.

Definición 1.2.3. ***Gráficas Completas***. *Una gráfica G es completa si para cada $u, v \in V(G)$, existe $uv \in A(G)$. Si G es la gráfica completa de orden n, la denotamos K_n, ejemplos en la figura 1.18.*

Para cada $v \in V(K_n)$ se tiene que $d(v) = n-1$, así $m_{K_n} = \frac{1}{2}\sum_{v \in V(K)} d(v) = \dfrac{n(n-1)}{2} = \dbinom{n}{k}$.

Sean $u, v \in V(G)$ tal que $uv \notin A(G)$. Definimos la gráfica $G + uv$ (o $G + a$, si $a = uv$) como: $V(G + uv) = V(G)$ y $A(G + uv) = A(G) \cup \{uv\}$. De manera más general, si $S \subseteq \{xy : x, y \in$

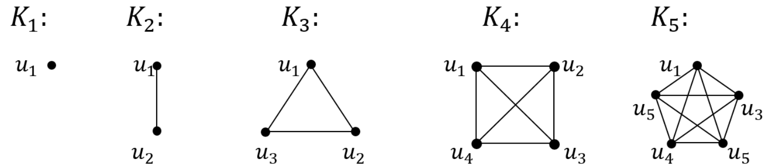


Figura 1.18: Algunas gráficas completas

$V(G)$ y $xy \notin A(G)\}$, entonces $G+S$ es la gráfica que se obtiene de G al añadirle las aristas del conjunto S.

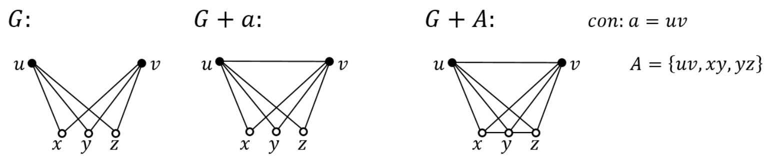


Figura 1.19: Ejemplos de la suma de una aristas

Proposición 1.2.1. *Si K_n es una gráfica completa de orden n, no trivial, entonces para cualesquiera $u, v \in V(G)$:*

a) *existe una $uv-trayectoria$ de longitud $1, 2, ...n-1$.*

b) *existe un $u\Gamma_i v$ ciclo con $i = 3, 4, ..., n$.*

Demostración. Sea K_n una gráfica completa, no trivial.

a) Sea $S \subseteq V(G)$ tal que $|S| = k+1$ y $u, v \in S$, con $k \in \{1, 2, ..., n-1\}$. Sea $u_0, u_1, ..., u_k$ una asignación de etiquetas a los vértices de S tal que $u_0 = u$ y $u_k = v$, como K_n es completa, entonces $u_i u_{i+1} \in A(K_n)$, para toda $i \in \{0, 1, ..., k-1\}$, así la sucesión $(u_0 = u, u_1, ..., u_k = v)$ es una $uv-trayectoria$ de longitud k.

b) Sean $u, v \in V(G)$. Sea T_k una $uv-trayectoria$ de longitud k, construida como en el inciso *a*), entonces $T_k \cup \{vu\}$ es un ciclo de longitud $k+1$, para toda $k \in \{2, 3, ...n-1\}$.

Con lo que se concluye que el enunciado se cumple.

□

Definición 1.2.4. *Una gráfica G es **r-regular**, si $d(u) = r$, para cada $u \in V(G)$ y $0 \leq r \leq n-1$.*

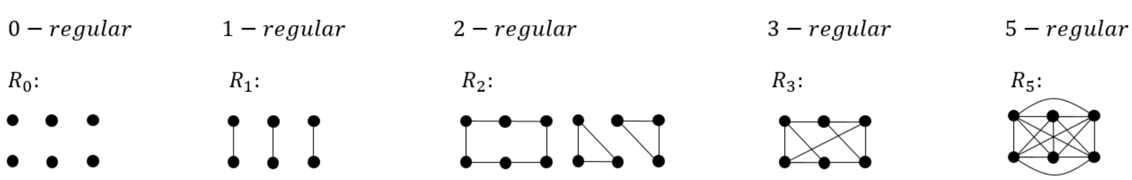


Figura 1.20: Gráficas regulares

En una gráfica G, $r-regular$ de orden n, ver ejemplo en la figura 1.20, se concluye que $m_G = \frac{rn}{2}$, ya que $d(v) = r$, para cada $v \in V(G)$, también que las gráficas completas son $(n-1)-regulares$, los ciclos son $2-regulares$, los conjuntos de vértices aislados son $0-regulares$, esto directamente de sus definiciones.

Definición 1.2.5. *Una gráfica no trivial G es **bipartita**, si existen $U, W \subset V(G)$, tales $\{U, W\}$ es una partición de $V(G)$ y para toda $uw \in A(G)$, tenemos que $u \in U$ si y sólo si $w \in W$, de esta manera vemos que* 1) $U \neq \emptyset$ *y* $W \neq \emptyset$, 2) $U \cap W = \emptyset$ *y* 3) $U \cup W = V(G)$, *que es la partición de $V(G)$.*

De una gráfica bipartita, algo que se puede decir de manera inmediata, es que si $|U|{=}n_1$ y $|W|{=}n_2$, se tiene que $n_G = |U|{+}|W|{=}n_1{+}n_2$ y como las aristas en la gráfica tiene un extremo en U y otro en W, tenemos que $\sum_{u \in U} d(u) = \sum_{w \in W} d(w) = m$, ver figura 1.21.

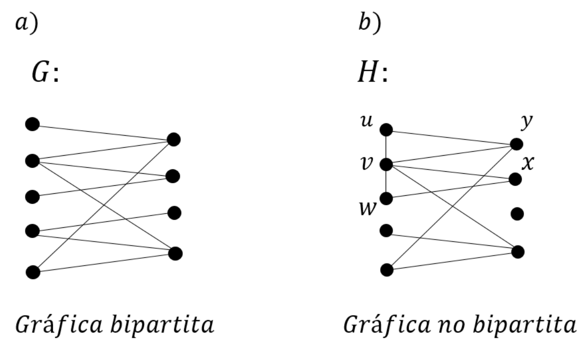


Figura 1.21: Ejemplo de una gráfica bipartita y una no bipartita

En la figura 1.21 podemos ver que los vértices de la gráfica G en el lado izquierdo de la imagen no son adyacentes entre si, lo mismo para los del lado derecho, es decir, los vértices del lado derecho sólo son vecinos de los del lado izquierdo y viceversa, por ello en G tenemos que $n = 5 + 4 = 9$ y $m = 9$ que es la suma de grados en un solo conjunto, en este caso particular el tamaño es igual al orden, pero eso no se cumple en general para las gráficas bipartitas. En esta misma figura 1.21, para la gráfica H no es posible dar una partición ya que $\{uv, uy, vy\} \subset A(H)$, u, v, y no deben estar en el mismo conjunto por ser adyacentes, dos a dos, así no hay una bipartición. Un caso particular de gráficas bipartitas son las ***bipartitas completas***, ver figura 1.22. Decimos que G es bipartita completa si $uv \in A(G)$ para toda $u \in U$ y toda $w \in W$, con $\{U, W\}$ la partición de G. A G la denotamos como $K_{s,t}$, donde $|U| = s$ y $|W| = t$.

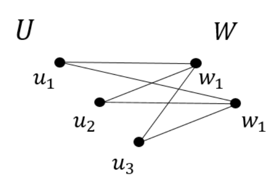


Figura 1.22: Gráfica bipartita completa

En el caso de una gráfica bipartita completa $K_{s,t}$, es posible dar una observación al respecto del tamaño, ya que existen todas las aristas de los vértices de U a los vértices de W y solamente éstas, por lo que contando una vez cada arista de U a W, se obtiene el tamaño de $K_{s,t}$, así $m_{K_{s,t}} = st$. por lo tanto para toda gráfica bipartita el tamaño m se acota de la siguiente manera, $0 \leq m \leq n_1 n_2$, donde n_1 y n_2 son las cardinalidades de las partes.

Definición 1.2.6. *Sea G una gráfica, **la gráfica de líneas** de G, denotada con $L(G)$, es la gráfica tal que $V(L(G)) = A(G)$ y dados $a, b \in V(L(G))$, $ab \in A(L(G))$ si a es adyacente a b en G.*

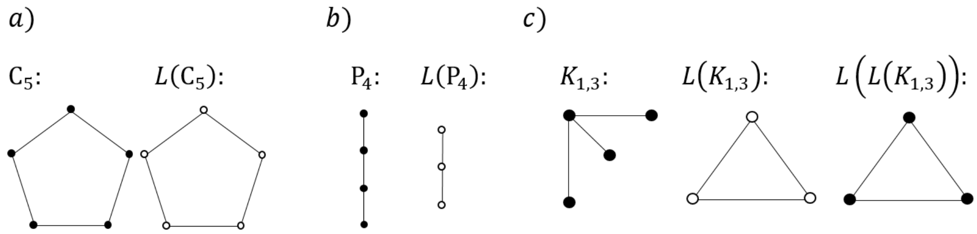


Figura 1.23: Ejemplos de gráficas de líneas

La gráfica de líneas $L(G)$, ver figura 1.23 tiene como orden $n_{L(G)} = m_G$. Notemos que si $a = uv$ tal que $a \in V(L(G))$, entonces $d(v) - 1$ es el número de aristas a las que es adyacente a en G, desde su extremo v, análogamente para cada arista de G que incide en v. Así:

$$2m_{L(G)} = \sum_{a \in V(L(G))} d(a) = \sum_{v \in V(G)} d(v)(d(v) - 1)$$

entonces

$$m_{L(G)} = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(v)(d(v) - 1) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(v)^2 - \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(v) = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(v)^2 - m_G$$

finalmente

$$m_{L(G)} = \frac{1}{2} \sum_{v \in V(G)} d(v)^2 - n_{L(G)}.$$

En nuestros ejemplos para C_5, $m_{C_5} = n_{L(C_5)} = 5$, $m_{L(C_5)} = \frac{4+4+4+4+4}{2} - 5 = 10 - 5 = 5$, para el caso de P_4, $n_{L(P_4)} = m_{P_4} = 4$, $m_{L(P_4)} = \frac{1+4+4+1}{2} - 3 = 5 - 3 = 2$, por último para $K_{1,3}$, $n_{L(K_{1,3})} = m_{K_{1,3}} = 3$, $m_{L(K_{1,3})} = \frac{9+1+1+1}{2} - 3 = 6 - 3 = 3$.

Observación 1.2.1. *Algo importante que podemos decir al respecto de las gráficas, es que:*

i) *No toda gráfica G es gráfica de líneas de alguna otra gráfica.*

Observemos a la gráfica G de la figura 1.24.

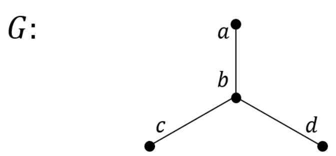


Figura 1.24: Ejemplo de una gráfica que no es la gráfica de líneas de otra gráfica

Supongamos que G es la gráfica de líneas de alguna otra, digamos H, cada vértice de G representa a una arista de H, como tal $b = uv$, con $u, v \in V(H)$, de manera que en H, b debe ser adyacente a a, c y d (figura 1.24) por lo que podemos suponer, sin pérdida de generalidad que $c = ux$ y $d = vy$. Ahora observemos la figura 1.25.

En la figura 1.25, vemos que las dos posibles incidencias de a, que en realidad no son posibles ya que a no es adyacente, como arista, ni a b, ni a c. Por lo que G no es la gráfica de líneas de ninguna otra.

ii) *Más adelante veremos que:*

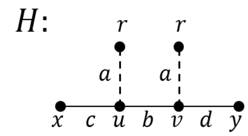


Figura 1.25: Posibles adyacencias de la gráfica

- *a) Una trayectoria T_n tiene como gráfica de líneas a T_{n-1}.*
- *b) Cualquier ciclo Γ_n es su gráfica de líneas.*

Las gráficas se componen de una pareja de conjuntos discretos, una pregunta que podemos hacer al respecto de los conjuntos es: ¿Existe el complemento de una gráfica? Dando paso a la siguiente definición.

Definición 1.2.7. *Si $G = (V(G), A(G))$ es una gráfica, definimos* el complemento *de G a la gráfica G^c, tal que $V(G^c) = V(G)$ y $A(G^c) = \{uv : u, v \in V(G)$ y $uv \notin A(G)\}$.*

Notemos que si G tiene orden n, entonces $m_{G^c} = m_{K_n} - m_G$, es decir $m_{G^c} = \dfrac{n(n-1)}{2} - m_G$.

Figura 1.26: Gráfica complemento

En la figura 1.26 podemos ver que el complemento de una completa no tiene aristas, como se observa en el caso del complemento de K_3. Vemos que para G^c, se agregan las aristas que no están en G y se retiran las que si están, al generar el complemento. Para la gráfica trivial, el complemento es ella misma.

Proposición 1.2.2. *Si G es una gráfica no trivial, no conexa, entonces G^c es conexa.*

Demostración. Sea G una gráfica no trivial y no conexa. Sean $G_1, G_2, ..., G_k$ las componentes conexas de G con $k \geq 2$ y sean $u, v \in V(G^c) = V(G)$. Entonces tenemos dos casos:

1. Si $u, v \in V(G_i)$ para alguna $i \in \{1, 2, ..., k\}$, entonces existe w en los vértices de otra componente conexa de G, tal que $uw, wv \notin A(G)$, por lo tanto $uw, wv \in A(G^c)$, entonces $T = (u, w, v)$ es una $uv - trayectoria$ en G^c.

2. Si $u \in V(G_i)$ y $v \in V(G_j)$, con $i \neq j$, es decir, u y v están en dos componentes distintas de G, entonces tenemos que $uv \notin A(G)$, por lo que $uv \in A(G^c)$, en donde uv es una $uv - trayectoria$ en G^c.

Por lo anterior se concluye, que para todo $u, v \in V(G^c)$ existe una $uv - trayectoria$, por lo tanto G es una gráfica conexa. $\square$

1.2.2. Isomorfismos de gráficas

En cualquier tipo de conjuntos se pueden estudiar las relaciones que existen entre ellos, en particular se estudian las funciones entre los elementos de dos conjuntos, en general se busca encontrar una función en la que la relación sea tan estrecha que las propiedades de un conjunto ayuden a predecir o comparar las características y el comportamiento de otros conjuntos. En Teoría de Gráficas también definiremos una función biyectiva entre los elementos de sus conjuntos.

Definición 1.2.8. *Si G y H son gráficas, y existe $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ biyectiva, tal que para cada $vu \in A(G)$ si y sólo si $f(v)f(u) \in A(H)$, diremos que f es* ***un isomorfismo*** *entre G y H. En este caso, diremos que* ***G es isomorfa a H*** *y lo denotamos por $\boldsymbol{G \cong H}$, ver figura 1.27. Si no existe $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ que cumpla con las características señaladas diremos que G y H* ***no son isomorfas****, denotado con $\boldsymbol{G \ncong H}$, véase figura 1.28.*

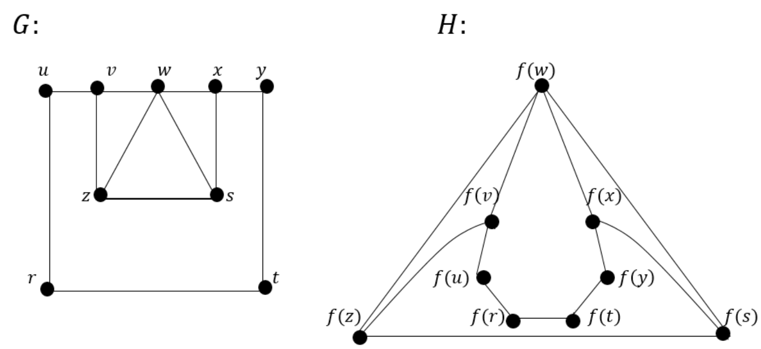


Figura 1.27: Gráficas isomorfas

En la figura 1.27, es claro que las gráficas G y H son isomorfas ($G \cong H$) con la biyección dada.

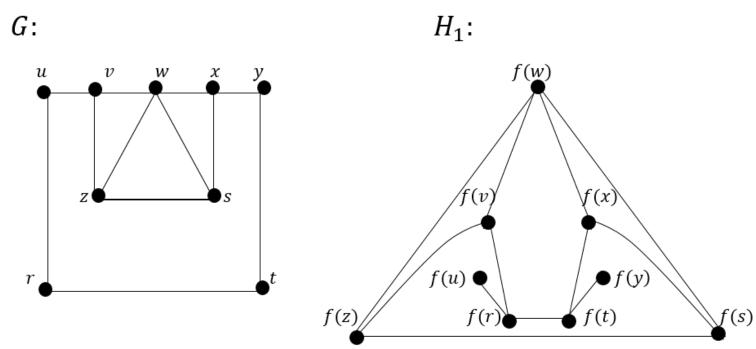


Figura 1.28: Gráficas no isomorfas

La figura 1.28 nos muestra dos gráficas G y H_1 no isomorfas ($G \ncong H_1$), ya que en G no hay vértices de grado 1. Es importante señalar, que el isomorfismo entre gráficas es una relación de equivalencia.

Proposición 1.2.3. *El isomorfismo de gráficas es una relación de equivalencia.*

Demostración. Sea G una gráfica y $f : V(G) \longrightarrow V(G)$ y $f(v) = v$, para todo $v \in V(G)$, f es claramente la identidad, por que la relación isomorfismo de gráficas es reflexiva. Ahora si

$G \cong H$, tenemos una biyección $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ si y sólo si $f^{-1} : V(H) \longrightarrow V(G)$, tal que si $v \in V(G)$, entonces $f(v) = u$, para algún $u \in V(H)$, así $f^{-1}(u) = f^{-1}(f(v)) = v$, por lo que se respetan las adyacencias de u, por lo tanto la relación isomorfismo de gráficas es simétrica. Por último tenemos que si $G \cong H$ y $H \cong F$, entonces existen las funciones biyectivas $g : V(G) \longrightarrow V(H)$ y $h : V(H) \longrightarrow V(F)$ y la composición de funciones biyectivas es biyectiva, entonces $h \circ g : V(G) \longrightarrow V(F)$ es biyectiva, tal que para $v \in V(G)$, $g(v) = u$ y para $u \in V(H)$, $h(u) = h(g(v)) = w$, con $w \in V(F)$. En donde las funciones respetan adyacencias. Por lo que $G \cong F$, así el isomorfismo de gráficas es transitivo. De donde se concluye que la relación isomorfismo de gráficas es de equivalencia. □

Dado que dos gráficas son isomorfas si existe una biyección entre sus conjuntos de vértices, que preserva adyacencias y no adyacencias, esto es, preserva la estructura, se tiene el siguiente teorema.

Teorema 1.2.1. *Sean G y H dos gráficas tal que $G \cong H$, entonces el orden, el tamaño y los grados de G se conservan en H.*

Demostración. Sean G, H dos gráficas, tales que $G \cong H$, entonces: Como $G \cong H$, entonces existe $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ biyectiva, lo que implica de manera directa que tengan el mismo orden. Ahora, sea $s \in V(H)$, como $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ es biyectiva, en particular es suprayectiva, por lo que existe $v \in V(G)$, tal que $f(v) = s$ y por la definición del isomorfismo entre gráficas, para cada $r \in N_H(s)$, existe un $u \in N_G(v)$, tal que $f(u) = r$, así $d(s) = |N_H(s)| = |N_G(v)| = d(u)$, entonces los grados se conservan. Por último por el primer teorema de Teoría de Gráficas y por lo anterior se tiene que, $2|A(H)| = \sum_{s \in V(H)} d(s) = \sum_{v \in V(G)} d(v) = 2|A(G)|$, así $|A(G)| = |A(H)|$. □

Es importante aclarar que las condiciones del teorema 1.2.1, no son suficientes para determinar si dos gráficas son isomorfas. En la figura 1.29 se muestran dos gráficas G y H, del mismo orden y tamaño para las cuales existen funciones biyectivas que preservan los grados, pero no son isomorfas. Ya que H es conexa y G no.

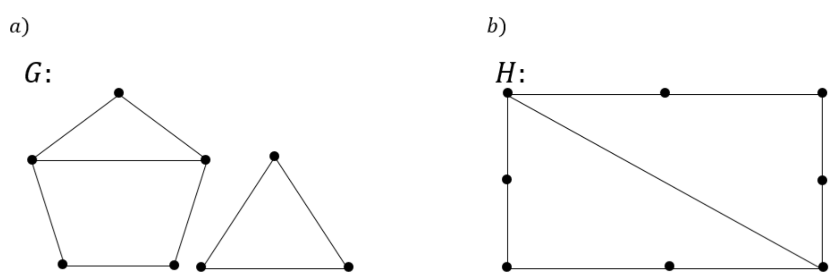


Figura 1.29: Gráficas no isomorfas con el mismo orden, el mismo tamaño y los mismos grados

Probaremos ahora un resultado que es inmediato de la definición de isomorfismo.

Proposición 1.2.4. *Sea $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ un isomorfismo de gráficas. Si $\mathscr{C}_G = (u_0, u_1, ..., u_k)$ es un camino de longitud k en G, entonces $\mathscr{C}_H = (f(u_0), f(u_1), ..., f(u_k))$ es un camino de longitud k en H.*

Demostración. Sean G y H dos gráficas con $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ un isomorfismo entre ellas, y sea $\mathscr{C}_G = (u_1, u_2, ..., u_k)$ un camino en G, con $k \in \mathbb{N}$. Por la definición de isomorfismo sabemos que: $u_i u_{i+1} \in A(G)$ si y sólo si $f(u_i)f(u_{i+1}) \in A(H)$, para todo $i \in \{0, 1, ..., k-1\}$. Así, al aplicar el isomorfismo a $\mathscr{C}_G$ obtenemos que $f(\mathscr{C}_H) = \mathscr{C}_H = (f(u_1), f(u_2), ..., f(u_k))$ es un camino en H de longitud k.

$\square$

Corolario 1.2.1. *Si G y H son gráficas, tales que $G \cong H$, entonces G es conexa si y sólo si H es conexa.*

Demostración. Sean $r, s \in V(H)$, como $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ es biyectiva, existen $u, v \in V(G)$, tales que $f(u) = r$ y $f(v) = s$. Además G es conexa si y sólo si existe un $uv - camino$ en G, por la proposición anterior, tenemos que existe un $f(u)f(v) - camino$ en H, es decir, un $rs - camino$ en H, como r y s son arbitrarios, podemos decir que H es conexa. Tomando para el regreso f^{-1} y teniendo en cuenta que H es conexa, la demostración de que G es conexa, es análoga. $\square$

Podemos aplicar el teorema anterior para asegurar las siguiente afirmaciones.

Observación 1.2.2. *Para un par de gráficas G y H tal que $f : V(G) \longrightarrow V(H)$ es un isomorfismo de gráficas, sucede que:*

- *Si Γ es un ciclo en G, entonces $f(\Gamma)$ es un ciclo en H con la misma longitud de Γ.*
- *Si G contiene una trayectoria T, de longitud k, entonces $f(T)$ es una trayectoria de longitud k en H.*
- *Si G es conexa, entonces H es conexa.*
- *Para G una gráfica bipartita con partición $\{U, W\}$, entonces H es bipartita con bipartición $\{f(U), f(W)\}$.*
- *Así, se pueden estudiar las características de la gráfica G, a partir de conocer las características de la gráfica H, simplificando el trabajo, si ya conocemos a G.*

Definición 1.2.9. *Si $G \cong G^c$. Diremos que G es una **gráfica autocomplementaria**, ver figura 1.30.*

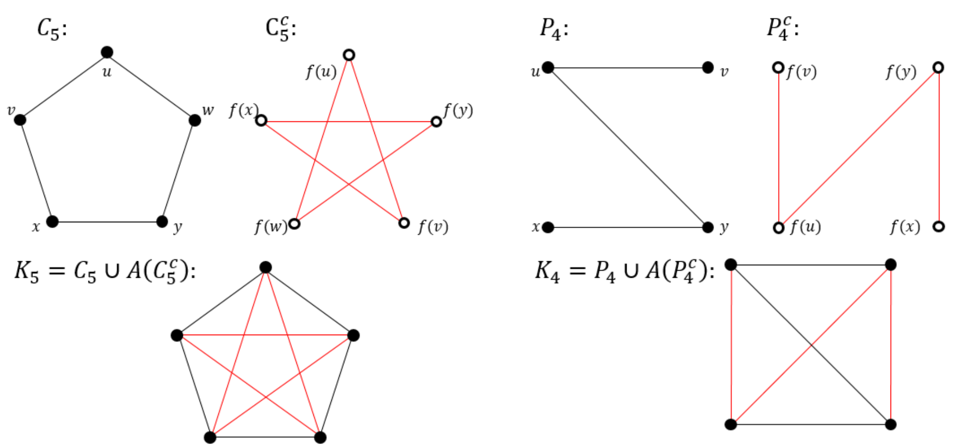


Figura 1.30: Gráficas autocomplementarias

Observemos que para cualquier gráfica G, $G + A(G^c) = G^c + A(G) = K_n$. Por lo que si G es autocomplementaria, entonces $|A(G)| = |A(G^c)|$. Así, $2|A(G)| = |A(K_n)|$; es decir,

$|A(G)| = \frac{n(n-1)}{4}$.

Proposición 1.2.5. *Para cada ciclo C_n, se tiene que $C_n \cong L(C_n)$.*

Demostración. Sea $C = (v_1, v_2, ..., v_n, v_1)$ un ciclo de orden n. La gráfica de líneas de C, $L(C)$ cumple que $V(L(C)) = A(C) = \{a_1, a_2, ..., a_n\}$, con $a_i = v_i v_{i+1}$, para $i \in \{1, 2, ..., n-1\}$ y $a_n = v_n v_1$. Definimos a $f(C) = (f(v_1), f(v_2), ..., f(v_n), f(v_1)) = (a_1, a_2, ..., a_n, a_1) = L(C)$ una función biyectiva, por la definición de f tenemos que $f(v_i)f(v_{i+1}) \in A(L(C))$ y $f(v_n)f(v_1) \in A(L(C))$, para cada $i \in \{1, 2, .., n-1\}$, así $L(C)$ es un ciclo de orden n.

□

Proposición 1.2.6. *Para cada trayectoria P_n, se tiene que $P_{n-1} \cong L(P_n)$.*

Demostración. Sean $P = (v_1, v_2, ..., v_n)$ una trayectoria de orden n y $P' = (v_1, v_2, ..., v_{n-1}) = P - v_n$ una trayectoria de orden $n-1$. La gráfica de líneas de P, $L(P) = (a_1, a_2, ..., a_{n-1})$ con $V(L(P)) = A(P) = \{a_1, a_2, ..., a_{n-1}\}$ y $a_i = v_i v_{i+1}$, para $i \in \{1, 2, ..., n-1\}$. Definimos la función $f(P') = (f(v_1), f(v_2), ..., f(v_n)) = (a_1, a_2, ..., a_{n-1}) = L(P)$, como los órdenes son iguales la función es biyectiva, y $f(v_i)f(v_{i+1}) \in A(L(P))$ si y sólo si $v_i v_{i+1} \in A(P')$ para cada $i \in \{1, 2, ..., n-2\}$, de donde f es un isomorfismos de gráficas. □

1.2.3. Operaciones con gráficas

Ahora que tenemos varios tipos de gráficas podemos jugar un poco más definiendo algunas operaciones entre ellas. Así ampliamos las posibilidades del estudio y podremos valorar su comportamiento al generar más gráficas con estas operaciones.

Definición 1.2.10. *Si G y H son gráficas y $V(G) \cap V(H) = \emptyset$, definimos la* ***unión de gráficas*** *como la gráfica $G \cup H$, tal que $V(G \cup H) = V(G) \cup V(H)$ y $A(G \cup H) = A(G) \cup A(H)$. Es decir podemos pensar en la unión de dos gráficas es la gráfica que considera como una sola gráfica a ambas. Podemos generalizar la definición de la unión de gráficas para una cantidad finita, tal que si $H_1, H_2, ..., H_k$ son k gráficas, tales que sus conjuntos de vértices son ajenos dos a dos, la unión de ellas es la gráfica denotada por $\bigcup_{i=1}^{n} H_i$, en donde $V(\bigcup_{i=1}^{n} H_i) = \bigcup_{i=1}^{n} V(H_i)$ y $A(\bigcup_{i=1}^{n} H_i) = \bigcup_{i=1}^{n} A(H_i)$.*

Notemos que el orden de la unión es la suma de los órdenes de cada una de las gráficas y lo mismo ocurre con el tamaño. De este modo cualquier gráfica G se puede ver como la unión de sus componentes conexas.

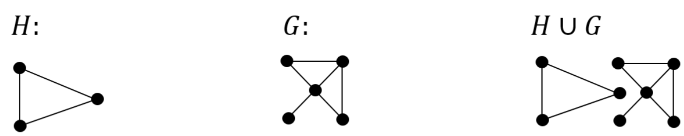


Figura 1.31: Ejemplo de la unión de gráficas

En la figura 1.31 podemos observar que el orden de H es $n_H = 3$, el tamaño de H, $m_H = 3$, el orden de G, $n_G = 5$, el tamaño de G, $m_G = 6$ y al hacer la unión $H \cup G$, el orden $n_{H \cup G} = 8$ y su tamaño es $m_{H \cup G} = 9$.

Definición 1.2.11. *Si G y H son gráficas, tales que $V(G) \cap V(H) = \phi$, se define la* ***suma de gráficas****, denotada por $G + H$, como la gráfica que tiene como conjunto de vértices $V(G+H) =$*

$V(G) \cup V(H)$ y cuyo conjunto de aristas $A(G+H) = A(G) \cup A(H) \cup \{uv : u \in V(G)$ y $v \in V(H)\}$, ver figura 1.32.

Figura 1.32: Ejemplo de la suma de gráficas

De forma general para la suma de gráficas podemos ver que el orden $n_{G+H} = n_G + n_H$, y el tamaño $m_{G+H} = m_G + m_H + n_G n_H$, ya que los conjuntos de vértices son ajenos, en esta operación también tenemos que $G+H = H+G$. En la figura 1.32 vemos que $n_{K_3^c} = 3$, $n_G = 4$, $m_{K_3^c} = 0$, $m_G = 4$ y $n_{K_3^c+G} = 3+4 = 7$, $m_{K_3^c+G} = 0+4+(3)(4) = 16$.

La definición de suma de gráficas, induce otra definición para las gráficas ***bipartitas completas***, dada por $K_{s,t} = K_s^c + K_t^c$, véase figura 1.33.

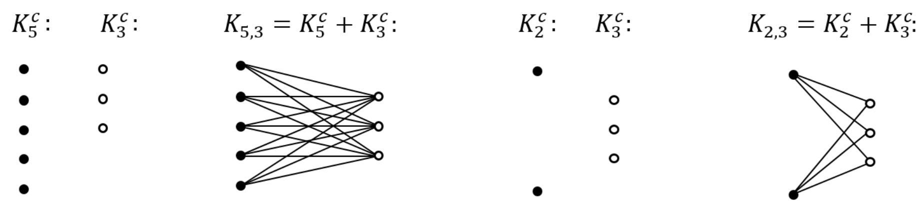


Figura 1.33: Ejemplo de gráficas bipartitas completas

Definición 1.2.12. *Si G y H son gráficas, definimos* ***el producto cartesiano*** *de G con H a la gráfica denotada por $G \times H$, tal que $V(G \times H) = V(G) \times V(H)$ y $(u,v)(x,y) \in A(G \times H)$ si y sólo si $u = x$ y $vy \in A(H)$ o $v = y$ y $ux \in A(G)$.*

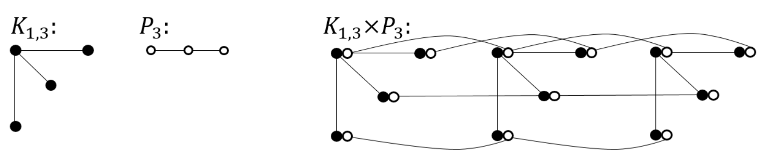


Figura 1.34: Ejemplo de gráficas bipartitas completas

En la figura 1.34, los vértices bicolores en el lado derecho, representan un sólo vértice del *producto cartesiano.*

Debido a la definición del producto cartesiano tenemos para el orden que $n_{G \times H} = n_G n_H$ y por último $m_{G \times H} = n_G m_H + n_H m_G$, ya que aparecen tantas copias de G como vértices tiene H y tantas copias de H como vértices tiene G. Así para nuestro ejemplo, sabemos que $n_G = 4$, $n_H = 3$, $m_G = 3$, $m_H = 2$, por lo que $n_{G \times H} = (4)(3) = 12$, $m_{G \times H} = (4)(2) + (3)(3) = 17$. Una observación más que podemos dar del producto entre gráficas es que $G \times H \neq H \times G$, pero $G \times H \cong H \times G$, esto se debe al orden de las parejas de vértices.

El isomorfismo es tal que para un $(u,v) \in V(G \times H)$, $f((u,v)) = (v,u)$, con $(v,u) \in V(H \times G)$, para $u \in V(G)$ y $v \in V(H)$, en la figura 1.35 podemos observar esto, en ella los vértices bicolores de los productos de las gráficas también representan un solo vértice para la operación.

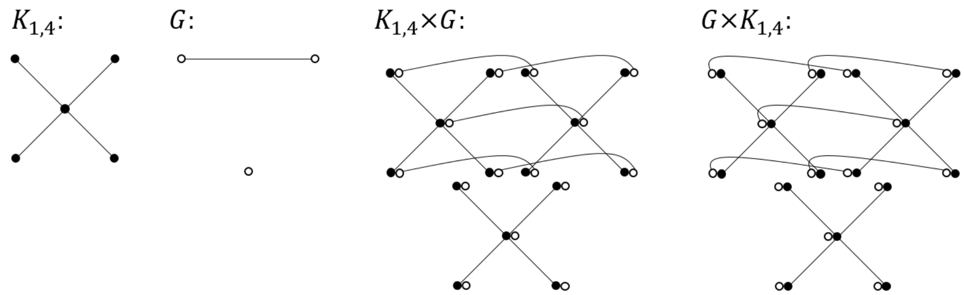


Figura 1.35: Ejemplo isomorfismo del producto cartesiano

Definición 1.2.13. *Sean G y H dos gráficas. Definimos el producto fuerte de G con H, como la gráfica denotada por $G\dot{\times}H$, que cumple $V(G\dot{\times}H) = V(G)\times V(H)$ y $(u,v)(z,w) \in A(G\dot{\times}H)$ si y sólo si $uz \in A(G)$ y $vw \in A(H)$, ver figura 1.36.*

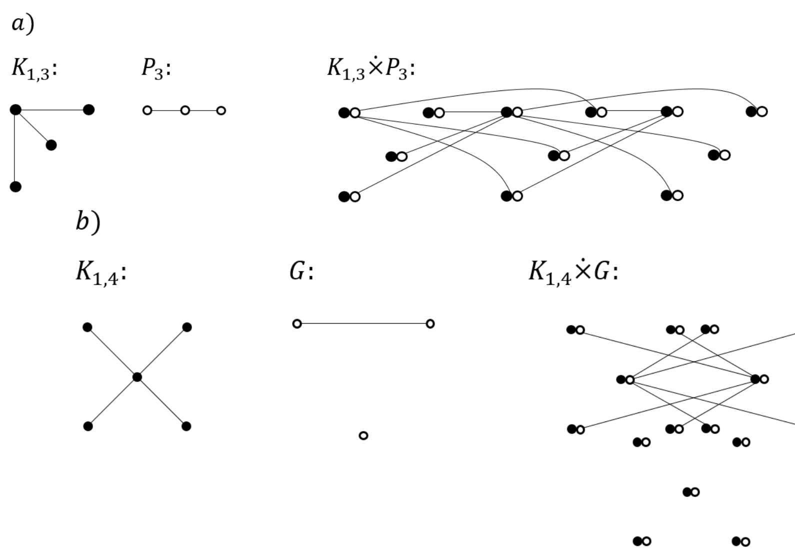


Figura 1.36: Ejemplos del producto fuerte entre dos gráficas

En el producto fuerte también se cumple que $G\dot{\times}H \neq H\dot{\times}G$, por tener parejas ordenadas distintas en los vértices, en cambio son gráficas isomorfas, es decir, $G\dot{\times}H \cong H\dot{\times}G$.

Para obtener el tamaño de esta operación, observemos que $N_G(u) = \{z \in V(G) : uz \in A(G)\}$ y $N_H(v) = \{w \in V(H) : vw \in A(H)\}$, además $|N_G(u)| = d_G(u)$ y $|N_H(v)| = d_H(v)$. Así, $N_G(u)\times N_H(v) = \{(z,w) : z \in N_G(u) \text{ y } w \in N_H(v)\}$, de donde la cardinalidad del producto es $|N_G(u)\times N_H(v)| = |N_G(u)||N_H(v)| = d_G(u)d_H(v)$.

Por otro lado, sabemos que $(u,v)(z,w) \in A(G\dot{\times}H)$ si y sólo si $uz \in A(G)$ y $vw \in A(H)$, de lo anterior obtenemos $N_{G\dot{\times}H}(u,v) = N_G(u)\times N_H(v)$, por lo tanto $d_{G\dot{\times}H}(u,v) = d_G(u)d_H(v)$. Por el teorema de la suma de grados podemos decir lo siguiente:

$$\begin{aligned} 2m_{G\dot{\times}H} &= \sum_{(u,v)\in V(G\dot{\times}H)} d_{G\dot{\times}H}(u,v) = \sum_{\substack{u\in V(G)\\ v\in V(H)}} d_G(u)d_H(v) \\ &= \sum_{i=1}^{n} d_G(u_i) \sum_{i=1}^{k} d_H(v_i) = (2m_G)(2m_H) \end{aligned}$$

de donde podemos concluir que:

$$m_{G\dot{\times}H} = 2m_Gm_H.$$

Definición 1.2.14. *Sean G y H gráficas con $V(G) = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$. Si $H_1, H_2, ..., H_n$ son gráficas ajenas dos a dos, tales que $H_i \cong H$ para cada $i \in \{1, 2, ..., n\}$. Definimos la **composición** de G con H a la gráfica $G \circ H$ tal que $V(G \circ H) = \cup_{i=1}^{n} V(H_i)$ y $A(G \circ H) = \cup_{i=1}^{n} A(H_i) \cup \{u_i u_j : u_i \in V(H_i), u_j \in V(H_j)$ y $v_i v_j \in A(G)\}$.*

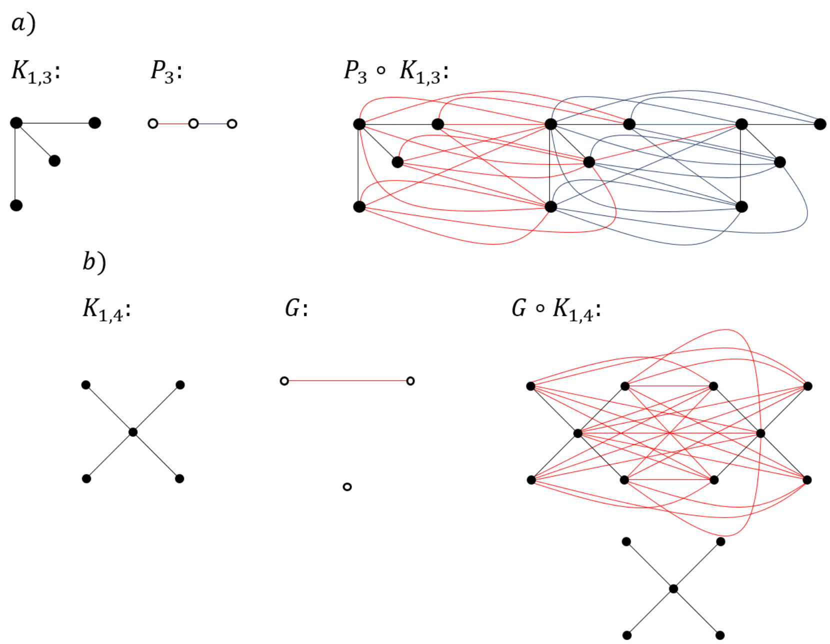


Figura 1.37: Ejemplo de la composición de gráficas

Observemos que en la gráfica $G \circ H$ hay una copia de H por cada vértice de G, véase figura 1.37, entonces $n_{G \circ H} = n_G n_H$. En cada copia de H tenemos que $| \cup_{i=1}^{n} m_{H_i}| = n_G m_H$, que son las aristas de cada copia. Luego, si $v_i v_j \in A(G)$, entonces todos los vértices de H_i son adyacentes a todos los vértices de H_j, entonces hay $(n_H)^2$ aristas entre H_i y H_j, eso pasa para cada arista en G, así, hay $m_G(n_H)^2$ aristas más en $G \circ H$. Con lo anterior podemos concluir que $m_{G \circ H} = n_G m_H + m_G n_H^2$.

1.3. Conexidad

1.3.1. Gráficas conexas

Como ya sabemos existen distintos tipos de gráficas, en algunos ejemplos notamos que hay gráficas en las que se presentan vértices aislados o aristas aisladas como en la gráfica G de la figura 1.35, de la misma manera se pueden presentar gráficas que sean la unión de gráficas.

Recordemos que una gráfica G es conexa, si dados $u, v \in V(G)$ existe un uv-camino (uv-trayectoria) entre ellos, en caso contrario decimos que G es no conexa.

En la figura 1.38, se observa una gráfica conexa en el inciso a), en ella hay un camino entre cualquier par de vértices. En el inciso b) la figura representa a una gráfica no conexa. Recordemos que una ***componente conexa*** de una gráfica G es una subgráfica inducida conexa máxima por contención H, es decir, no existe otra subgráfica inducida conexa de G que la contenga propiamente. Al número de componentes conexas de una gráfica G lo denotamos

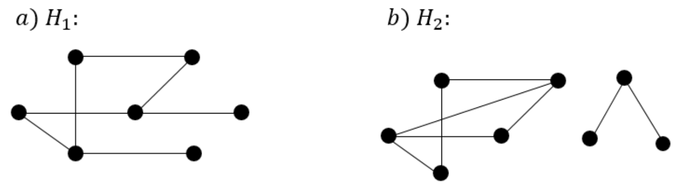


Figura 1.38: a) gráfica conexa, b) gráfica no conexa

por $c(G)$. En el caso de H_1, $c(H_1) = 1$ y para H_2, tenemos $c(H_2) = 2$.

Teorema 1.3.1. *Una gráfica G es conexa si y sólo si posee un camino que contiene a todos los vértices de G.*

Demostración. Primero notemos que si G es una gráfica conexa, tal que $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, ..., v_{n-1}, v_n\}$, entonces como G es conexa sabemos que existe un v_iv_{i+1}-camino o $v_i\mathscr{C}_iv_{i+1}$, para cada $i = 1, 2, \ldots, n-1$, por lo que se puede construir un camino de la siguiente manera: $\mathscr{C}_n = v_1\mathscr{C}_1v_2\mathscr{C}_2v_3\mathscr{C}_3v_4 \cdots v_{n-1}\mathscr{C}_{n-1}v_n$, que es un camino que pasa por todos los vértices de G.

Ahora si tomamos un camino $\mathscr{C}$ tal que pasa por todos los vértices, entonces existe un subcamino $u\mathscr{C}v$, para cualesquiera $u, v \in V(G)$, por lo que G es conexa, así queda demostrado el enunciado. □

Otras formas de caracterizar las gráficas conexas, se puede ver con los siguientes teoremas.

Teorema 1.3.2. *Una gráfica G, con $n_G \geq 2$, es conexa si y sólo si para cualquier partición $\{U, W\}$ del conjunto $V(G)$, existe $a = uw \in A(G)$, tal que $u \in U$ y $w \in W$.*

Demostración. Primero veremos que si G, con $n_G \geq 2$, es conexa, entonces para cualquier partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, existe una arista entre U y W, denotada por UW-arista. Recordemos que $\{U, W\}$, cumple que: a) $U \neq \emptyset$ y $W \neq \emptyset$, b) $U \cap W = \emptyset$ y c) $U \cup W = V(G)$, por ser $\{U, W\}$ partición. Ahora si $u \in U$ y $w \in W$, como G es conexa existe uTw trayectoria en G, y sabemos que $u \in U \cap V(T)$ y que $w \in W \cap V(T)$, como G es conexa existe w_i un primer vértice de T que está en W, así $w_{i-1} \in U$, por lo que $w_{i-1}w_i$ es una $UW-arista$.

Ahora supondremos que para cada partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, existe una $a = uw \in A(G)$ y demostraremos que G es conexa. Procederemos por contradicción, supongamos que G no es conexa y sea $u \in V(G)$, consideremos los siguientes conjuntos, $U = \{x \in V(G) : hay\ ux-trayectoria\ en\ G\}$ y $W = V(G) - U$, es decir, $\{U, W\}$ es una partición de $V(G)$, entonces existen $w_1 \in U$ y $w_2 \in W$, tales que w_1w_2 es una UW-arista, sea T_1 una uw_1-trayectoria en G, entonces $T = uT_1w_1w_2 = (u, ..., w_1, w_2)$ es una uw_2-trayectoria en G, contradicción, por lo que G es conexa.

□

Teorema 1.3.3. *Toda gráfica G de orden $n \geq 2$ es conexa si y sólo si existen $u, v \in V(G)$, tales que $G - u$ y $G - v$ son conexas.*

Demostración. Sea G conexa con orden $n = 2$, entonces $G = K_2$ y el teorema se cumple. Ahora, sea G una gráfica conexa, tal que su orden es $n \geq 3$, como G es conexa podemos tomar $T = (u_0, u_1, ..., u_k)$, con $2 \leq k \leq n$, una trayectoria de longitud máxima, consideremos el extremo de T, u_0. Afirmamos que $N_G(u_0) \subset V(T)$, ya que de no ser así, entonces existe

$v \in V(G)$, tal que $vu_0 \in A(G)$, entonces $T_1 = vu_0Tu_k$ es una trayectoria de longitud $l(T)+1 = k+1$, esto no puede ser debido a que T es de longitud máxima.

Ahora demostraremos que $G-u_0$ es conexa. Sean $x, y \in V(G-u_0)$, existen tres posibilidades, la primera es que $x, y \in V(T)$, entonces existe una subtrayectoria xT_1y contenida en T que no pasa por u_0, por lo tanto T_1 es una $xy-$ *trayectoria* en $G-u_0$.

Segunda posibilidad, supongamos sin pérdida de generalidad que $x \in V(T)$, $y \notin V(T)$, como G es conexa existe una u_0T_2y trayectoria en G, además sabemos que $N_G(u_0) \subset V(T)$, entonces existe $z \in N_G(u_0)$, tal que $z \in V(T_2)$, así la subtrayectoria zT_2y está en $G-u_0$, también sabemos que $x, z \in V(T)$, así tenemos la subtrayectoria xT_1z en $G-u_0$, por la primera posibilidad y concatenando tenemos $\mathscr{C}_1 = xT_1zT_2y$ un $xy-$ *camino* en $G-u_0$.

Por último, si $x \notin V(T)$, $y \notin V(T)$, sabemos que existe $w \in V(T)$, con $w \neq u_0$, afirmamos que existen xT_3w y wT_4y en $G-u_0$, por el caso anterior, concatenando tenemos $\mathscr{C}_2 = xT_3wT_4y$, tal que es un $xy-$ *camino* en $G-u_0$. Podemos sustituir a u_k, en lugar de u_0, teniendo las mismas conclusiones, por lo que si tomamos $u = u_0$ y $v = u_k$, queda demostrada la condición de suficiencia del teorema.

Ahora supondremos que existen $u, v \in V(G)$, tales que $G-u$ y $G-v$ son conexas, para demostrar que G es conexa, basta ver que en G hay un $uv-$ *camino*. Como $n \geq 3$ entonces existe $w \in V(G-\{u, v\})$. Sean T_1 una $uw-$ *trayectoria* en $G-v$ y T_2 una $wv-$ *trayectoria* en $G-u$, entonces $\mathscr{C} = uT_1wT_2v$ es un $uv-$ *camino* en G. Por lo tanto G es conexa. □

Del teorema anterior sabemos que toda gráfica conexa no trivial, posee al menos dos vértices u y v tales que $G-u$ y $G-v$ son conexas; sin embargo, en G también puede existir algún vértice w, tal que la gráfica $G-w$ es no conexa.

Definición 1.3.1. *Sea $v \in V(G)$, decimos que es* ***vértice de corte*** *en G, si y sólo si $c(G-v) > c(G)$. En particular, si G es conexa, $G-v$ es una gráfica no conexa.*

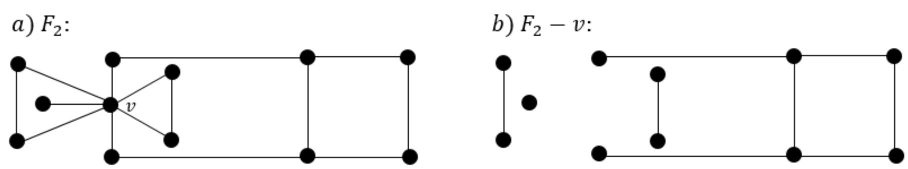


Figura 1.39: $a)$ F gráfica conexa, $F_2 - v$ gráfica no conexa

En la figura 1.39, vemos que al realizar $F_2 - v$ se obtiene una gráfica no conexa, donde $c(F_2 - v) = 4$. El número de componentes conexas en una gráfica $G-v$, está acotado por $c(G) \leq c(G-v) \leq c(G) + d(v)$, donde v no necesariamente es de corte.

Definición 1.3.2. *Decimos que una arista uv de G, es llamada* ***puente en*** *G o* ***arista de corte en*** *G, si al hacer $G-uv$ aumenta el número de componentes conexas, es decir, $c(G-uv) > c(G)$, de aquí se tiene la siguiente proposición.*

Proposición 1.3.1. *Si G es una gráfica, con $c(G) = k$, tal que existe $uv \in A(G)$ puente de G, entonces $c(G-uv) = k+1$.*

Demostración. Sean G una gráfica, con $c(G) = k$, H una componente conexa de G, tal que existe $uv \in A(H) \subseteq A(G)$ puente en G. Observemos que $u, v \in V(H)$, por lo que basta ver que $c(H-uv) = 1+1 = 2$. Supongamos lo contrario, es decir, que $c(H-uv) \geq 3$.

Sean $v_1 \in V(H_1)$, $v_2 \in V(H_2)$ y $v_3 \in V(H_3)$, con H_1, H_2 y H_3 componentes conexas de $H - uv$. Consideremos la trayectoria $T_1 = (v_1 = u_1, ..., u_i = u, u_{i+1} = v, ..., u_r = v_2)$, con $1 \leq i \leq r$ una v_1v_2-trayectoria en H.

Por otro lado tenemos $T_2 = (v_1 = u_1, ..., u_i = u)$ una v_1u-trayectoria en $H - uv$ contenida totalmente en H_1 y $T_3 = (u_{i+1} = v, ..., u_r = v_2)$ una vv_2-trayectoria en $H - uv$ contenida en H_2.

Como H es conexa, existen una uv_3-trayectoria T_2' y una vv_3-trayectoria T_3' en H, tales que si $uv \in A(T_2')$, entonces v y v_3 están en la misma componente conexa de $H - uv$, esto no es posible ya que v_1 y v están en la misma componente conexa, de donde tenemos que $uv \notin A(T_2')$, lo que implica que u y v_3 estén en la misma componente conexa, lo cual es una contradicción ya que u y v_2 están en la misma componente conexa.

Análogamente, si tenemos que $uv \in A(T_3')$, entonces tenemos que u y v_3 están en la misma componente conexa de $H - uv$, lo cual no puede ser ya que v_2 y u están en la misma componente conexa, por lo que $uv \notin A(T_3')$, así, v y v_3 están en la misma componente conexa, que es contradicción, debido a que v_1 y v están en la misma componente conexa, por lo que no existen más de dos componentes conexas en $H - uv$, de donde tenemos que $c(H - uv) = 2$. Por lo tanto $c(G - uv) = k + 1$.

□

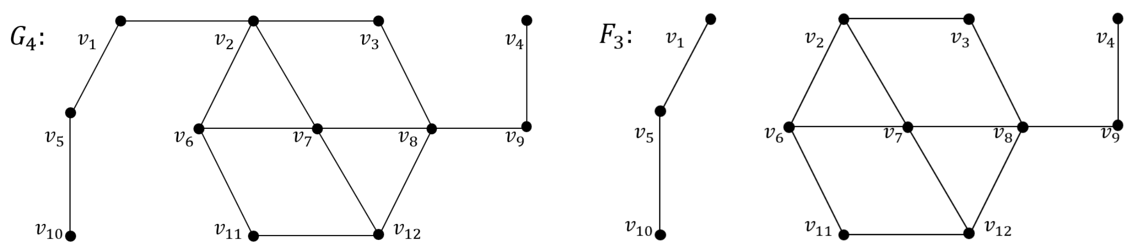


Figura 1.40: *a)* G_4 y *b)* $F_3 = G_4 - v_1v_2$

En la figura 1.40, observamos que $F_3 = G_4 - v_1v_2$ es una gráfica no conexa. Los resultados anteriores muestran caracterizaciones de las gráficas conexas que ayudarán a estudiar diferentes propiedades y son de utilidad en otras demostraciones.

Podemos ver que los vértices de corte y los puentes se pueden caracterizar, para ello enunciaremos las siguientes proposiciones.

Proposición 1.3.2. *En toda gráfica conexa G de orden $n \geq 3$, v es vértice de corte de G si y sólo si existen $u, w \in V(G)$ tal que toda uw-trayectoria pasa por v.*

Demostración. Sean G una gráfica conexa con orden $n \geq 3$, v un vértice de corte en G, y $G_1, G_2, ..., G_k$, con $k \geq 2$, las componentes conexas de $G - v$. Sean $u \in V(G_i)$ y $w \in V(G_j)$ con $i \neq j$ e $i, j \in \{1, 2, ..., k\}$. Afirmamos que toda $uw - trayectoria$ pasa por v, en caso contrario existiría una uw-trayectoria en $G - v$, lo cual es una contradicción, debido a que están en diferentes componentes conexas de $G - v$. Ahora supongamos que existen $u, w \in V(G)$ tales que toda $uw - trayectoria$ pasa por v un vértice en G, entonces en $G - v$ no existe una $uw - trayectoria$, por lo que $G - v$ es no conexa. Con lo que se concluye que el enunciado es verdadero.

□

Decimos que una arista es cíclica si pertenece a un ciclo, en caso contrario, decimos que es acíclica.

Proposición 1.3.3. *Sea G una gráfica conexa de orden $n \geq 3$, $a \in A(G)$ es puente si y sólo si a es acíclica.*

Demostración. Sea G una gráfica conexa de orden $n \geq 3$. La demostración la haremos por contrapuesta, es decir, $a \in A(G)$ no es puente si y sólo si a es cíclica.

Sea $a = vu \in A(G)$ con $v, u \in V(G)$, como a no es puente, entonces $G - a$ es conexa, por lo que existe una $uv - trayectoria$ $T = (u = u_1, u_2, ..., u_k = v)$, con $1 \leq k \leq n$, en $G - a$, como $G - a \leq G$, tenemos que T también es una uv-trayectoria en G, por lo tanto $\Gamma = T + a$ es un ciclo en G.

Ahora, supongamos que $a = vu$ es una arista en un ciclo $\Gamma \subseteq G$ en el cual podemos etiquetar los vértices de la siguiente manera: $\Gamma = (u_1 = u, u_2, ..., u_k = v, u)$, con $1 \leq k \leq n$, entonces $\Gamma - a = (u_1 = u, u_2, ..., u_k = v)$ es una $uv - trayectoria$ T' en $G - a$. Sean $x, y \in V(G - a)$, sabemos que existe una $xy - trayectoria$ T en G, entonces tenemos dos casos.

Caso 1. Si $a \notin A(T)$, entonces T sigue siendo una $xy - trayectoria$ en $G - a$.

Caso 2. Si $a \in A(T)$, entonces haciendo la siguiente concatenación $xTuT'vTy = \mathscr{C}$, obtenemos a $\mathscr{C}$ un $xy - camino$ en $G - a$.

Por lo que $G - a$ es conexa, por lo tanto a no es puente. □

El siguiente resultado de conexidad en gráficas relaciona a su tamaño con su orden.

Teorema 1.3.4. *Toda gráfica conexa de orden $n \geq 2$ y tamaño m cumple que $m \geq n - 1$.*

Demostración. Sea G una gráfica conexa de orden $n \geq 2$ y tamaño m, procederemos por inducción sobre el orden n. Sea $n = 2$, entonces la única gráfica conexa de orden dos es K_2, en donde se puede ver que $m = n - 1 = 2 - 1 = 1$, por lo que se satisface el enunciado. Para $n = 3$, en este caso tenemos dos posibilidades, $G = P_3$ o $G = K_3$ y en cualquier caso $m_G \geq 2 = 3 - 1$.

Ahora, supongamos que toda gráfica conexa de orden $3 \leq l < n$ tiene al menos $l - 1$ aristas. Por demostrar que se cumple para una de orden n.

Sean G una gráfica conexa de orden n y $v \in V(G)$, hacemos $G - v$, de donde se tiene que $1 \leq c(G - v) = k \leq d(v)$. Sean $H_1, H_2, ..., H_k$ las componentes conexas de $G - v$ y $n_i < n$ el orden de H_i, para toda $i \in \{1, 2, ...k\}$, así el tamaño de H_i es m_i, por hipótesis de inducción $n_i - 1 \leq m_i$, entonces:

$$\sum_{i=1}^{k} m_i \geq \sum_{i=1}^{k} (n_i - 1) = \sum_{i=1}^{k} n_i - k$$

sabiendo que $d(v) \geq k \geq 1$ y que $m > \sum_{i=1}^{k} m_i$ tenemos que:

$$m = \sum_{i=1}^{k} m_i + d(v) \geq \sum_{i=1}^{k} n_i - k + k$$

por último $m \geq \sum_{i=1}^{k} n_i$. Ya que v es un vértice menos, se cumple que $\sum_{i=1}^{k} n_i = n - 1$, con lo que concluimos que $m \geq n - 1$.

La conclusión en está demostración es clara, ya que se cumple para cada orden n y tamaño m, por la inducción para $n \geq 2$. $\square$

Notemos que la condición del teorema anterior no es suficiente para que una gráfica sea conexa. Esto se ve en la figura 1.41.

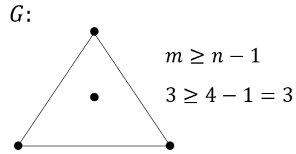


Figura 1.41: Ejemplo de una gráfica que no es árbol de orden 4 y tamaño 3

Podemos ver que en una gráfica conexa G, pueden existir diferentes trayectorias entre dos vértices $u, v \in V(G)$. Con esto podemos dar paso a otra definición en gráficas. La ***distancia entre dos vértices*** u, v de G es: $d(u,v) = \text{mín}\{l(T)\colon T \; es \; una \; uv-trayectoria\}$, por último si $u, v \in V(G)$ y están en diferentes componentes conexas, entonces definimos $d(u,v) = \infty$. A cada uv-trayectoria de longitud mínima entre dos vértices la llamaremos ***geodésica*** o ***uv-geodésica***.

Recordemos que una métrica en un conjunto A es una es una función $|A| : A \times A \longrightarrow [0, \infty)$, tal que si $u, v \in A$ y $|A|(u,v) = k$, entonces se cumple lo siguiente:

1. $|A|(u,v) \geq 0$, en donde $|A|(u,v) = 0$ si y sólo si $u = v$.
2. $|A|(u,v) = |A|(v,u)$.
3. Dado $w \in A$ se tiene que $|A|(u,v) \leq |A|(v,w) + |A|(w,u)$.

Teorema 1.3.5. *Dada una gráfica conexa G, la distancia en ella es una métrica.*

Demostración. Sea G una gráfica conexa de orden n, para todo $u, v \in V(G)$, la distancia entre u y v definida por: $d(u,v) = l(T)$, con T una uv-geodésica.

i) Primero demostraremos que si $u, v \in V(G)$, entonces $d(u,v) \geq 0$ y que $d(u,v) = 0$ si y sólo si $u = v$, en este caso basta con la definición, sabemos que, para cada $u, v \in V(G)$ existe una uv-geodésica en G por ser conexa y su longitud está siempre definida por un natural, así $d(u,v) \geq 0$. También por la misma definición sabemos que la única trayectoria de longitud cero es la sucesión de un sólo vértice, por lo que se cumple que $d(u,v) = 0$ si y sólo si $u = v$.

ii) Ahora, sea T una uv-geodésica, entonces existe T^{-1}, sabemos que $mín\{d(u,v)\} = l(T) = l(T^{-1})$, ya que pasan por los mismos vértices, así, T^{-1} es una vu-geodésica, por lo que concluimos que $d(u,v) = d(v,u)$.

iii) Por último tenemos que demostrar la desigualdad del triángulo, es decir, $d(u,v) \leq d(u,w) + d(w,v)$ para todo $w \in V(G)$. Sea T_1 una uw-geodésica y T_2 una wv-geodésica, entonces haciendo la concatenación tenemos a $\mathscr{C} = uT_1wT_2v$, que es un uv-camino que contiene una uv-trayectoria T tal que $d(u,v) \leq l(T) \leq l(\mathscr{C}) = l(T_1) + l(T_2) = d(u,w) + d(w,v)$.

Por lo tanto la distancia es una métrica. $\square$

Al demostrar algunas propiedades de las gráficas conexas y tener claras las diferencias entre las gráficas conexas y no conexas, podemos demostrar ya, otros resultados.

Proposición 1.3.4. *Sea G una gráfica conexa no trivial de orden n, G es bipartita, si y sólo si G no contiene ciclos de longitud impar.*

Demostración. Sea G una gráfica conexa no trivial. Supongamos que G es bipartita, por lo que existen U, W subconjuntos de los vértices de G, con $\{U,W\}$ una partición de $V(G)$ tal que $uw \in A(G)$ si y sólo si $u \in U$ y $w \in W$.

Supongamos que existe un ciclo $\Gamma_{2k+1} = (u_1, u_2, ..., u_{2k}, u_{2k+1}, u_1)$, con $2k+1 \leq n$, contenido en G, supongamos sin pérdida de generalidad que $U = \{u_i \colon i = 1, 3, ..., 2k-1\}$ y $W = \{u_i \colon i = 2, 4, ..., 2k\}$, ya que para $u_i u_{i+1} \in A(\Gamma)$ si i es impar, entonces por la definición de gráfica bipartita $u_i \in U$ y $u_{i+1} \in W$, de donde tenemos que $\{u_{2k}u_{2k+1}, u_{2k+1}u_1\} \subset A(\Gamma)$, entonces $u_{2k+1} \notin U$ y $u_{2k+1} \notin W$, por lo tanto no puede haber ciclos de longitud impar.

Por último supongamos que en G no hay ciclos de longitud impar, como G es no trivial, tenemos que $n \geq 2$.

Supongamos G es conexa. Sea $x \in V(G)$, entonces para cada $u \in V(G)$, existe $xu-trayectoria$ contenida en G. Sean $U = \{u \in V(G) \colon d(x,u) = 2k, k \in \mathbb{N}\}$ y $W = V(G) - U$. Como $d(x,x) = 0$, tenemos que $x \in U$. Sabemos que $n \geq 2$ y G es conexa, entonces existe $v \in V(G)$, tal que $xv \in A(G)$, así tenemos que $d(x,v) = 1$, entonces $v \in W$, por lo tanto $U \neq \emptyset$ y $W \neq \emptyset$.

Ahora, para cada $u \in V(G)$ con $x \neq u$ $d(x,u) > 0$, entonces $U \cup W = V(G)$. Es claro que $U \cap W = \emptyset$, ya que la paridad de la distancia es única.

Por último demostramos que si $u, v \in U$ o $u, v \in W$, entonces $uv \notin A(G)$. Supongamos que $uv \in A(G)$ y $u, v \in U$, sabemos que $x \in U$, entonces existen xu-geodésica T y vx-geodésica T' ambas de longitud par, haciendo la concatenación tenemos el camino cerrado $\mathscr{C} = xTuvT'x$ de longitud impar que contiene un ciclo de longitud impar, por teorema 1.1.4, lo cual es una contradicción. El caso en el que $u, v \in W$ es análogo, ya que la suma de impares es par, así $l(xTuvT'x) = 2k+1$. Por lo tanto si $uv \in A(G)$, entonces $u \in U$ y $w \in W$. Con lo anterior se concluye que G es bipartita. $\square$

1.3.2. Árboles

En el desarrollo del estudio de las gráficas conexas podemos encontrar una gran variedad de este tipo de gráficas, ahora trataremos de un caso particular, que se estudia de manera regular. Una gráfica G es llamada ***árbol***, si es conexa y no tiene ciclos. Un ***bosque*** es una gráfica sin ciclos.

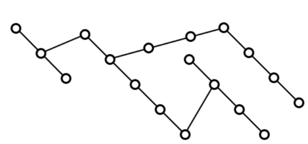


Figura 1.42: Ejemplo de un árbol

En la figura 1.42, se muestra un árbol.

Existen muchos tipos de árboles como las trayectorias, la gráfica trivial y las ***estrellas*** de orden $k+1$, que son gráficas bipartitas completas $K_{1,k}$, con $k \in \mathbb{N}$. Observemos que para toda gráfica G conexa de orden n, existe un subgráfica generadora que es un árbol.

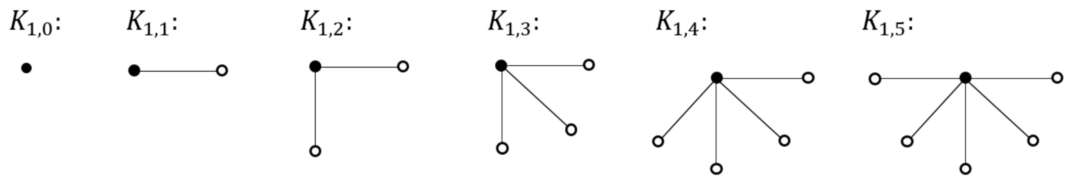


Figura 1.43: Algunas estrellas

La figura 1.43, muestra diferentes tipos de estrellas de orden $k+1$. La unión de estás estrellas (árboles), $G = k_{1,0} \cup k_{1,1} \cup k_{1,2} \cup k_{1,3} \cup k_{1,4} \cup k_{1,5}$ es un bosque, es decir, la figura 1.43 tomada como una sola gráfica es un bosque.

Una observación inmediata que podemos hacer respecto de los árboles es la siguiente:

Corolario 1.3.1. *(de la proposición 1.3.3) Toda gráfica G que es un árbol es una gráfica bipartita.*

Demostración. Una gráfica conexa es bipartita si y sólo si no contiene ciclos de longitud impar, los árboles no contienen ciclos. Por lo tanto son gráficas bipartitas. □

Teorema 1.3.6. *Una gráfica G es un árbol si y sólo si para todo $u, v \in V(G)$, existe una única uv-trayectoria.*

Demostración. Supongamos que G es un árbol, entonces para cada $u, v \in V(G)$, existe una uv-trayectoria, por lo que basta demostrar que la trayectoria es única.

Supongamos que existen T y T' dos uv-trayectoria distintas, entonces por la proposición 1.1.1 existe un ciclo en G, lo cual es una contradicción. Por lo tanto la trayectoria es única.

Ahora supongamos que para cada par de vértices $u, v \in V(G)$ existe una única trayectoria, por lo que G es conexa, queda por demostrar que no tiene ciclos.

Supongamos que existe un ciclo Γ en G. Sean $u, v \in V(\Gamma)$, entonces existen T, T' uv-trayectorias internamente ajenas entre u y v, lo que contradice la hipótesis. Por lo tanto G es un árbol. □

Con el teorema anterior y debido a la caracterización de vértices de corte, podemos argumentar de manera directa que para todo árbol G y $v \in V(G)$ tal que $d(v) \geq 2$, entonces v es un vértice de corte.

Teorema 1.3.7. *Si G es un árbol de orden $n \geq 2$, entonces existen $u, v \in V(G)$ tales que $d(u) = d(v) = 1$.*

Demostración. Sea $T = (u = v_0, v_1, ..., v_k = v)$, con $2 \leq k \leq n$, una trayectoria de longitud máxima en G un árbol, entonces afirmamos que $d(u) = d(v) = 1$, ya que son hojas de G. Sabemos que G es conexa, entonces $d(w) \geq 1$, para todo $w \in V(G)$.

Supongamos sin pérdida de generalidad que $d(v) \neq 1$, por lo que $d(u) > 1$, así, existe un $x \in V(G)$ tal que $xu \in A(G)$ y $x \neq v_1$, entonces x no está en T o x está en T. Si no está en T, tenemos que $T + xu$ es una trayectoria de longitud $l(T) + 1 = k + 1$, lo que es una contradicción ya que T es de longitud máxima. Ahora, si x está en T, entonces tenemos que $\Gamma = (u = v_0, v_1, ..., v_i = x, u)$ es un ciclo, lo que genera una contradicción a la hipótesis, por lo que $d(u) = 1$, procediendo de manera análoga podemos concluir que $d(v) = 1$, con lo que queda demostrado el teorema.

□

Teorema 1.3.8. *Si G es un árbol, con orden $n \geq 2$ y $u \in V(G)$ es terminal, entonces $G - u$ es un árbol.*

Demostración. Sean G un árbol, con $n \geq 2$, y $u \in V(G)$ un vértice terminal, tenemos que demostrar que $G - u$ es conexa y sin ciclos, sabemos G no tiene ciclos y como $G - u$ es una subgráfica inducida de G, entonces $G - u$ no tiene ciclos, ahora veamos que para todo $x, y \in V(G - u)$ existe una $xy - trayectoria$ en $G - u$. Sabemos que G es conexa y que $x, y \in V(G)$, entonces existe una única $xy - trayectoria$ $T = (x = v_1, v_2, ..., v_k = y)$ en G. Tenemos que $x \neq u$ y $y \neq u$, pues $x, y \in V(G - u)$ y si $u \in V(T)$, entonces $u = w$, para algún $w \in V(T) - \{x, y\}$, por lo que $d(u) = 2$, lo que genera una contradicción ya que $d(u) = 1$. Por lo tanto existe una $xy - tryectoria$ en $G - u$. Así, $G - u$ es árbol.

□

Corolario 1.3.2. *Si G es un árbol, con orden $n \geq 3$ y $B = \{u \in V(G) : d(u) = 1\}$, entonces $G - B$ es un árbol.*

Demostración. Sea G un árbol, con $n \geq 3$, haremos la demostración por inducción sobre n. Así para $n = 3$ tenemos que $G = P_3$ y $P_3 - B$ es la gráfica trivial que es un árbol.

Supongamos que el enunciado se cumple para toda gráfica de orden $n - 1$.

Sean G una gráfica de orden $4 \leq n$ y $B = \{u \in V(G) : d(u) = 1\}$. Si $w \in B$, entonces $G - w$ es árbol por el teorema anterior, notemos que $|N_G(w)| = 1$, sea z el único vecino de w en G, entonces $d_G(z) \geq 2$, por lo que tenemos dos casos:

Caso 1. Si $d_G(z) = 2$, entonces $d_{G-w}(z) = 1$. Así, si $B' = (B - \{w\}) \cup \{z\}$, sabemos que $(G - w) - B'$ es un árbol por hipótesis de inducción, por lo tanto $G - B = G - ((B' - \{z\}) \cup \{w\})$ también es un árbol.

Caso 2. Si $d_G(z) > 2$, entonces $d_{G-w}(z) \geq 2$. Por lo que $B' = B - \{w\} = \{v \in V(G - w) \colon d_{G-w}(v) = 1\}$, por hipótesis de inducción sabemos que $(G - w) - B'$ es un árbol, de donde tenemos que $G - (B' \cup \{w\}) = G - B$ también es un árbol.

□

Para dar una caracterización de árboles, enunciamos el siguiente teorema.

Teorema 1.3.9. *Si G es una gráfica de orden n y tamaño m. Los siguientes enunciados son equivalentes.*

a) *G es acíclica y conexa (árbol).*

b) *G es acíclica y $m = n - 1$.*

c) *G es conexa y $m = n - 1$.*

Demostración. Sea G una gráfica de orden n y tamaño m. Demostraremos por inducción sobre n que $a) \to b) \to c) \to a)$. Entonces en los tres casos usaremos la misma base.

Si $n = 1$ tenemos a la gráfica trivial que es conexa, $m = 0$ y es acíclica. Si $n = 2$, entonces $G = K_2$ que cumple ser conexa, acíclica y $m = n - 1$. Por lo tanto la base cumple el teorema.

$a) \to b)$ Sea G un árbol, entonces G es acíclica. Sólo tenemos que demostrar que el tamaño de G es $m = n - 1$.

Supongamos que para todo H árbol de orden $2 \leq n - 1$ se cumple que $m_H = n - 2$. Sea G un árbol con orden $2 \leq n$ y tamaño m_G, entonces sabemos que existe $u \in V(G)$ tal que $d(u) = 1$ y que $G - u$ es un árbol con orden $n - 1$, por lo que cumple la hipótesis inductiva, entonces $m_G = |A(G)| = |A(G - u)| + d(u) = (n - 2) + 1 = n - 1$.

$b) \to c)$ Sea G de orden $2 \leq n$ acíclica y tamaño $m = n - 1$. Sólo tenemos que demostrar que G es conexa.

Supongamos que toda gráfica H acíclica de orden $2 \leq n - 1$ y tamaño $m_H = n - 2$ es conexa. Sea G una gráfica acíclica de orden $2 \leq n$ y tamaño $m_G = n - 1$. Como G es acíclica, entonces existe $v \in V(G)$ tal que $d(v) = 1$, por el teorema 1.3.7, entonces el orden de $G - v$ es $n - 1$ y $G - v$ es acíclica. Además como v es terminal, tenemos que $m_{G-v} = (n - 1) - 1 = n - 2$. Así, por hipótesis de inducción $G - v$ es conexa. Por lo tanto G es conexa.

$c) \to a)$ Sea G de orden $2 \leq n$ conexa y tamaño $m = n - 1$, sólo tenemos que demostrar que G es acíclica.

Supongamos que para toda H conexa con orden $2 \leq n - 1$ y tamaño $m_H = n - 2$ se cumple el enunciado. Sea G con orden $2 \leq n$ y tamaño $m = n - 1$ conexa. Como G es conexa con orden $3 \leq n$, entonces existe $u \in V(G)$ tal que $G - u$ es conexa, pot el teorema 1.3.3. Afirmamos que $d(u) = 1$, pues de lo contrario, si $d(u) \geq 2$, entonces $m_{G-u} = n - 1 - d(u) < n - 2$ lo que es una contradicción, ya que $G - u$ es conexa de orden $n - 1$ y por teorema 1.3.4, sabemos que $m_{G-u} \geq n - 2$. Entonces $d(u) = 1$, por lo que $n_{G-u} = n - 1$ y $m_{G-u} = n - 2$. Así $G - u$ cumple la hipótesis de inducción y $G - u$ es acíclica. Por lo tanto G es acíclica, ya que $d(u) = 1$.

□

Un *árbol generador* A de una gráfica G conexa, es una subgráfica generadora de G que es árbol, así, *un bosque generador* es la colección de árboles generadores para cada componente conexa de una gráfica no conexa.

Teorema 1.3.10. *Toda gráfica G conexa contiene a un árbol generador.*

Demostración. Sea G una gráfica conexa, realizaremos la demostración por inducción sobre k el número de ciclos, con $0 \leq k$. Si G es conexa y $k = 0$, no contiene ciclos, entonces G es un árbol.

Ahora, si $k = 1$ G contiene un único ciclo Γ. Consideremos $a \in A(\Gamma)$, por la caracterización de puentes, $G - a$ es conexa, además Γ es el único ciclo en G. Así, $G - a$ es acíclica y por lo tanto un árbol generador de G.

Supongamos que para toda gráfica G conexa, tal que G contiene k ciclos, con $1 \leq k < l$, entonces G tiene un árbol generador.

Sean G una gráfica conexa tal que contiene l ciclos y $a \in A(\Gamma)$, con Γ un ciclo en G, entonces $G - a$ sigue siendo conexa y además contiene r ciclos, tal que $r < l$, por lo que cumple la hipótesis de inducción. Así, $G - a$ tiene un árbol generador T y $V(T) = V(G - a) = V(G)$. Por lo tanto, T es un árbol generador de G. $\square$

1.3.3. Resultados inmediatos para bosques

Podemos ver que muchas de las propiedades de árboles se pueden debilitar, lo que las hace válidas en bosques ya que siguen siendo gráficas acíclicas, por ejemplo si G es un bosque con orden n, con $c(G)$ componentes conexas, entonces cada componente conexa es un árbol, por lo que cada uno de ellos tiene tamaño $m_i = n_i - 1$, para toda $i \in \{1, 2, ..., c(G)\}$, así podemos concluir que $m = \sum_{i=1}^{c(G)} m_i = \sum_{i=1}^{c(G)} (n_i - 1) = n - c(G)$. Otra observación es que si G es un bosque, todo $v \in V(G)$, tal que $d(v) \geq 2$ es de corte y toda arista en G es puente. La tercera es que si G es una gráfica con $c(G)$ componentes conexas, entonces G tiene un bosque generador, con $c(G)$ componentes conexas. Por último, para u y v vértices en la misma componente conexa de G, existe una única $uv - trayectoria$.

Capítulo 2

k-conexidad, apareamientos y conjuntos independientes

Este capítulo es muy importante en el desarrollo de nuestro trabajo, en él, daremos los elementos de la Teoría de Gráficas que son importantes para la explicación del tema central de esta tesis.

2.1. k-conexidad

Podemos ver que una gráfica G puede o no tener ***vértices de corte***, también que hay gráficas conexas que pueden ser desconectadas al quitar un subconjunto de vértices e incluso que en una gráfica completa K_n, al quitar cualquier subconjunto propio de vértices de cardinalidad r siempre obtenemos la gráfica completa K_{n-r}. Dada una gráfica G no completa y $S \subsetneq V(G)$, si tenemos que $c(G-S) > c(G)$, decimos que S es un ***conjunto de corte***. A un conjunto de corte de cardinalidad mínima en esta gráfica G lo llamaremos ***conjunto de corte mínimo*** de G, y a la cardinalidad de dicho conjunto le llamaremos la ***conexidad puntual*** de G y la denotamos por $\kappa(G)$.

En el caso en el que G es no conexa, $S = \emptyset$ es el conjunto de corte mínimo de G.

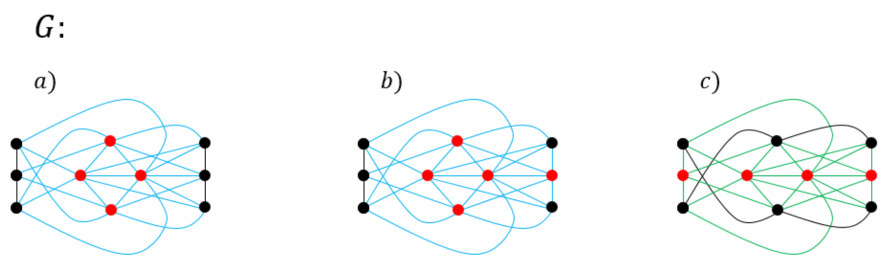


Figura 2.1: Conjuntos de vértices de corte en rojo

Observemos que en la figura 2.1, tenemos tres ejemplos de conjuntos de vértices de corte distintos (conjuntos de vértices rojos), para la misma gráfica. Los conjuntos de corte a) y en c) son mínimos a diferencia del conjunto en b). Así $\kappa(G) = 4$.

De la misma manera, podemos definir ***conjuntos de corte por aristas***. Sea $R \subseteq A(G)$, si $c(G-R) > c(G)$, decimos que R es de corte por aristas, análogamente existe un ***conjunto de***

corte por aristas mínimo, a la cardinalidad de un conjunto mínimo de corte por aristas le llamamos la ***conexidad lineal*** de G y la denotamos por $\lambda(G)$.

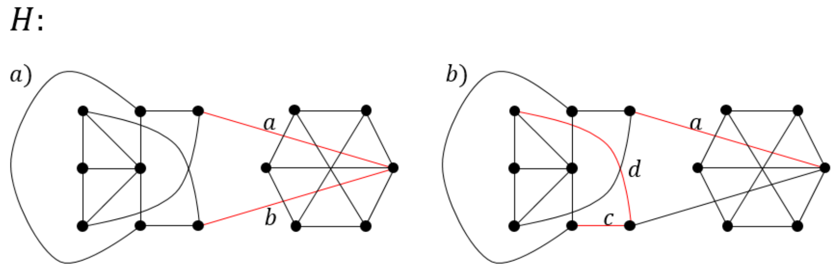


Figura 2.2: Conjuntos de corte por aristas

Podemos observar en la figura 2.2 que si $R = \{a, b\}$, entonces $G - R$ es una gráfica no conexa y lo mismo ocurre si tomamos $R' = \{a, c, d\}$, en este caso sólo R es conjunto de aristas de corte mínimo, pues H no tiene puentes, así $\lambda(G) = 2$. En lo general, el conjunto de aristas de corte mínimo no necesariamente es único.

Corolario 2.1.1 (de la proposición 1.3.1)**.** *Si G es una gráfica, con $c(G) = k$ y S un conjunto de corte por aristas mínimo, entonces $c(G - S) = k + 1$.*

Demostración. Sean G una gráfica, con $c(G) = k$, S un conjunto de corte por aristas mínimo en G y $R = S - \{xy\}$, con $xy \in S$. Notemos que $c(G - R) = c(G) = k$ y que xy es un puente en $G - R$, por lo que $(G - R) - xy$ es no conexa, de donde tenemos que $c(G - S) = c((G - R) - xy) = k + 1$, por la proposición 1.3.1. □

Las gráficas completas K_n son un caso extremo de conexidad, ya que no hay subconjuntos propios de vértices que desconecten a K_n, de hecho podemos quitar $n-1$ vértices y se obtiene K_1, por lo que ***definimos*** la conexidad puntual de K_n como $\kappa(K_n) = n - 1$.

Notemos que para $\{W_1, W_2\}$ partición de $v(G)$, con $|W_1| = k$ y $|W_2| = n - k$, existen $k(n-k)$ aristas entre W_1 y W_2.

Por otro lado, para toda gráfica conexa G, $v \in V(G)$, tal que $|N_G(v)| = d_G(v) = \delta(G)$, se tiene que, si S es el conjunto de todas las aristas en G que inciden en v, entonces $\{v\}$ es una componente conexa de $G - S$, así $\lambda(G) \leq \delta(G)$, de donde podemos afirmar que $\lambda(G) \leq n - 1$.

De los dos párrafos anteriores y sabiendo que, $\delta(K_n) = d_{K_n}(v)$, para cada $v \in K_n$ y como $n - 1 \leq k(n-k)$, con $1 \leq k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$, tenemos que $\lambda(K_n) = n - 1 \leq k(n - k)$.

Una gráfica G que no es conexa cumple $\kappa(G) = 0 = \lambda(G)$, de donde tenemos que:

$$0 \leq \kappa(G) \leq n - 1 \ \ y \ \ 0 \leq \lambda(G) \leq n - 1.$$

En la gráfica H de la figura 2.2, podemos notar que para todo $v \in V(H)$, $d(v) \geq 3 = \delta(G)$, que $\kappa(H) = 1$ y $\lambda(H) = 2$. ¿Podemos asegurar que esto se cumple para toda gráfica? Es decir, que en cualquier gráfica G se cumple que:

$$0 \leq \kappa(G) \leq \lambda(G) \leq \delta(G) \leq n - 1 \text{ se cumple para toda gráfica } G.$$

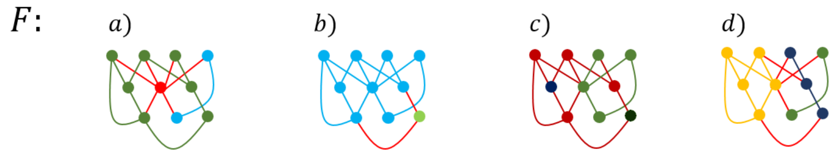


Figura 2.3: Ejemplos de diferentes conjuntos de corte en rojo

En la figura 2.3, podemos observar conjuntos de corte coloreados de rojo, al retirar los elementos de esos conjuntos, nos quedan las componentes conexas cada una de ellas coloreada de un color distinto. En los incisos *a*) y *c*) los conjuntos de corte son por vértices y en los incisos *b*) y *d*) los conjuntos de cortes son de aristas. Vemos que $\kappa(F) = 1 \leq \lambda(F) = 2 \leq \delta(G) = 2$. En una gráfica G conexa con un conjunto de corte mínimo por aristas R, es fácil ver que $c(G - R) = 2$ siempre, ya que al quitar las aristas de R excepto una, digamos a, tenemos que $G - (R - \{a\})$ sigue siendo conexa con a un puente, así, al quitar la arista a se tienen exactamente dos componentes conexas. Por lo tanto $c(G - R) = 2$.

Teorema 2.1.1. *En toda gráfica G de orden n:*

$$0 \leq \kappa(G) \leq \lambda(G) \leq \delta(G) \leq n - 1 \text{ se cumple para toda gráfica } G.$$

Demostración. Sea G una gráfica de orden n y tamaño m, si G es no conexa, entonces $\kappa(G) = \lambda(G) = 0$ y si G es completa entonces $\kappa(G) = \lambda(G) = \delta(G) = n - 1$, por lo que en ambos casos el teorema es verdadero. Basta ver que para una gráfica G conexa no completa se cumple el teorema.

Sea G una gráfica conexa no completa de orden n, entonces $1 \leq \delta(G) \leq n - 2$. Sea $v \in V(G)$, tal que $d(v) = \delta(G)$ y $R = \{vu \in A(G) : u \in V(G)\}$, entonces $d_{G-R}(v) = 0$, por lo que $G - R$ es no conexa y R es un conjunto de corte, con cardinalidad el grado de v en G. Por lo tanto $\lambda(G) \leq \delta(G)$.

Demostraremos ahora que $\kappa(G) \leq \lambda(G)$. Sea G una gráfica conexa no completa, esto implica que $n \geq 3$, entonces existen $x, y \in V(G)$ tales que $xy \notin A(G)$, de donde tenemos dos casos:

Caso 1) Si $\lambda(G) = \delta(G)$. Sea $v \in V(G)$, tal que $d_G(v) = \delta(G)$, como G es no completa, existe $u \notin N_G(v)$ y $u \in V(G)$, con $u \neq v$. Así, tenemos que $N_G(v)$ es un conjunto de corte, lo que implica que $\kappa(G) \leq |N_G(v)| = \delta(G) = \lambda(G)$.

Caso 2) Si $\lambda(G) < \delta(G)$. Sean $R \subsetneq A(G)$ un conjunto de corte mínimo por aristas en G y G_1, G_2 las componentes conexas de $G - R$. Sean $v \in V(G_1)$, con v el extremo de una arista en R y $S' = V(G_2) \cap N_G(v)$. Es claro que para todo $w \in S'$, $vw \in R$, de lo contrario $G - R$ sería conexa, lo que contradice la hipótesis. Por lo que $|S'| \leq |R| = \lambda(G) < \delta(G)$.

Si $|S'| = |R| < \delta(G)$, entonces existe $z \in V(G_1) \cap N_G(v)$ y todas las aristas en R tienen como único extremo de $V(G_1)$ a v, por lo que $G - v$ es no conexa con $1 = \kappa(G) \leq |S'| = |R| < \lambda(G)$.

Ahora, si $|S'| < |R| < \delta(G)$. Sean S'' el conjunto de todos los extremos de las aristas de R en $V(G_1) - N_G(S')$ y $S = S' \cup S''$. Por la construcción tenemos que $S' \cap S'' = \emptyset$, además para cada $xz = a \in R$, tenemos que si $x \in S'$, entonces $y \notin S''$ y si $y \in S''$, entonces $x \notin S'$.

Supongamos que $|S| = |S'| + |S''| \geq |R|$, entonces existe $xz = a \in R$ tal que $x \in S'$ y $z \in S''$, lo cual es una contradicción. Por lo que $|S'| < |R|$, y $G - S$ es claramente no conexa, de donde tenemos que $\kappa(G) \leq |S| < |R| < \lambda(G)$.

Por lo tanto el enunciado se cumple. $\square$

Diremos que una gráfica G es $k-conexa$ si $\kappa(G) \geq k$, para $0 \leq k \leq \kappa(G)$. Así, toda gráfica G no conexa es exactamente $0-conexa$, es decir, no es $k-conexa$ para todo entero $k \geq 1$. Las gráficas K_n completas son $k-conexas$, para toda $0 \leq k \leq n-1$ y para nuestra F de la $figura$ 45, tenemos que es desde $0-conexa$, hasta $4-conexa$.

Proposición 2.1.1. *Sea G una gráfica k-conexa, entonces $G + K_1$ es $(k+1)$-conexa.*

Demostración. Sean G una gráfica $k-conexa$ y $G' = G + K_1$. El caso en el que $G = K_n$ es trivial ya que $G + K_1 = K_{n+1}$ y claramente se cumple el enunciado. Supongamos que G es no completa y la gráfica G' no es $(k+1)$-conexa, entonces G' es $k-conexa$, con $1 \leq k \leq \kappa(G')$, entonces existe S un conjunto de corte mínimo por vértices en $G + K_1$, tal que $|S| = \kappa(G')$, lo que implica que $G' - S$ es no conexa, de donde tenemos que:

Sean $u \in V(K_1)$, suponiendo que $u \notin S$, y G_i, G_j dos componentes conexas de $G' - S$. Supongamos sin pérdida de generalidad que $u \in V(G_i)$, por la definición de G', $uw \in A(G')$, para todo $w \in V(G_j)$, y como $u \in V(G_i)$, entonces $uv \in A(G_i)$ para todo $v \in V(G_i)$, por lo que existe una $vw-trayectoria$ en G', lo cual es una contradicción, ya que $V(G_j) \neq \emptyset$.

Lo anterior implica que $u \in S$. Como $uv \in A(G)$, para todo $v \in V(G)$, tenemos que $G - (S - \{u\})$ es no conexa, por lo que $S - \{u\}$ es un conjunto de corte mínimo en G y $|S - \{u\}| = k - 1$ lo cual contradice que G es $k-conexa$.

Por lo tanto G' es $(k+1)-conexa$.

$\square$

Proposición 2.1.2. *Sea G una gráfica no completa con $\kappa(G) = k \geq 1$. Demuestra que para todo conjunto de corte mínimo $S \subset V(G)$, cada v en S es adyacente a al menos un vértice en cada componente conexa de $G - S$.*

Demostración. Sean G una gráfica y $S = \{u_i : i \in \{1, 2, ..., \kappa(G)\}\}$ un conjunto de corte mínimo por vértices de G. Consideremos un vértice $w \in S$ y sea $S' = S - \{w\}$, como S es de corte mínimo, tenemos que $G - S'$ es conexa y w es un vértice de corte en $G - S'$, entonces $G - S$ y $(G - S') - w$ tienen exactamente las mismas componentes conexas $G_1, G_2, ..., G_r$, para alguna $r \in \mathbb{N}$, esto implica que para cada G_l existe una arista $wu_l \in A(G)$, tal que $u_l \in V(G_l)$, con $1 \leq l \leq r$, esto pasa para cualquier vértice en S. Por lo tanto se cumple el enunciado. $\square$

2.1.1. Teorema de Menger

Ahora veamos que para cualesquiera dos vértices u y v no adyacentes en una gráfica G podemos encontrar un conjunto S de vértices con el cual podemos separarlos. Además, en $G - S$, los vértices u y v estén en diferentes componentes conexas.

En la figura 2.4, se puede ver que para separar al vértice azul del vértice rojo tenemos al menos dos posibilidades, borrar el conjunto de vértices verdes o el conjunto de vértices amarillos. Por lo que un conjunto separador no es único, también se observa que la intersección puede ser vacía o no. Un conjunto de vértices de G que al ser borrado, deja en diferentes componentes conexas a dos vértices no adyacentes u y v en una gráfica G, es llamado ***conjunto separador*** de u y v y lo denotamos por uv-conjunto separador. Pondremos particular interés en los

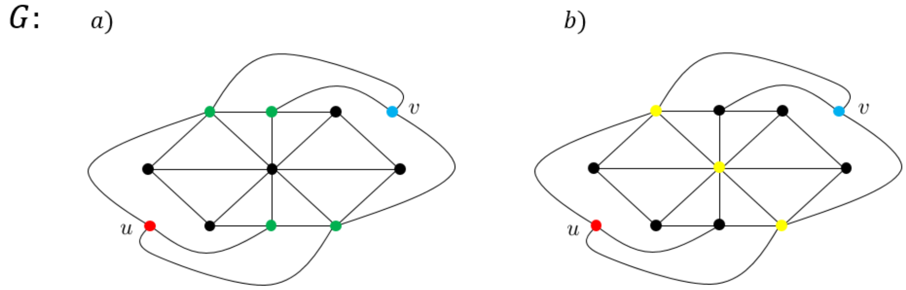


Figura 2.4: Conjuntos separadores

conjuntos uv-separadores de cardinalidad mínima.

Teorema 2.1.2 (Teorema de Menger)**.** *Sean G y $u, v \in V(G)$, tales que $uv \notin A(G)$, la cardinalidad de un conjunto separador mínimo entre u y v es igual al máximo número de trayectorias internamente ajenas entre u y v.*

Demostración. Sean G una gráfica y $u, v \in V(G)$ no adyacentes. Para una gráfica G no conexa entre cualesquiera dos vértices en diferentes componentes conexas la demostración es trivial. Por lo que basta demostrar que se cumple el teorema para toda gráfica G conexa, notemos que $uv \notin A(G)$, lo que implica que G no es completa. Por lo que haremos la demostración por inducción sobre m_G, el tamaño de G. Si $m_G = 2$ es claro que $G = P_3$, en este caso el enunciado se satisface.

Supongamos que para toda gráfica conexa G' de tamaño $2 \leq m' < m_G$ el teorema es cierto.

Sean G una gráfica de tamaño $2 \leq m_G \leq \dfrac{n(n-1)}{2} - 1$ y S un uv-conjunto separador mínimo, tal que $|S| = k$, de aquí tenemos 3 casos:

Caso 1. Si existe $w \in S$, tal que $w \in N_G(u) \cap N_G(v)$, entonces $S - \{w\}$ es un uv-conjunto separador mínimo en $G - w$, con $|S - \{w\}| = k - 1$ y claramente $m_{G-w} < m_G$, por lo que cumple la hipótesis de inducción; así, existen $k - 1$ $uv-$*trayectorias* internamente ajenas en $G - w$ y como $T = (u, w, v)$ es una trayectoria en G que no está en $G - w$, tenemos que existen k uv-trayectorias internamente ajenas en G.

Caso 2. Todo uv-conjunto separador mínimo S cumple que para todo $w \in S$, w es adyacente a u y no es adyacente a v, o bien todo $w \in S$ es adyacente a v y no a u. Esto implica que $d(u, v) \geq 3$.

Sean $T = (u = w_1, w_2, w_3, ..., w_r = v)$ una uv-geodésica en G y $e = w_2w_3$. Consideremos $G - e$, en $G - e$ todo uv-conjunto separador mínimo tiene al menos $k - 1$ vértices, ya que w_2 o w_3 pueden ser elementos de un conjunto separador mínimo y G es k conexa.

Afirmamos que todo $uv-$*conjunto separador* mínimo en $G - e$ tiene k vértices. Supongamos lo contrario. Sea $Z = \{z_1, z_2, ..., z_{k-1}\}$ un $uv-$*conjunto separador* mínimo en $G - e$. Consideremos $Z \cup \{w_2\}$, como $Z \cup \{w_2\}$ es un conjunto uv-separador en G y tiene cardinalidad k, entonces $Z \cup \{w_2\}$ es mínimo y dado que $uw_2 \in A(G)$, entonces $uz_i \in A(G)$, para cada $i = 1, 2, ..., k - 1$.

Por otro lado, tenemos que $Z \cup \{w_3\}$ también es un uv-conjunto separador mínimo en G, por lo que $z_iv \in A(G)$, para cada $i = 1, 2, ..., k - 1$. Así $T' = (u = w_1, w_3, ..., w_r = v)$ es una uv-trayectoria de longitud menor que T, lo cual es una contradicción. Por lo que todo $uv-$*conjunto separador* mínimo en $G-e$ tiene k vértices. Y por hipótesis de inducción en $G-e$ hay k $uv-$*trayectorias* internamente ajenas. Por lo tanto en G hay k $uv-$*trayectorias* internamente ajenas, ya que $G-e$ es subgráfica generadora de G.

Caso 3. Si en G existe $S=\{w_1, w_2, ..., w_k\}$ un $uv-$*conjunto separador* mínimo, tal que para todo $w \in S$, $T=(u,w,v)$ no es $uv-$*trayectoria* en G y existe al menos un vértice en S no adyacente a u y un vértice no adyacente a v.

Sea G_u la subgráfica de G que consiste de todas las uw_i-trayectorias en G, tales que w_i es el único vértice de S que está en cada una de estás trayectorias, con $i \in \{1,2,...,k\}$. Análogamente, consideramos a G_v la gráfica de todas las w_iv-trayectorias, con $1 \leq i \leq k$, en G que cumplen que w_i es el único vértice de S en dichas trayectorias.

Sea G'_u tal que $V(G'_u)=V(G_u)\cup\{v'\}$, con v' un vértice que no está en G, y $A(G'_u)=A(G_u)\cup\{v'w_i\colon 1\leq i\leq k\}$, sabemos que en S existe un vértice no adyacente a v, lo que implica que el tamaño de G es mayor que el tamaño de G'_u. Por lo que G'_u cumple la hipótesis de inducción; así, existen k $uv'-$*trayectorias* internamente ajenas.

Sea G'_v tal que $V(G'_v)=V(G_v)\cup\{u'\}$ y $A(G'_v)=A(G_v)\cup\{u'w_i : 1\leq i\leq k\}$, con un vértice u' que no está en G, sabemos que existe un $w\in S$ que no es adyacente a u, entonces el tamaño de G es mayor que el tamaño de G'_v y por hipótesis de inducción en G'_v hay k w_iv-*trayectorias* internamente ajenas.

Sean $T_1, T_2, ..., T_k$ las $uv'-$*trayectorias* internamente ajenas en G'_u que pasan por $w_1, w_2, ..., w_k$ respectivamente. Y sean $T'_1, T'_2, ..., T'_k$ las $u'v-$*trayectorias* internamente ajenas en G'_v que pasan por $w_1, w_2, ..., w_k$ respectivamente. Consideremos las trayectorias $P_i = uT_iw_iT'_iv$, entonces $P_1, P_2, ..., P_k$ son k $uv-$*trayectorias* internamente ajenas en G.

Lo anterior concluye la demostración.

□

Teorema 2.1.3 (Teorema de Whitney)**.** *Sea G una gráfica no trivial, G es $k-$conexa, para cada entero $k\geq 2$ si y sólo si para cualesquiera u, $v\in V(G)$, hay al menos k uv-trayectorias internamente ajenas entre u y v.*

Demostración. Sea G una gráfica no trivial, $k-$*conexa*, para cada $k\geq 2$. Sean $u,v\in V(G)$, entonces tenemos dos casos:

Caso 1. Sea $uv\in A(G)$. Como G es k-conexa, tenemos que $k\leq\kappa(G)\leq\lambda(G)$. Así, tenemos que $k-1\leq\kappa(G-uv)\leq\lambda(G-uv)$, como cualquier uv-conjunto separador mínimo S, en $G-uv$ cumple que $k-1\leq\kappa(G-uv)\leq|S|$ ya que G es k conexa y u o v pueden ser elementos de S. Por el teorema de Menger, tenemos que al menos existen $k-1$ uv-trayectorias internamente ajenas. Por lo tanto en G hay al menos $k-1+|\{uv\}|=k$ uv-trayectorias internamente ajenas.

Caso 2. Sea $uv\notin A(G)$. Sabemos que G es k-conexa y en este caso u no es adyacente a v, tenemos que cualquier S uv-conjunto separador mínimo en G, cumple que $k\leq|S|=\kappa(G)$, ya que $uv\notin A(G)$. Y por el teorema de Menger sabemos que en G hay al menos k uv-trayectorias internamente ajenas.

Ahora, supongamos que en G hay al menos k uv-trayectorias internamente ajenas entre cualesquiera u y v vértices. Si $G=K_n$, entonces para cada u y v en los vértices de K_n, tenemos que $uv\in A(K_n)$ que es una uv-trayectoria y que para todo $w\in V(K_n)$ diferente de u y v

existe la trayectoria $T_w = (u, w, v)$, por lo que hay $k = n-1$ trayectorias internamente ajenas, así, toda K_n es k-conexa por el Teorema de Menger.

Sean G no completa y S un uv *− conjunto separador* mínimo en G. Sean u, v dos vértices en diferentes componentes conexas de $G - S$. Entonces como en G hay k uv-trayectorias internamente ajenas entre u y v, tenemos por el teorema de Menger que $k \leq |S| = \kappa(G)$. Por lo tanto G es k-conexa. □

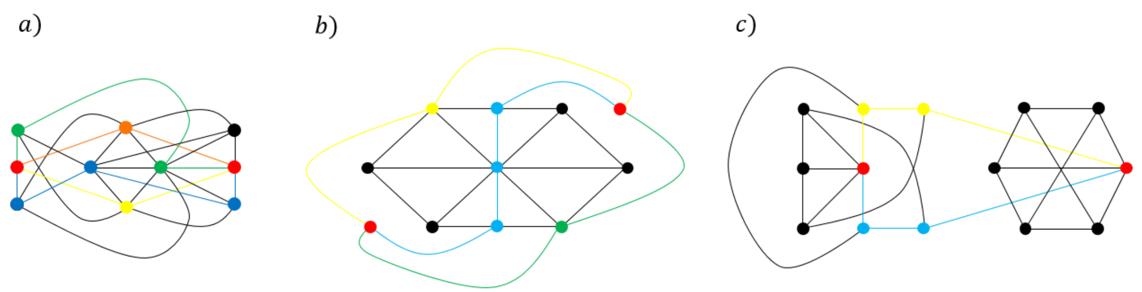


Figura 2.5: Trayectorias internamente ajenas

En la figura 2.5, observando las gráficas se pueden ver los dos vértices no adyacentes en rojo y un conjunto separador entre ellos; se colorearon las trayectorias internamente ajenas, también es claro en cada caso, que los conjuntos mínimos separadores tienen al menos la misma cardinalidad que el número de trayectorias internamente ajenas, y que en c), más fácilmente vemos que, se tiene otras trayectorias internamente ajenas dos a dos entre los vértices rojos.

Corolario 2.1.2. *Sean G una gráfica k-conexa, con $k \geq 1$ y S un subconjunto de vértices de G, tal que $|S| = k$. Si H es la gráfica tal que $V(H) = V(G) \cup \{v\}$, con v un vértice que no está en G, y $A(H) = A(G) \cup \{uv\colon u \in S\}$, entonces H es k-conexa.*

Demostración. Sea G una gráfica k-conexa. Haremos la demostración por inducción sobre k.

Para $k = 1$. Sean G una gráfica 1-conexa y $S \subset V(G)$, tal que $|S| = 1$, entonces $S = \{u\}$. Sean v un vértice que no está en G y $H = G \cup \{v\}$ y $A(H) = A(G) \cup \{uv\}$, entonces hay al menos una xy-trayectoria para todo $x, y \in V(H)$, por lo que H es 1-conexa.

Supongamos que el teorema es cierto para toda gráfica k-conexa, con $k \geq 1$.

Sean G una gráfica $k+1$-conexa y $S \subset V(G)$, con $|S| = k+1$. Definimos a H, como la gráfica, tal que dado v un vértice que no está en G, tenemos que $V(H) = V(G) \cup \{v\}$ y $A(H) = A(G) \cup \{wv\colon w \in S\}$.

Sean $x, y \in V(H)$, entonces tenemos que $v \notin \{x, y\}$ o $v \in \{x, y\}$. Si $v \notin \{x, y\}$, entonces $x, y \in V(G)$ y existen entre ellos $k+1$ xy-trayectorias internamente ajenas en H.

Ahora, supongamos sin pérdida de generalidad que $v = y$, entonces si tenemos que $x \notin S$ o $x \in S$. Así, si $x \notin S$, entonces $xv \notin A(H)$ y S es un conjunto separador mínimo de cardinalidad $k+1$ en H, entonces por el teorema de Menger, existen $k+1$ xv-trayectorias internamente ajenas en H.

Por último, supongamos que $x \in S$, lo que implica que para todo xy-conjunto separador R, $S - \{x\} \subset R$, y $k = |S - \{x\}| < |R|$, por lo que en H hay al menos k xy-trayectorias internamente ajenas que no contienen a xy, y como $xy \in A(H)$ se tienen $k+1$ trayectorias internamente ajenas en H.

Por lo tanto H es $k+1$-conexa.

□

Corolario 2.1.3. *Sea G una gráfica k-conexa, con $k \geq 2$. Si $u, v_1, v_2, ..., v_t$ son $t+1$ vértices distintos de G, donde $2 \leq t \leq k$, entonces G contiene una uv_i-trayectoria, para cada $i = 1, 2, ..., k$, tales que cualesquiera dos trayectorias sólo tienen en común al vértice u.*

Demostración. Sea G una gráfica k-conexa y $2 \leq t \leq k$, esto implica que G es t-conexa. Sean $S = \{v_1, v_2, ..., v_t\}$ vértices distintos en G. Hacemos H la gráfica tal que $V(H) = V(G) \cup \{v\}$, con v un vértice que no está en G y $A(H) = A(G) \cup \{vw \colon w \in S\}$, por el corolario 2.1.1 H es t-conexa. Notemos que como G es k-conexa, entonces tiene al menos $k+1$ vértices. Por el teorema de Whitney, como H es t-conexa, entonces si $u \in V(G) - S$, en H hay t uv-trayectorias internamente ajenas. Por lo tanto en $H - v = G$ hay t uw-trayectorias que inciden en u, una para cada $w \in S$. □

2.2. Apareamientos

En el estudio de las gráficas podemos enfocarnos en estudiar de manera independiente ciertas características de algunos subconjuntos de vértices o de aristas. Este estudio independiente de los conjuntos nos puede mostrar que hay conclusiones interesantes y en algunas ocasiones similares.

Cuando diferentes aristas inciden en un mismo vértice, decimos que dichas aristas son adyacentes y denotamos por a ady$_G$ b, para $a, b \in A(G)$, en caso contrario a no-ady$_G$ b. Si G es una gráfica y $M \subset A(G)$, tal que para cada par $a, b \in M$, se tiene que a no-ady$_G$ b, decimos que M es un ***apareamiento*** en G. Observemos que el conjunto vacío es un apareamiento para cualquier gráfica, los conjuntos unitarios de aristas son apareamientos también.

Si $a \in M$, con M un apareamiento y $a = uv$, decimos que u y v están ***M-apareados***, que v está ***M-saturado***, lo mismo para u, en otro caso diremos que u y v no están M-apareados y que v no está M-saturado.

Observemos en la figura 2.6 que r está M_{1F}-apareado con o, z no está M_{2H}-apareado con y; están M_{1H}-saturados x, u, y y v pero no están M_{3F}-saturados.

Un ***apareamiento máximo*** $\mathscr{M}$ es tal, que para todo M apareamiento en G, tenemos que $|\mathscr{M}| \geq |M|$, un apareamiento M es ***máximo por contención***, si al agregar una arista más deja de ser apareamiento. Un apareamiento M en G es ***M-perfecto*** si para todo $v \in V(G)$, v es M-saturado. De la definición de apareamiento perfecto, se deduce naturalmente que todo apareamiento perfecto es máximo y que toda gráfica G de orden impar, no puede tener un apareamiento perfecto. Una gráfica conexa de orden par no necesariamente tiene un apareamiento perfecto.

En la figura 2.6, se pueden observar tres gráficas F, G y H, cada una con algunos apareamientos, que son coloreados, aristas y vértices, de distintos colores, para ser distinguidos. Así, tenemos que M_{1F}, M_{2F}, M_{3F}, M_{2G}, M_{4G} y M_{1H} son apareamientos máximos, por lo que queda claro que en una gráfica puede haber más de un apareamiento máximo. M_{1G}, M_{3G} y todos los anteriores son máximos por contención. Notemos que todo apareamiento máximo es máximo por contención, pero no necesariamente el recíproco, como lo vemos en la figura 2.6, M_{3H} es máximo por contención y $|M_{1H}| > |M_{3H}|$ por lo que no es máximo. Los apareamientos M_{2G}, M_{4G} y M_{1H} son apareamientos perfectos. En la figura 2.6 no se puede obtener

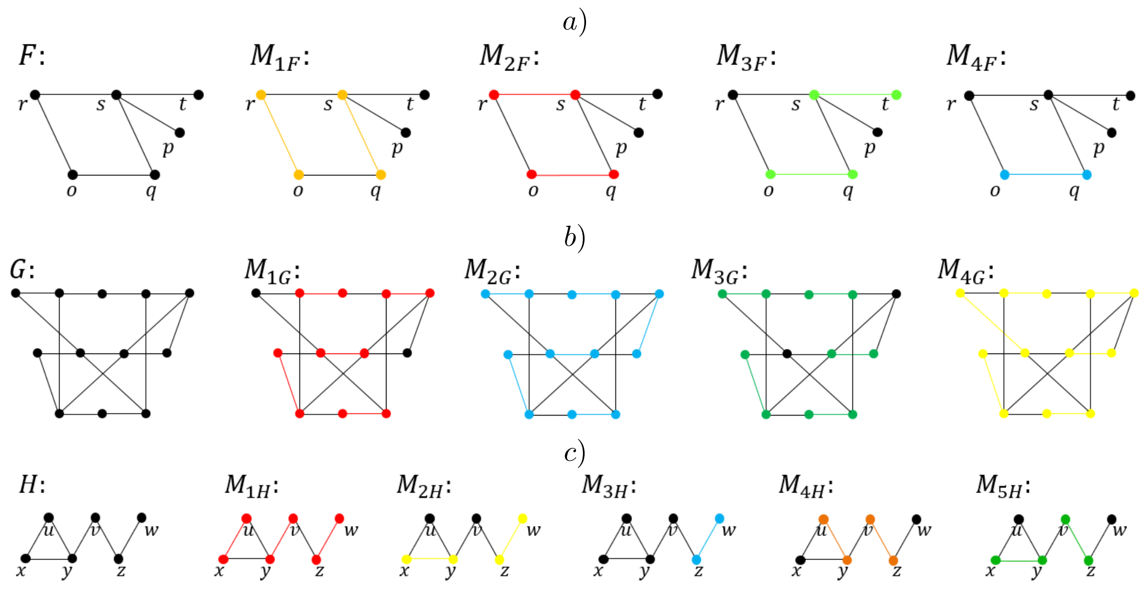


Figura 2.6: Apareamientos

algún apareamiento perfecto para F, aunque F sea de orden par y todos sus vértices están saturados.

Si $M \subset A(G)$, con G una gráfica, decimos que T es una trayectoria ***M-alternante***, si sus aristas se alternan en M y $A(G)-M$. Una trayectoria T es ***M-aumentante***, si es M-alternante y sus extremos no están M-saturados. En la figura 2.6 *c*), $T = (x, u, y, v, z, w)$ es una trayectoria M_{1H}-alternante y M_{4H}-alternante, pero no es M_{1H}-aumentante y si M_{4H}-aumentante.

Observación 2.2.1. *Si G es una gráfica y M un apareamiento en G, entonces:*

- *Las trayectorias M-alternantes de tamaño par tienen la misma cantidad de aristas en M y en $A(G)-M$, debido a esto la mitad de aristas está en M y la otra en $A(G)-M$.*
- *Como consecuencia de la observación anterior, las trayectorias de tamaño par no son M-aumentantes. Ya que uno de los vértices inicial y final de la trayectoria está M-saturado y el otro no.*
- *El tamaño de las trayectorias M-aumentantes es impar.*
- *Una trayectoria M-aumentante tiene una arista menos en M que en $A(G)-M$, debido a que las dos aristas extremas de la trayectoria están en $A(G)-M$.*

Proposición 2.2.1. *Sea una gráfica G y M un apareamiento en G. Si existe T una trayectoria M-aumentante, entonces existe M' un apareamiento en G, tal que $|M'|=|M|+1$.*

Demostración. Sea G una gráfica, con M un apareamiento en G, tal que existe T una trayectoria M-aumentante. Sean u y v los extremos de T, $A_1 = A(T) - M$ y $A_2 = A(T) \cap M$, entonces sabemos que en A_1 hay una arista más que en A_2 y que para toda $a \in M_1 = M - A_2$, $a \notin A(T)$. Como u y v no están M-saturados, entonces ninguna arista de M incide en u o en v. Así, $M' = M_1 \cup A_1$, es un apareamiento tal que $|M'| = |M| + 1$. Lo que demuestra que la proposición es verdadera.

$\square$

Teorema 2.2.1. *Sea G una gráfica. Un apareamiento es $\mathscr{M}$-máximo en G si y sólo si G no tiene trayectorias $\mathscr{M}$-aumentantes.*

Demostración. Supongamos que en G hay un apareamiento M máximo, por demostrar que no existe una trayectoria M-aumentante. Esta parte del enunciado la podemos demostrar por contrapositiva, es decir, si existe una trayectoria M-aumentante, entonces el apareamiento no es máximo. Por la proposición anterior se cumple que existe M', tal que $|M'| = |M| + 1$. Por lo que M no es máximo.

Ahora demostremos que si no existen trayectorias M-aumentantes en G, entonces M es máximo. Procederemos por contradicción. Supongamos que M no es máximo, entonces existe un apareamiento M' en G, tal que $|M'| > |M|$. Sea H la gráfica inducida por las aristas de M y M', como ambos son apareamientos en G, observemos que pueden compartir aristas. Primero para las aristas que comparten, tenemos que en todos los casos los vértices son extremos de dichas aristas, son de grado uno en H. Segundo para las aristas ajenas en vértices, tenemos que, sus vértices pueden ser saturados por ambos apareamientos. Así, dichos vértices o son de grado uno o son de grado dos en H, por lo que todas las componentes conexas restantes en H son ciclos o trayectorias. Notemos que los ciclos deben ser de longitud par, ya que se alternaran aristas en los apareamientos, por lo que hasta ahora se cuenta el mismo número de aristas. Como $|M'| > |M|$, entonces existe una trayectoria en H de longitud impar con una arista más en M', por lo que es una trayectoria M-aumentante, lo cual genera una contradicción. Por lo tanto M es máximo. Con lo que se concluye que el enunciado se cumple. □

2.2.1. Teorema de Hall

En una gráfica bipartita G con partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, podemos observar que si $u \in U$, entonces $N(u) \subseteq W$. Así, para $S \subseteq U$, en donde denotamos $N(S)$ al conjunto de los vecinos de todos los elementos de S, tenemos que $N(S) \subseteq W$.

Si una gráfica G bipartita, con partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, es tal que $|U| \leq |W|$ y para todo $S \subseteq U$ tal que $S \neq \emptyset$, $|N(S)| \geq |S|$, decimos que G cumple *la condición de Hall*. Dicho resultado es llamado así en honor a Philip Hall $(1904 - 1982)$, que pertenecía al grupo de *Teóricos Británicos* de la *"London Mathematical Society"*. Esta condición nos ayuda a caracterizar a las gráficas bipartitas, que poseen algún apareamiento que satura a alguna de sus partes. Notemos que, para M un apareamiento en G, si $k = |M|$, entonces $k \leq |U|$. Cuando $k = |U|$ decimos que U ***está apareado*** con un subconjunto de W y si $k = |U| = |W|$, diremos que M ***aparea*** a U con W.

Teorema 2.2.2 (Teorema de Hall)**.** *Sea G es una gráfica bipartita, con partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, tal que $|U| \leq |W|$. Existe un apareamiento M que satura a U si y sólo si para todo $S \subseteq U$ tal que $S \neq \emptyset$, $|N(S)| \geq |S|$.*

Demostración. Sea G una gráfica bipartita, con partición $\{U, W\}$ de $V(G)$, tal que $|U| \leq |W|$. Para la ida tenemos por hipótesis que existe M un apareamiento de G que satura a U. Sea $R = \{w \in W \colon uw \in M, u \in U\}$, entonces $|M| = |U| = |R|$ y $R \subseteq W$. Sean $S \subset U$, tal que $S \neq \emptyset$, y $R_S = \{w \in W \colon uw \in M \text{ y } u \in S\}$, entonces $R_S \subset N(S)$ y además $|S| = |R_S| \leq |N(S)|$. Por lo tanto se cumple la condición de Hall.

Para el regreso, sean G una gráfica bipartita de orden n, con partición $\{U, W\}$ de $V(G)$ y $|U| \leq |W|$, tal que para todo $S \subseteq U$ se cumple que $|S| \leq |N_G(S)|$, para $S \neq \emptyset$, y $\mathscr{M}$ un apareamiento máximo en G. Notemos que para todo $\{u\} \subseteq U$ se tiene que $N_G(\{u\}) \neq \emptyset$.

Afirmamos que $\mathscr{M}$ satura a U.

Supongamos lo contrario, es decir, que existe un $u \in U$, tal que u no está $\mathscr{M}$-saturado. Sea $X = \{x\colon$ existe una ux-trayectoria $\mathscr{M}$-alternante en $G\}$. Aseguramos que $\mathscr{M}$ satura a X, ya que no existen trayectorias $\mathscr{M}$-aumentantes por el teorema 2.2.1.

Sean $S = X \cap U$ y $R = X \cap W$. Demostraremos que $|S - \{u\}| = |R|$. Veamos que para cada $x \in S - \{u\}$ tenemos que existe una ux-trayectoria $\mathscr{M}$-alternante, por lo que existe un $z \in R$, tal que $zx \in \mathscr{M}$.

Ahora, para cada $x \in R$, tenemos que existe una ux-trayectoria $\mathscr{M}$-alternante, de donde tenemos que existe un $z \in S$, tal que $xz \in \mathscr{M}$, así, $|S - \{u\}| = |R|$, es decir, $|S| = |R| + 1$.

Veamos que $N_G(S) = R$, es claro que $R \subseteq N_G(S)$. Por otro lado, para cada $z \in N_G(S)$, existe un $x \in S$, tal que $zx \in A(G)$, así, tenemos que existe una ux-trayectoria $\mathscr{M}$-alternante, por lo que z está $\mathscr{M}$-apareado. De donde se concluye que $|N_G(S)| \geq |S| > |R| = |N_G(S)|$, lo cual es una contradicción.

Por lo que no existe $u \in U$ tal que u no esté $\mathscr{M}$-apareado. Por lo tanto $\mathscr{M}$ satura a U. □

El siguiente resultado nos ayudará a estudiar apareamientos en gráficas bipartitas regulares.

Lema 2.2.1. *Si G es una gráfica r-regular bipartita, con partición de $V(G)$, $\{U, W\}$ y $1 \leq r$, entonces $|U|{=}|W|$.*

Demostración. Sea G una gráfica r-regular bipartita, con partición de $V(G)$, $\{U, W\}$, tal que $|U|{=}t$, $|W| = s$, con tamaño m. Como G es bipartita, entonces el número de aristas que inciden en vértices de U es igual al número de aristas que inciden en W, que es justamente m, como es r-regular, entonces $rs = m = rt$, de donde obtenemos fácilmente que $s = t$.

□

Proposición 2.2.2. *Toda gráfica G bipartita r-regular, con $1 \leq r$ y orden n, contiene un apareamiento $\mathscr{M}$-perfecto.*

Demostración. Sea G una gráfica r-regular bipartita, de orden n, con partición de $V(G)$, $\{U, W\}$. Por el lema anterior $|U| = |W| = k$. Sea $S \subseteq U$, $S \neq \emptyset$. Basta ver que $|N(S)| \geq |S|$. Como G es r-regular y bipartita, entonces hay $r|S|$ aristas que inciden en S y $r|N(S)|$ aristas que inciden en $N(S)$. Además, $S \subseteq N(N(S))$, por lo que toda arista que incide en S, incide también en $N(S)$. Así, $r|S| \leq r|N(S)|$ si y sólo si $|S| \leq |N(S)|$, ya que $r \geq 1$. Por lo tanto, G cumple las condiciones del teorema de Hall, lo que implica que existe un apareamiento de cardinalidad $|U|$ y por lo tanto es perfecto. □

Sabemos que en general los seres humanos buscan tener una pareja, quieren tener compañía, un apareamiento justamente sirve para modelar este tipo de relaciones y aunque siempre se ha manejado un esquema de un grupo de mujeres y hombres, en este texto no tomaremos la diferencia sexual como un margen en los conjuntos, ya que las parejas pueden ser de cualquier tipo y sin etiquetas. Podemos plantear dos conjuntos de amantes que deciden estar juntos, así que nombraremos a los conjuntos, el de los que toman la iniciativa "amantes" y el conjunto de los que dan una respuesta "amados".

Corolario 2.2.1 (Teorema del amor)**.** *Dados un conjunto de amantes y un conjunto de amados, en donde los amantes conocen exactamente a r amados y los amados conocen a* *exactamente r amantes, con $r \geq 1$. Entonces cada amante puede casarse con un amado conocido.*

Demostración. Es inmediato del teorema anterior. Consideremos la gráfica bipartita G, dada por la partición del conjunto de amantes y el conjunto de amados, donde habrá una arista entre amante y amado si estos se conocen. Por las condiciones iniciales, sabemos que G es $r - regular$ lo que nos asegura que los conjuntos son equipotentes. Por el corolario anterior se tiene que existe un apareamiento perfecto en G. $\square$

Para probar otro resultado importante en el estudio de los apareamientos tenemos que introducir un nuevo concepto. Sea $S_1, S_2, ..., S_k$ una familia de conjuntos no vacíos, distintos dos a dos, un ***sistema de representantes distintos*** es un conjunto $\{v_1, v_2, ..., v_k\}$, con $v_i \in S_i$, si $1 \leq i \leq k$, tal que $v_i \neq v_j$, para $i \neq j$.

Teorema 2.2.3. *Para $F = \{S_1, S_2, ..., S_k\}$ una familia finita de conjuntos finitos no vacíos, existe un sistema de representantes distintos si y sólo si, para cada entero l, con $1 \leq l \leq k$, la unión de l elementos de F, tiene al menos l elementos.*

Demostración. Sea $F = \{S_1, S_2, ..., S_k\}$ una familia finita de conjuntos finitos no vacíos. Supongamos que existe un conjunto de representantes distintos $\{v_1, v_2, ..., v_k\}$, con $v_i \in S_i$, si $1 \leq i \leq k$. Sabemos que cada $S_i \neq \emptyset$ por lo menos tiene un elemento distinto, así, la unión de l conjuntos de F, tiene al menos l elementos.

Ahora, supongamos que para cada entero $1 \leq l \leq k$, la unión de l elementos de F tiene al menos l elementos. Sea G la gráfica bipartita, con partición $\{F, \cup F\}$ de $V(G)$, $S_i u \in A(G)$ si y sólo si $u \in S_i$, con $i \in \{i, 2, ...k\}$. Sea $S \subset F$ tal que $|S| = l \geq 1$, por hipótesis $|\cup_{S_j \in S} S_j| \geq l$, pero $\cup_{S_j \in S} S_j = N(S)$ y por Hall, existe un apareamiento M que satura a F. Sea $R_M = \{v_i \in \cup F \colon S_i v_i \in M, i \in \{1, 2, ..., k\}\}$. Así, R_M es un sistema de distintos representantes para F. $\square$

Hasta ahora hemos estudiado apareamientos en gráficas bipartitas. En 1954, William Tutte nos regaló un teorema que caracteriza las condiciones necesarias y suficientes que se deben de cumplir para encontrar un apareamiento perfecto en cualquier gráfica. Antes de enunciar el teorema vamos a recordar que $c(G)$ denota el número de componentes conexas de G. Denotaremos por $c_I(G)$ al número de componentes conexas de G de orden impar. Notemos que dados G de orden n y $S \subseteq V(G)$; $|V(G) - S|$ tiene la misma paridad que $|S|$, si n es par, y distinta paridad, si n es impar.

Teorema 2.2.4. *Una gráfica G no trivial contiene un apareamiento perfecto si y sólo si $c_I(G - S) \leq |S|$, para todo $S \subsetneq V(G)$.*

Demostración. Sea G una gráfica no trivial, de orden n, supongamos que en G hay un apareamiento M perfecto, por lo que n es par. Sean $S \subsetneq V(G)$ y H una componente conexa de $G - S$, con $|V(H)| = 2l + 1$, para algún $l \in \mathbb{N}$. Como M es perfecto tenemos que existen $v \in V(H)$ y $w \in S$, tal que $vw \in M$, y como esto se cumple para cada componente conexa de orden impar, entonces $c_I(G - S) \leq |S|$.

Ahora supongamos que para cualquier subconjunto S de vértices de G, se cumple que $c_I(G - S) \leq |S|$. Sabemos que $S = \emptyset \subsetneq V(G)$, ya que el vacío es subconjunto de cualquier conjunto. Así, con $S = \emptyset$, $c_I(G - S) \leq 0$, lo que implica que todas las componentes conexas de G son de orden par, por lo que G es de orden par. Demostraremos por inducción sobre el orden par de G, que si $c_I(G-S) \leq |S|$, para todo $S \subsetneq V(G)$, entonces G tiene un apareamiento perfecto.

Si $n=2$, entonces $G=K_2$ es la única gráfica de orden 2 sin componentes conexas impares y K_2 cumple el enunciado.

Supongamos que el teorema se cumple para toda gráfica de orden par menor que $n=2k$.

Sea H una gráfica de orden $n=2k$ que cumple las hipótesis. Como cualquier componente conexa de H es par y no trivial, podemos elegir un vértice v en H, tal que $H_i - v$ es conexa, por el teorema 1.3.3, esto implica que $c(H)=c(H-v)$. Así, tenemos que $c_I(H-v)=1=|\{v\}|$, con esto aseguramos que $\mathscr{S}=\{S \subsetneq V(H)\colon c_I(H-S)=|S|\} \neq \emptyset$. Sea $S \in \mathscr{S}$ de cardinalidad máxima y $r=|S|$; $r \geq 1$ y $H_1, H_2, ..., H_r$ las componentes conexas de orden impar de $H-S$.

Afirmamos que $c(H-S)=r$, que equivale a decir que no hay componentes conexas de orden par. Supongamos que existe H' una componente conexa de $H-S$ de orden par, entonces en H' existe $x \in V(H')$, tal que $H'-x$ es una nueva componente conexa de orden impar. Así, si $S'=S \cup \{x\}$, entonces $c_I(H-S')=|S'|=r+1$, por lo que $S' \in \mathscr{S}$, lo que contradice que S es máximo con esa propiedad, por lo tanto $c(H-S)=c_I(H-S)$. Es decir, $H_1, H_2, ..., H_r$ son todas las componentes conexas en $H-S$.

Sea $S_i=\{v \in S\colon vu \in A(H)$, para algún $u \in V(H_i)\}$, para toda $i \in \{1,2,\ldots,r\}$. Veamos que $S_i \neq \emptyset$, pero esto es cierto ya que si $S_i=\emptyset$, para alguna $i \in \{1,2,...,r\}$, entonces H_i sería una componente conexa de H y H no contiene componente conexas de orden impar. Por lo tanto $F=\{S_1, S_2, ..., S_r\}$ es una familia finita de conjuntos finitos no vacíos.

Ahora veremos que F posee un sistema de representantes distintos. Supongamos que no, entonces existe $J \subseteq \{1,2,...,r\}$ tal que:

$$|J|=j,\ S'=\bigcup_{i\in J} S_i \text{ y } |S'|=\Big|\bigcup_{i\in J} S_i\Big|<j.$$

Así, $H-S'$ tiene al menos $H_1, H_2, ..., H_j$ componentes conexas de orden impar, es decir, $c_I(G-S') \geq j > |S'|$ y $S' \subsetneq V(H)$, esto contradice la hipótesis del enunciado. Esto implica que $|S'| \geq j$, por lo que F tiene un sistema de representantes distintos.

Sea $\{v_1, v_2, ..., v_r\}$ el sistema de representantes distintos de F, entonces para toda $v_i \in S_i$, existe un $u_i \in V(H_i)$ tal que $v_i u_i \in A(H)$. Sea $M_S=\{v_i u_i\colon i \in \{1,2,...,r\}\}$, este es claramente un apareamiento en H que satura a S.

Basta ver que para cada H_i no trivial, $H_i - u_i$ posee un apareamiento perfecto. Sea $R \subsetneq V(H_i-u_i)$, demostraremos que $c_I((H_i-u_i)-R) \leq |R|$.

Supongamos que no, es decir, que $|R| < c_I((H_i-u_i)-R)$, notemos que $|R|$ y $c_I((H_i-u_i)-R)$ tienen la misma paridad, pues $V(H_i-u_i)$ tiene cardinalidad par, de donde $|R|+2 \leq c_I((H_i-u_i)-R)$. Sea $X=R \cup S \cup \{u_i\}$ entonces:

$$|X|=|S|+|R|+1=|S|+(|R|+2)-1 \leq c_I(H-S)+c_I((H_i-u_i)-R)-1 \leq c_I(H-X)$$

y

$$c_I(H-X) \leq |X|.$$

De donde tenemos que $c_I(H-X)=|X|$. Por lo que X cumple la misma propiedad que S y $|S|<|X|$, lo cual es una contradicción. Por lo tanto $c_I((H_i-u_i)-R) \leq |R|$, para todo

$R \subsetneq V(H_i - u_i)$, esto implica que $H_i - u_i$ cumple la hipótesis de inducción. Así, existe un $\mathscr{M}_i$-apareamiento perfecto de $V(H_i - u_i)$. Por lo tanto $\mathscr{M} = \bigcup_{i=1}^{r} \mathscr{M}_i \cup M_S$, es un apareamiento perfecto en H. □

2.3. Conjuntos independientes

Sea G una gráfica, en ella podemos ver que los apareamientos son conjuntos de aristas que son independientes dos a dos. En una gráfica G con apareamiento máximo $\mathscr{M}$, llamaremos a $|\mathscr{M}|$ el número de apareamiento o el ***número de independencia por aristas*** en G y se denota por $|\mathscr{M}| = \alpha'(G)$. Para una gráfica con un apareamiento perfecto, tenemos que $\alpha'(G) = \frac{n}{2}$.

Un apareamiento M máximo por contención es llamado entonces un ***conjunto independiente máximo por contención*** en G, de donde podemos afirmar que M no es subconjunto propio de ningún otro conjunto independiente de aristas en G. El número de independencia por aristas inferior es la mínima cardinalidad de un conjunto máximo por contención y se denota por $\alpha_0(G)$.

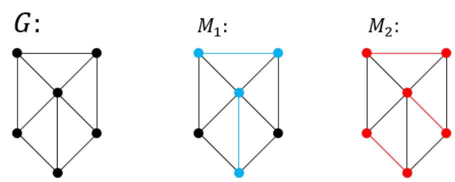


Figura 2.7: Conjuntos independientes por aristas

En la figura 2.7, podemos ver que M_1 es un apareamiento mínimo en cardinalidad y máximo por contención; y que M_2 es un apareamiento máximo (además de perfecto) en G, por lo que es claro que $2 = \alpha'_0(G) \leq \alpha'(G) = 3$.

Teorema 2.3.1. *Sea G una gráfica, entonces se cumple que:*

$$\alpha'_0(G) \leq \alpha'(G) \leq 2\alpha'_0(G).$$

Demostración. Sea G una gráfica y M un conjunto de aristas independiente máximo por contención de cardinalidad mínima en G, entonces M es un apareamiento máximo por contención en G, por lo tanto M es máximo o M no es máximo, por lo que $\alpha'_0(G) = |M| \leq |\mathscr{M}| = \alpha'(G)$, con $\mathscr{M}$ un apareamiento máximo en G.

Ahora veamos que $\alpha'(G) \leq 2\alpha'_0(G)$, si M es un apareamiento máximo por contención mínimo, entonces $|V(M)| = 2|M| = 2\alpha'_0(G)$. Sea $\mathscr{M}$ un apareamiento máximo en G. Afirmamos que para toda $a \in M$, con $a = uv$, u o v están $\mathscr{M} - saturados$, ya que en caso contrario, $M' = \mathscr{M} \cup \{a\}$ es máximo y $|\mathscr{M}| < |M'|$, lo que contradice que $\mathscr{M}$ es máximo. Así, para cada $a \in M$, al menos uno de sus extremos está $\mathscr{M} - saturado$, esto implica que $\alpha'(G) = |\mathscr{M}| \leq |V(M)| = 2|M| = 2\alpha'_0(G)$. Por lo tanto $\alpha'_0(G) \leq \alpha'(G) \leq 2\alpha'_0(G)$. □

Hemos visto que en una gráfica G pueden existir vértices adyacentes y vértices no adyacentes. Recordemos que al conjunto de todos los vértices adyacentes a u en $V(G)$ lo llamamos la vecindad de u, denotada por $N_G(u)$.

Podemos tomar subconjuntos $B \subseteq V(G)$, tales que para cada par $u, v \in B$ tenemos que $uv \notin A(G)$. Definimos a B como un ***conjunto independiente por vértices*** o ***conjunto***

estable. Es claro que para cualquier gráfica G, dada la gráfica $G - A(G)$ cualquier subconjunto que se tome es independiente, lo que de inmediato nos dice que la gráfica trivial y todos los conjuntos con un solo vértice son conjuntos independientes por definición y que para toda $G = K_n$, no existen conjuntos independientes con cardinalidad mayor a uno.

En una gráfica G existe un conjunto independiente por vértices máximo y su cardinalidad es llamada el ***número de independencia puntual*** de G y se denota por $\alpha(G)$. Con todo lo observado podemos decir que claramente $0 \leq \alpha(G) \leq n$, con n el orden de G. Un ***conjunto estable máximo por contención***, es aquel que es independiente en G, tal que al agregarle cualquier otro vértice de G deja de ser estable.

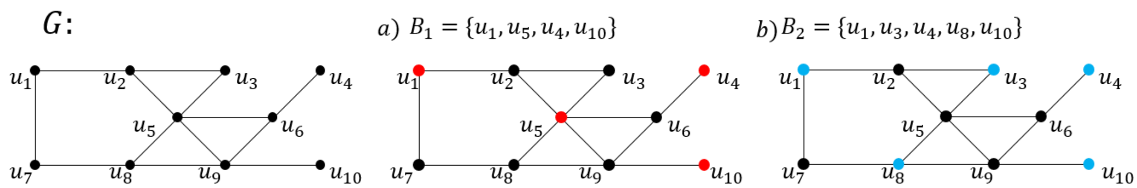


Figura 2.8: Conjuntos independientes por vértices

También en una gráfica G existen subconjuntos de vértices S, con $|S| = k$, tales $G[S] = K_k$, a dichos conjuntos los llamamos ***clanes*** de G. A la cardinalidad de un clan máximo de G la llamamos el ***número de clan*** de G y lo denotamos por $\omega(G)$. Debido a las definiciones de $\omega(G)$ y $\alpha(G)$, tenemos que $\omega(G^c) = \alpha(G)$.

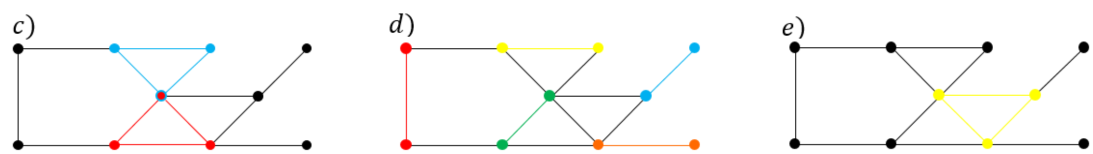


Figura 2.9: Clanes

Podemos ver en la figura 2.8 $a)$ que en B_1 es conjunto independiente de vértices máximo por contención, en $b)$ B_2 es un conjunto independiente máximo, en la figura 2.9 $c)$ tenemos dos clanes que inducen dos K_3, cuya intersección no es vacía, para $d)$ hay varios clanes que inducen K_2 ajenos entre sí y por último en $e)$ se observa otro clan que induce K_3. Por lo que la cardinalidad máxima para un conjunto independiente por vértices es $\alpha(G) = 5$, que el clan máximo tiene cardinalidad $\omega(G) = 3$. Así, resulta que $\alpha(G^c) = 3$ y que $\omega(G^c) = 5$. Es fácil ver que $B_3 = \{u_1, u_3, u_4, u_8, u_{10}\}$ es un clan máximo en G^c y que $B_4 = \{u_2, u_3, u_5\}$ es un conjunto independiente máximo en G^c.

Capítulo 3

Sobre el número total de apareamientos y conjuntos independientes en gráficas con conexidad a lo más k

En este capítulo estudiaremos los ***índices de Hosoya*** y de ***Merrifield-Simmons*** de una gráfica G. En el contexto de la Química Combinatoria son llamados índices topológicos, debido a que describen algunas características estructurales de las gráficas moleculares [1] de algunos compuestos, las cuales se relacionan con sus propiedades fisicoquímicas. En particular son utilizados para predecir algunas propiedades termodinámicas de los hidrocarburos.

En este trabajo nos enfocaremos en el comportamiento de los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons de gráficas conexas de orden n con conexidad puntual (lineal) a lo más k, con $k \leq n-1$. Empezaremos por definir y probar algunos resultados sobre los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons para gráficas en general.

3.1. Índice de Hosoya

El índice de Hosoya de una gráfica G, denotado por $z(G)$, es el número total de apareamientos de G incluyendo el conjunto vacío. Este índice fue introducido por Haruo Hosoya en 1971. Dada una gráfica G, con número de apareamiento $\alpha'(G)$, el índice de Hosoya es representado matemáticamente como:

$$z(G) = \sum_{k=0}^{\alpha'(G)} p(G:k).$$

donde $p(G:k)$ es el número de apareamientos de cardinalidad k en G, notemos que el único apareamiento de cardinalidad cero es el conjunto vacío, por lo que $p(G:0)=1$, y si G tiene tamaño m, entonces $p(G:1)=m$.

Podemos observar en la figura 3.1, que contar los apareamientos de P_5, no es un trabajo tan complicado; sin embargo, encontrar el índice de Hosoya de K_5 es mucho más complejo (como

[1] véase Capítulo 4

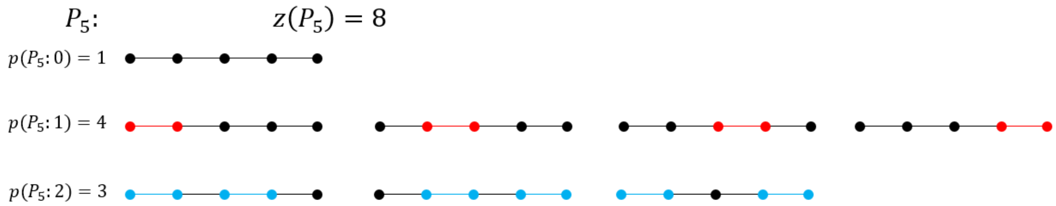


Figura 3.1: Para P_5, la trayectoria de orden 5, $\alpha'(P_5) = 2$ y $z(P_5) = 8$

se muestra en la figura 3.2), a pesar de que P_5 y K_5 tienen el mismo orden y número de apareamiento.

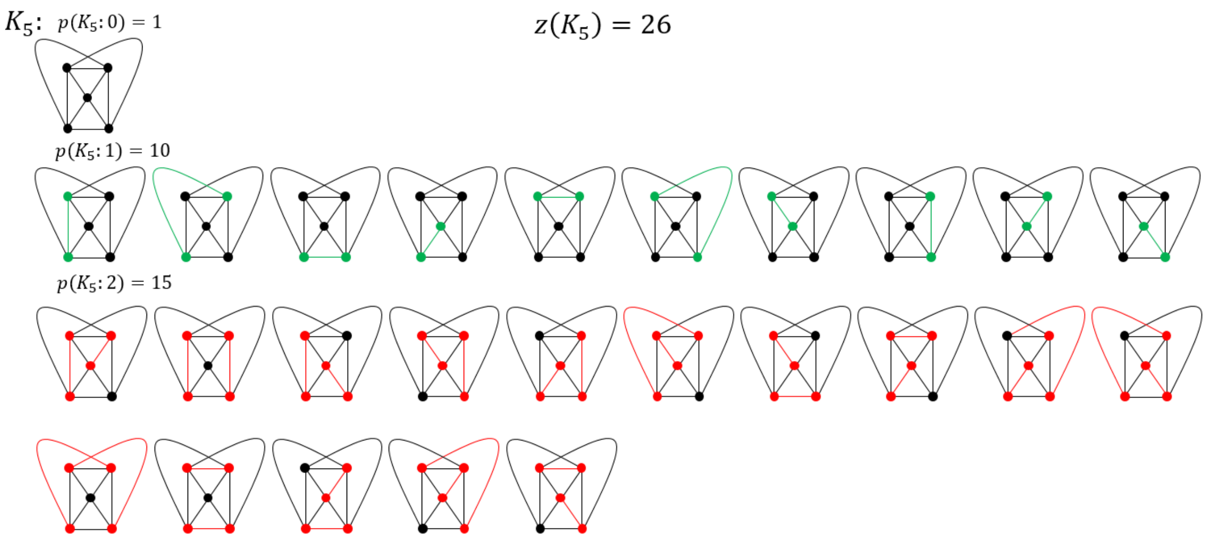


Figura 3.2: Para K_5, la gráfica completa de orden 5, $\alpha'(K_5) = 2$ y $z(K_5) = 26$

3.1.1. Lema del índice de Hosoya

En general, encontrar el índice de Hosoya de una gráfica G es un problema $\mathcal{NP}$-completo. El siguiente lema nos provee de un método para contar apareamientos en una gráfica a partir de subgráficas más pequeñas.

Lema 3.1.1. *Sea G una gráfica, entonces:*

1) Para todo $uv \in A(G)$, se cumple que:

$$z(G) = z(G - uv) + z(G - \{u, v\}).$$

Demostración. Sean G una gráfica y $uv \in A(G)$. Sea $\mathcal{A}$ el conjunto de los apareamientos en G y sean $\mathcal{A}_{uv} = \{M \in \mathcal{A} : uv \in M\}$ y $\mathcal{A}'_{uv} = \mathcal{A} - \mathcal{A}_{uv}$.

Sabemos por definición que $z(G) = |\mathcal{A}|$. Es fácil ver que $\mathcal{A}_{uv}$ y $\mathcal{A}'_{uv}$ forman una partición de $\mathcal{A}$. Basta demostrar que $\mathcal{A}_{uv}$ y $\mathcal{A}'_{uv}$ son conjuntos no vacíos.

Sabemos que $\emptyset \in \mathcal{A}'_{uv}$ y que $\{uv\} \in \mathcal{A}_{uv}$, lo que implica que $z(G) = |\mathcal{A}| = |\mathcal{A}_{uv}| + |\mathcal{A}'_{uv}|$.

Notemos que como $uv \in M$, para todo $M \in \mathcal{A}_{uv}$, entonces para todo $x \in N_G(u) - \{v\}$ y para todo $y \in N_G(v) - \{u\}$, $xu \notin M$, $yv \notin M$, esto implica que en M no hay aristas que tengan como extremos a u o a v salvo uv, es decir, las aristas que están en $A(G - \{u,v\}) \cup \{uv\}$. Sean $\mathcal{A}'$ el conjunto de los apareamientos de $G - \{u,v\}$ y f_{uv} una función, tal que $f_{uv} \colon \mathcal{A}_{uv} \longrightarrow \mathcal{A}'$, en donde $f_{uv}(M) = M - \{uv\}$, para todo $M \in \mathcal{A}_{uv}$, veamos que la función es inyectiva. Sean $M, M' \in \mathcal{A}_{uv}$. Así, $f_{uv}(M) = M - \{uv\}$ y $f_{uv}(M') = M' - \{uv\}$, de donde es claro que $f_{uv}(M) = f_{uv}(M')$ si y sólo si $M = M'$, por lo que f_{uv} es inyectiva.

Ahora, sea $M'' \in \mathcal{A}'$, lo que implica que ninguna arista de G incidente en u o en v está en M''. Así, $M = M'' \cup \{uv\}$ es un apareamiento de G, tal que $M \in \mathcal{A}_{uv}$. Por lo que $f_{uv}(M) = M''$, así f_{uv} es suprayectiva y por lo tanto biyectiva. Con lo anterior concluimos que $|\mathcal{A}_{uv}| = |\mathcal{A}'| = z(G - \{u,v\})$.

Por último, sean $\mathcal{A}''$ el conjunto de los apareamientos de $G - uv$ y $f'_{uv} \colon \mathcal{A}'_{uv} \longrightarrow \mathcal{A}''$, tal que $f'_{uv}(M) = M$, para todo $M \in A'_{uv}$, entonces como en $\mathcal{A}''$ están todos lo apareamientos de G que no tienen a uv, f'_{uv} es claramente biyectiva. Así, $|A'_{uv}| = |A''| = z(G - uv)$.

Por lo tanto $z(G) = |\mathcal{A}| = |\mathcal{A}'| + |\mathcal{A}''| = z(G - \{u,v\}) + z(G - uv)$. $\square$

2) Si $v \in V(G)$, entonces:

$$z(G) = z(G - v) + \sum_{w \in N_G(v)} z(G - \{v,w\}).$$

Demostración. Procederemos por inducción sobre $|N_G(v)|$. Si $|N_G(v)| = 0$, entonces v es un vértice aislado, por lo que ningún apareamiento de G satura a v. Así, $z(G) = z(G - v)$.

Si $|N_G(v)| = 1$, sea $w \in V(G)$ el único vecino de v. Así cualquier apareamiento que sature a v contiene a vw, por el lema 3.1.1 inciso 1), $z(G) = z(G - vw) + z(G - \{v,w\})$, pero $z(G - vw) = z(G - v)$, pues v es un vértice aislado en $G - vw$. Por lo tanto $z(G) = z(G - v) + z(G - \{v,w\})$.

Supongamos que si $|N_G(v)| = k$, el teorema se cumple.

Sean $v \in V(G)$, tal que $d_G(v) = k + 1 \geq 2$ y $u \in N_G(v)$, por el lema 3.1.1 inciso 1), $z(G) = z(G - vu) + z(G - \{v,u\})$. Notemos que $d_{G-vu}(v) = k$. Por hipótesis de inducción tenemos que:

$$z(G - uv) = z(G - v) + \sum_{w \in N_{G-vu}(v)} z(G - \{v,w\}).$$

Como $N_G(v) = N_{G-vu}(v) \cup \{u\}$, entonces:

$$z(G) = z(G - v) + \sum_{w \in N_{G-vu}(v)} z(G - \{v,w\}) + z(G - \{v,u\}) = z(G - v) + \sum_{w \in N_G(v)} z(G - \{v,w\}).$$

$\square$

3) Si $G_1, G_2, ..., G_r$ son gráficas ajenas en vértices y $G = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_r$, entonces se cumple que:

$$z(G) = \prod_{l=1}^{r} z(G_l).$$

Demostración. Sean una gráfica $G = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_r$, con G_i y G_j gráficas ajenas, para toda $i \neq j$ e $i, j \in \{1, 2, ...r\}$. Sea $\mathcal{A}_i$ el conjunto de los apareamientos en G_i, con $i \in \{1, 2, ..., r\}$, por definición tenemos que $z(G_i) = |\mathcal{A}_i|$, para cada $i \in \{1, 2, ..., r\}$.

Procederemos por inducción sobre r. Es claro que para $r = 1$ no hay nada que hacer, por lo que empezaremos con $r = 2$. Sean G_1, G_2 dos gráficas ajenas en vértices y $G = G_1 \cup G_2$. Sean $\mathcal{A}_1$ y $\mathcal{A}_2$ los conjuntos de todos los apareamientos en G_1 y G_2 respectivamente.

Consideremos $M_1 \in A_1$ y $M_2 \in A_2$. Notemos que $M_1 \cup M_2$ es un apareamiento de G. Por otro lado si $M \neq \emptyset$ es un apareamiento de G, entonces $M = (M \cap A(G_1)) \cup (M \cap A(G_2))$. De aquí que G tiene tantos apareamientos como $|A_1| \cdot |A_2|$, es decir:

$$z(G) = z(G_1)z(G_2).$$

Supongamos que para toda $r \geq 2$ y para toda gráfica $G' = \bigcup_{i=1}^{r} G_i$, con G_i, G_j gráficas ajenas, para $i \neq j$. Se cumple que:

$$z(G') = \prod_{i=1}^{r} z(G_i).$$

Sea $G = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_r \cup G_{r+1}$, con $G_i \neq G_j$, para $i \neq j$ e $i, j \in \{1, 2, \ldots, r+1\}$. Podemos reescribir a G, teniendo en cuenta que $H = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_r$ cumple la hipótesis de inducción. Así, como $G = H \cup G_{r+1}$ concluimos que:

$$z(G) = z(H)z(G_{r+1}) = \left(\prod_{i=1}^{r} z(G_i)\right) z(G_{r+1}) = \prod_{i=1}^{r+1} z(G_i).$$

□

Dos corolarios del lema 3.1.1.

Corolario 3.1.1 (Inciso 1)**.** *Si G es una gráfica y $u, v \in V(G)$, tal que $uv \notin A(G)$, entonces $z(G + uv) > z(G)$.*

Demostración. Sea $G' = G + uv$, lo que implica que $z(G') = z((G + uv) - uv) + z((G + uv) - \{u, v\}) = z(G) + z(G - \{u, v\})$. Claramente se concluye que $z(G + uv) > z(G)$.

□

Corolario 3.1.2 (Inciso 3)**.** *Si G es una gráfica y $G_1, G_2, ..., G_{c(G)}$, las componentes conexas de G, entonces tenemos que:*

$$z(G) = \prod_{i=1}^{c(G)} z(G_i).$$

Demostración. Sean G una gráfica y $G_1, G_2, ..., G_{c(G)}$ las componentes conexas de G.

Sabemos por la definición de componentes conexas que $G_1, G_2, ..., G_{c(G)}$ son ajenas dos a dos y $G = G_1 \cup G_2 \cup \cdots \cup G_{c(G)}$. Por el lema 3.1.1 vemos que se cumple el enunciado.

□

Lema 3.1.2. *Sea $z(K_n) = z_n$, entonces tenemos que $z_n = z_{n-1} + (n-1)z_{n-2}$, y $z_1 = 1$ y $z_2 = 2$.*

Demostración. Sea K_n y $v \in V(K_n)$. Es claro que $K_n - v = K_{n-1}$ y por el lema 3.1.1 2), tenemos que:

$$z(K_n) = z(K_n - v) + \sum_{w \in N_{K_n}(v)} z(K_n - \{w, v\}).$$

Primero observemos que como $K_n - v = K_{n-1}$, tenemos que $z(K_n - v) = z(K_{n-1}) = z_{n-1}$.

Ahora veamos que para $\sum_{w \in N_{K_n}(v)} z(K_n - \{w, v\})$, tenemos que $|N_{K_n}(v)| = n - 1$ para todo $v \in V(K_n)$ y además $K_n - \{w, v\} = K_{n-2}$ de donde tenemos que $z(K_{n-2}) = z_{n-2}$, así:

$$\sum_{w \in N_{K_n}(v)} z(K_n - \{w, v\}) = (n-1)z_{n-2}.$$

Por lo tanto $z_n = z_{n-1} + (n-1)z_{n-2}$.

Por último observemos que K_1 tiene sólo al apareamiento vacío, por lo que $z(K_1) = 1 = z_1$ y para K_2 tenemos únicamente dos apareamientos, el conjunto vacío y K_2 misma, así $z(K_2) = 2 = z_2$. □

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
z_n	1	2	4	10	26	76	232	764	2620	9496	35696	140152

Cuadro 3.1: Sucesión para las primeras 12 gráficas completas

3.2. Índice de Merrifield-Simmons

El índice de Merrifield-Simmons es otro de los llamados índices topológicos en la Química Combinatoria. Fue introducido por Richard E. Merrifield y Howard E. Simmons en 1989. El índice de Merrifield-Simmons de una gráfica G es el número de conjuntos independientes de $V(G)$, incluido el vacío. Lo denotamos por $i(G)$. Formalmente:

$$i(G) = \sum_{j=0}^{\alpha(G)} q(G : j),$$

donde $\alpha(G)$ es el número de independencia de G y $q(G : j)$ denota el número de conjuntos independientes de G de cardinalidad j.

Notemos que para cualquier gráfica simple G de orden n, $q(G : 0) = 1$ y $q(G : 1) = n$. Si $G = K_n^c$, tenemos que $n = \alpha(G)$ y $q(G : n) = 1$. Para P_5, la trayectoria de orden 5, $\alpha(P_5) = 3$ e $i(P_5) = 13$.

En la figura 3.3, podemos contar los conjuntos independientes de la trayectoria P_5, incluyendo al conjunto vacío. Para la gráfica K_5^c de orden 5 cualquier subconjunto de vértices es independiente, por lo que $q(K_5^c : 0) = 1$, $q(K_5^c : 1) = 5$, $q(K_5^c : 2) = 10$, $q(K_5^c : 3) = 10$, $q(K_5^c : 4) = 5$ y $q(K_5^c : 5) = 1$, lo que nos dice que $i(K_5^c) = 32$ conjuntos independientes. Por otro lado en la gráfica K_5 sus únicos conjuntos independientes son el conjunto vacío y los unitarios de los vértices, por lo que $i(K_5) = 6$.

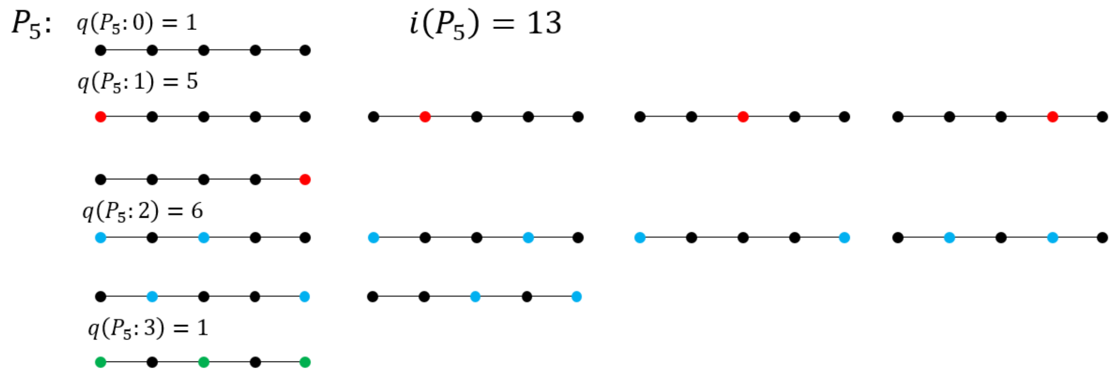


Figura 3.3: Para P_5, la trayectoria de orden 5, $\alpha(P_5) = 3$ e $i(P_5) = 13$.

De lo anterior podemos observar que cuantas más aristas hay, la cantidad de conjuntos independientes disminuye.

Veamos la figura 3.4, en ella se describen los conjuntos independientes de $S_5 = K_{1,4}$, la estrella de orden 5. Notemos que S_5 y P_5 tienen el mismo orden y tamaño; sin embargo $i(P_5) < i(S_5)$; lo que nos indica que el tamaño no es un factor que caracterice de manera determinante el valor de $i(G)$.

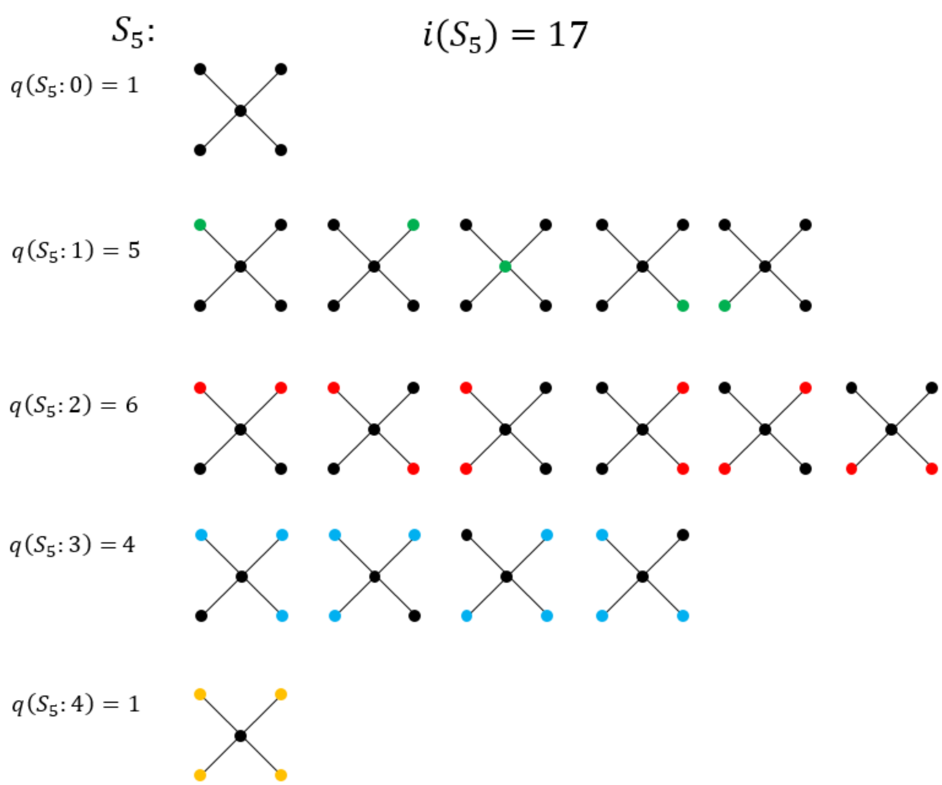


Figura 3.4: Para S_5, la estrella de orden 5, $\alpha(S_5) = 4$ e $i(S_5) = 17$.

3.2.1. Lema del índice de Merrifield-Simmons

Ahora demostraremos algunos enunciados que nos dan resultados importantes al respecto del índice de Merrifield-Simmons.

Lema 3.2.1. *Si G es una gráfica, entonces:*

1) Para cualquier $uv \in A(G)$, se cumple que:

$$i(G) = i(G - uv) - i\left(G - (N_G(u) \cup N_G(v))\right).$$

Demostración. Sean G una gráfica y $uv \in A(G)$. Consideremos $H = G - uv$. Notemos que el conjunto $N = N_G(u) \cup N_G(v) = N_G[u] \cup N_G[v] = N_H[u] \cup N_H[v]$. Tomemos en cuenta que es equivalente a demostrar que:

$$i(H) = i(G) + i(G - N).$$

Sean $\mathcal{I}_H$ la colección de los conjuntos independientes de H, $\mathcal{I}_N = \{I \in \mathcal{I}_H : I \cap N \neq \emptyset\}$, e $\mathcal{I}_{\overline{N}} = \{I \in \mathcal{I}_H : I \cap N = \emptyset\} = \mathcal{I}_H - \mathcal{I}_N$. Afirmamos que $\mathcal{I}_N$ e $\mathcal{I}_{\overline{N}}$ forman una partición de $\mathcal{I}_H$, basta demostrar que son no vacíos. Lo que resulta inmediato, ya que $\{u\}, \{v\} \in \mathcal{I}_N$ y $\emptyset \in \mathcal{I}_{\overline{N}}$.

Sea $\mathcal{I}_{G-N}$ la colección de todos los conjuntos independientes de $G - N$, entonces en $\mathcal{I}_{G-N}$ están todos los conjuntos independientes de G que no tienen ni a u, ni a v, ni a cualesquiera de sus vecinos y sólo esos; por lo que $\mathcal{I}_{G-N} = \mathcal{I}_{\overline{N}}$. Así $|\mathcal{I}_{G-N}| = |\mathcal{I}_{\overline{N}}|$.

Ahora, dado $\mathcal{I}_G$, la colección de todos los conjuntos independientes de G, definimos la función $f_{\{u,v\}} : \mathcal{I}_G \longrightarrow \mathcal{I}_N$, tal que para todo $I \in \mathcal{I}_G$, tenemos que:

$$f_{\{u,v\}}(I) = \begin{cases} I & \text{si } I \cap N \neq \emptyset \\ I \cup \{u,v\} & \text{si } I \cap N = \emptyset. \end{cases}$$

Demostraremos que la función es inyectiva. Sean I_1, I_2 conjuntos independientes de G, tales que $f_{\{u,v\}}(I_1) = f_{\{u,v\}}(I_2)$. Entonces tenemos los siguientes casos:

Caso 1. Si $I_1 \cap N \neq \emptyset$ e $I_2 \cap N \neq \emptyset$, entonces $I_1 = I_2$.

Caso 2. Si $I_1 \cap N \neq \emptyset$ e $I_2 \cap N = \emptyset$, entonces $I_1 = I_2 \cup \{u,v\}$. Notemos que este caso no es posible, ya que $S_1 \in \mathcal{I}_G$, así $\{u,v\} \not\subset I_1$. Análogamente para $I_1 \cap N = \emptyset$ y $I_2 \cap N \neq \emptyset$.

Caso 3. Si $I_1 \cap N = \emptyset$ e $I_2 \cap N = \emptyset$, entonces $I_1 \cap N = \emptyset = I_2 \cap N = \emptyset$ si y sólo si $I_1 = I_2$.

Por lo tanto es inyectiva la función.

Veamos que es suprayectiva la función.

Sea $I \in \mathcal{I}_N$, entonces S es independiente en H, tal que $I \cap N \neq \emptyset$. De donde tenemos dos casos:

Caso 1. Si $\{u,v\} \subseteq I$, entonces $N_H(u) \cup N_H(v) \not\subseteq I$. Así $I' = I - \{u,v\}$ es un conjunto independiente en G, tal que $I \cap N = \emptyset$. Por lo que $f_{\{u,v\}}(I') = I$.

Caso 2. Si $|I \cap \{u,v\}| \leq 1$, entonces I es un conjunto independiente en G tal que $I \cap N \neq \emptyset$. Así, $f_{\{u,v\}}(I) = I$. Por lo que $f_{\{u,v\}}$ es sobre. Por lo tanto la función es biyectiva.

Es decir

$$\begin{aligned} i(H) &= |I_H| \\ &= |\mathcal{I}_N| + |\mathcal{I}_{\overline{N}}| \\ &= |\mathcal{I}_G| + |\mathcal{I}_{G-N}| \\ &= i(G) + i(G-N). \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} i(G) &= i(H) - i(G-N) \\ &= i(G-uv) - i(G-(N_G(u) \cup N_G(v))). \end{aligned}$$

$\square$

2) Si $v \in V(G)$. se cumple que $i(G) = i(G-v) + i(G-N_G[v])$.

Demostración. Sean G una gráfica, $v \in V(G)$ y $N_G[v]$. Sean $\mathcal{I}_G$ el conjunto de todos los conjuntos independientes en G, $\mathcal{I}_v$ el conjunto de todos los conjuntos independientes de G en los que se encuentra v e $\mathcal{I}'_v = \mathcal{I}_G - \mathcal{I}_v$.

Veamos que $\{\mathcal{I}_v, \mathcal{I}'_v\}$ es una partición de $\mathcal{I}$. Basta ver que $\mathcal{I}_v, \mathcal{I}'_v$ son no vacíos y esto ocurre ya que $\emptyset \in \mathcal{I}'_v$ y $\{v\} \in \mathcal{I}_v$.

Por lo anterior, tenemos que $|\mathcal{I}| = |\mathcal{I}_v| + |\mathcal{I}'_v|$. Así, debido a la definición del índice de Merrifield-Simmons, sabemos que $i(G) = |\mathcal{I}_v| + |\mathcal{I}'_v|$.

Sean $\mathcal{I}_{G-v}$ el conjunto de todos los conjuntos independientes en $G-v$, es inmediato de las definiciones que $\mathcal{I}_{G-v} \subset \mathcal{I}'_v$, más aún $\mathcal{I}_{G-v} = \mathcal{I}'_v$ pues todo conjunto independiente de G que no contiene a v es un conjunto independiente en $G-v$, lo que implica que $\mathcal{I}_{G-v} = \mathcal{I}'_v$. Por lo que $|\mathcal{I}_{G-v}| = |\mathcal{I}'_v|$.

Consideremos $G-N_G[v]$. Sean $\mathcal{I}_{G-N_G[v]}$ el conjunto de todos los conjuntos independientes de $G-N_G[v]$ y $f_v : \mathcal{I}_v \longrightarrow (G-N_G[v])$ dada por la regla $f_v(I) = I - \{v\}$. Afirmamos que f_v es biyectiva.

Sean $I, J \in \mathcal{I}_v$, tales que $f_v(I) = f_v(J)$, entonces $I - \{v\} = J - \{v\}$ si y sólo si $I = J$; lo que implica que f_v es inyectiva.

Por otro lado, si $I \in \mathcal{I}_{G-N_G[v]}$, entonces I es independiente de G, tal que $I \cap N_G[v] = \emptyset$, de este modo $I \cup \{v\}$ es independiente en G y $I \cup \{v\} \in \mathcal{I}_v$. Así, $f(I \cup \{v\}) = I$. Por lo que f_v es suprayectiva y por tanto biyectiva; de modo que $|I_{G-N_G[v]}| = |\mathcal{I}_v|$.

Con lo anterior concluimos que:

$$i(G) = |\mathcal{I}_{G-v}| + |\mathcal{I}_{G-N_G[v]}| = |\mathcal{I}_v| + |\mathcal{I}'_v| = i(G-v) + i(G-N_G[v]).$$

$\square$

3) Si $G_1, G_2, ..., G_k$ son gráficas ajenas dos a dos y $G = \bigcup_{j=1}^k G_j$, se cumple que

$$i(G) = \prod_{j=1}^{k} i(G_j).$$

Demostración. Procederemos por inducción sobre k. Para $k = 1$, es claro que el teorema se cumple, por lo que empezamos con $k = 2$. Sean G_1, G_2, dos gráficas ajenas y $G = G_1 \cup G_2$.

Sean $\mathcal{I}_G$ el conjunto de todos los conjuntos independientes de G e $I \in \mathcal{I}_G$. Notemos que $I = I_1 \cup I_2$ con I_1, I_2 conjuntos independientes de G_1 y G_2 respectivamente. Así $|\mathcal{I}_G| = |\mathcal{I}_1||\mathcal{I}_2|$ es decir:

$$i(G) = i(G_1) \cdot \ i(G_2).$$

Supongamos que para una gráfica $H = \bigcup_{j=1}^{k} H_j$, con $k \geq 2$ y k gráficas ajenas dos a dos, se cumple que:

$$i(H) = \prod_{j=1}^{k} i(H_j).$$

Sea $G = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_k \cup G_{k+1}$ una gráfica formada por la unión de las G_j gráficas ajenas dos a dos, con $1 \leq j \leq k+1$.

Consideremos $G' = G_1 \cup G_2 \cup ... \cup G_k$, subgráfica de G, que cumple la hipótesis de inducción y claramente:

$$G = G' \cup G_{k+1}.$$

de lo anterior y de la base de inducción tenemos que:

$$i(G) = i(G') \cdot i(G_{k+1}) = \prod_{j=1}^{k} i(G_j) \cdot i(G_{k+1}) = \prod_{j=1}^{k+1} i(G_j).$$

□

Corolario 3.2.1 (Inciso 1)**.** *Si G es una gráfica, tal que $uv \notin A(G)$, entonces:*

$$i(G + uv) < i(G)$$

Demostración. Sea G tal que $uv \notin A(G)$, para algunos $u, v \in V(G)$. Sea $H = G + uv$, esto implica que $G = H - uv$, por el inciso 1) del lema anterior, tenemos que

$$i(H) = i(H - uv) - i\left(G - (N_H(u) \cup N_H(v))\right).$$

entonces

$$i(G + uv) = i(G) - i\left(G - (N_{G+uv}(u) \cup N_{G+uv}(v))\right)$$

Por lo que $i(G + uv) + i\left(G - (N_{G+uv}(u) \cup N_{G+uv}(v))\right) = i(G) > 1$. Por lo tanto concluimos que $i(G + uv) < i(G)$.

□

Corolario 3.2.2 (Inciso 3)**.** *Para toda gráfica G, tal que $G_1, G_2, ..., G_{c(G)}$ son las componentes conexas de G, se tiene que:*

$$i(G) = \prod_{j=1}^{c(G)} i(G_j).$$

Demostración. Se sigue de manera inmediata, ya que G es la unión de sus componentes conexas, y éstas son ajenas dos a dos. $\square$

Lema 3.2.2. *Si $i(K_n) = i_n$, entonces $i_n = n + 1$.*

Demostración. Sea $G = K_n$. Por la definición de conjuntos independientes, tenemos que en K_n sólo se pueden tener conjuntos independientes de cardinalidad uno y el vacío y así, tenemos que $q(G : 0) = 1$, $q(G : 1) = n$ y, por lo tanto

$$i_n = i(K_n) = q(G : 0) + q(G : 1) = 1 + n.$$

$\square$

Lema 3.2.3. *Sea K_n^c, entonces $i(K_n^c) = 2^n$.*

Demostración. Observemos que en K_n^c, se tiene que el número de conjuntos independientes es:

$$\binom{n}{0} + \binom{n}{1} + ... + \binom{n}{n}.$$

Ya que hay conjuntos independientes de cardinalidad $0 \leq k \leq n$. Por lo que basta demostrar que:

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

La demostración la haremos por inducción sobre n.

Para $n = 0$ tenemos que:

$$\binom{0}{0} = 1 = 2^0.$$

Si $n = 1$

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

Supongamos que se cumple para n, es decir que:

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

Veamos que se cumple para $n + 1$.

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

Observemos que:

- $\binom{n+1}{k} = \binom{n}{k-1} + \binom{n}{k}.$

Ya que:

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

- $\binom{n+1}{0}=\binom{n}{0}=1.$

Así, tenemos lo siguiente:

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

$\square$

3.3. Las gráficas K_n^k y su generalización K_{n_1,n_2}^k

El objetivo principal de este trabajo es dar a conocer las gráficas cuyos índices de Hosoya y Merrifield-Simmons acotan a las siguientes familias.

Sean $\mathscr{V}_{n,k}$ la colección de todas las gráficas conexas con conexidad puntual a lo más k, con $k \leq n-1$, y $\mathscr{A}_{n,k}$ la colección de todas las gráficas con conexidad lineal a lo más k, con $k \leq n-1$.

Consideramos a la gráfica completa K_{n-1}, definimos a K_n^k como la gráfica de orden n, que tiene como conjunto de vértices $V(K_n^k) = V(K_{n-1}) \cup \{v\}$, con $v \notin V(K_{n-1})$ y $A(K_n^k) = A(K_{n-1}) \cup \{vu : u \in U\}$ para cualquier $U \subseteq V(K_{n-1})$, tal que $|U| = k$. Es inmediato del corolario 2.1.1 y de la construcción que K_n^k es k-conexa y por tanto pertenece a $\mathscr{V}_{n,k}$ y a $\mathscr{A}_{n,k}$. Veamos que, si $W = (V(K_{n-1}) - U) \cup \{v\}$, entonces $K_n^k[W] \cong K_{1,n-k}^c$ y $K_n^k[U \cup \{v\}] \cong K_{k+1}$; por lo que a K_n^k la podemos obtener alternativamente de borrar de K_n las aristas de una subgráfica isomorfa a $K_{1,n-(k+1)}$, de esta última definición es claro que $K_n^k \cong K_{1,n-(k+1)}^c + K_k$.

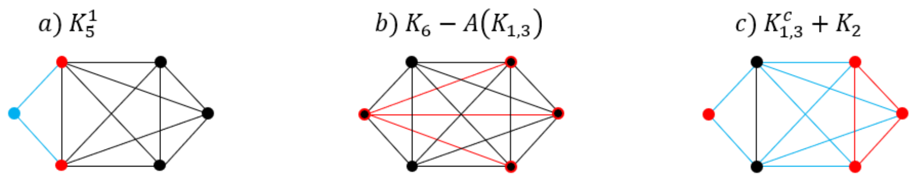
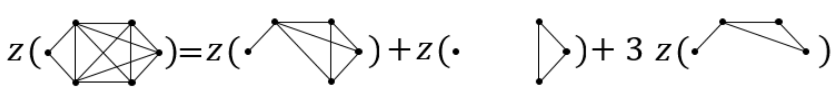


Figura 3.5: Las diferentes formas de la gráfica $K_6^2 \cong K_6 - A(K_{1,3}) \cong K_{1,3}^c + K_2$

En la figura 3.5, observamos las tres formas de obtener a la gráfica K_6^2, en el inciso a) tenemos primero a la gráfica K_5 y a un conjunto $U \subset V(K_5)$ de 2 vértices que hacemos adyacentes al vértice azul. En el inciso b) se muestra la gráfica K_6 a la cual borramos el conjunto de aristas rojas de la subgráfica $K_{1,3}$ y por último en el inciso c) $K_{1,3}^c + K_2$.

A continuación calcularemos los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons de K_6^2.

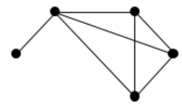
Recordemos del lema 3.1.1 que $z(G) = z(G-v) + \sum_{w \in N_G(v)} z(G - \{w,v\})$. Por lo que $z(K_6^2)$ se puede ver de la siguiente manera.



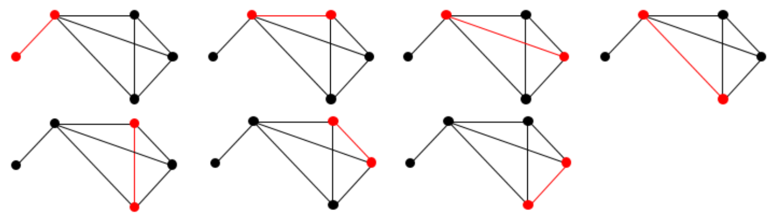
Aplicando nuevamente el lema 3.1.1 a cada uno de los sumandos obtenemos que $z(K_6^2) = 14 + 4 + 3(6) = 36$.

Veamos esto con más detalle: sean G_1, G_2 y G_3 las gráficas que resultan de aplicar el lema 3.1.1 a K_6^2. Entonces,

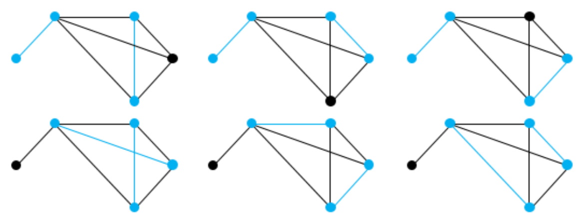
$p(G_1{:}\,0) = 1$



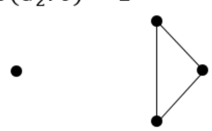
$p(G_1{:}\,1) = 7$



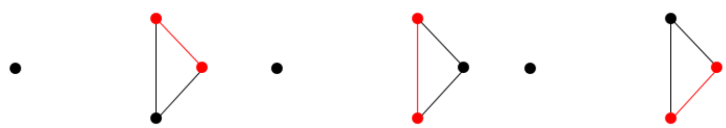
$p(G_1{:}\,2) = 6$



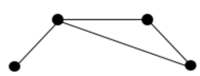
$p(G_2{:}\,0) = 1$



$p(G_2{:}\,1) = 3$

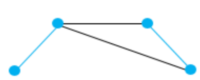


$p(G_3{:}\,0) = 1$



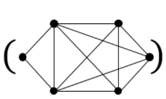
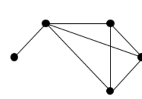
$p(G_3{:}\,1) = 4$

$p(G_3{:}\,2) = 1$



Observemos que $z(G_1) = 14$, $z(G_2) = 4$ y $z(G_3) = 6$; recordemos que $z(G_3)$ se cuenta tres veces, ya que al aplicar el lema de Hosoya, se generan tres gráficas isomorfas a G_3, así que finalmente $z(G) = 14 + 4 + 18 = 36$.

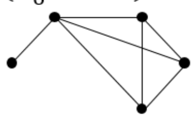
Ahora, para contar todos los conjuntos independientes de K_6^2, usaremos el lema 3.2.1 de Merrifield-Simmons; es decir, $i(G) = i(G - v) + i(G - N_G[v])$ para cualquier vértice fijo v.

$i($  $) = i($  $) + i(\emptyset)$

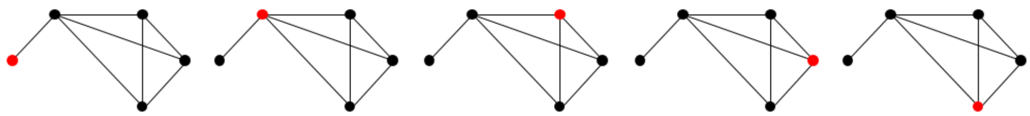
En este caso el vértice elegido es adyacente a todos, por lo que la gráfica $K_6^2 - N_{K_6^2}[v]$ es el conjunto vacío, de donde $i(\emptyset) = 1$. Por otro lado aplicando el lema 3.2.1 a $K_6^2 - v$ tenemos que $i(K_6^2 - v) = i(K_4) + i(K_3) = 5 + 4 = 9$. Así, $i(K_6^2) = 9 + 1 = 10$.

Más a detalle:

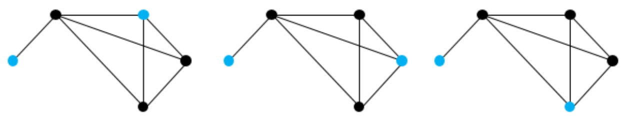
$q(K_6^2 - v\colon 0) = 1$



$q(K_6^2 - v\colon 1) = 5$



$q(K_6^2 - v\colon 2) = 3$



Por lo que finalmente $i(K_6^2 - v) = q(K_6^2 - v : 0) + q(K_6^2 - v : 1) + q(K_6^2 - v : 2) + q(\emptyset : 0) = 1 + 5 + 3 + 1 = 10$.

Recordemos que podemos ver a K_n^k de manera alternativa como $K_n^k \cong K_n - A(K_{1,n-(k+1)})$; es decir, $K_n^k \cong K_{1,n-(k+1)}^c + K_k$. De donde naturalmente podemos dar una generalización de K_n^k.

Definición 3.3.1. *Sean n, n_1, n_2, k enteros positivos, con $n \geq 3$ y $n_1, n_2, k \geq 1$, tales que $n - k = n_1 + n_2$. Definimos a la gráfica K_{n_1,n_2}^k como la gráfica que resulta de K_n al borrar las aristas de la subgráfica K_{n_1,n_2}. Formalmente:*

$$K_{n_1,n_2}^k = K_{n_1,n_2}^c + K_k.$$

Notemos que si $n_1 = 1$, entonces $n_2 = n - (k + 1)$, de donde:

$$K_{n_1,n_2}^k = K_{1,n-(k+1)}^k = K_{1,n-(k+1)}^c + K_k = K_n^k.$$

En figura 3.6, vemos dos gráficas del tipo K_{n_1,n_2}^k; en el inciso *a*) $K_{2,6}^2$ y en el inciso *b*) $K_{2,3}^3$. Observemos que las gráficas $K_{2,6}$ y $K_{2,3}$ están totalmente contenidas en K_{10} y K_8, respectivamente.

Dado que $K_{n_1,n_2}^k \cong K_{n_1,n_2}^c + K_k = (K_{n_1} \cup K_{n_2}) + K_k$, denotaremos por $V_{n_1} = V(K_{n_1})$, $V_{n_2} = V(K_{n_2})$ y $V_k = V(K_k)$. De este modo es claro que $\{V_{n_1}, V_{n_2}, V_k\}$ es una partición de $V(K_{n_1,n_2}^k)$.

De aquí que por comodidad denotaremos a los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons de K_{n_1,n_2}^k, como $z(n_1, n_2, k)$ e $i(n_1, n_2, k)$, respectivamente.

Observación 3.3.1. *Por la definición de K_{n_1,n_2}^k, es claro que $K_{n_1,n_2}^k - V_{n_1} \cong K_{n_2+k}$ y $K_{n_1,n_2}^k - V_{n_2} \cong K_{n_1+k}$, ya que todo vértice en V_k es extremo de una arista en $A(K_{n_1,n_2}^k)$, por lo*

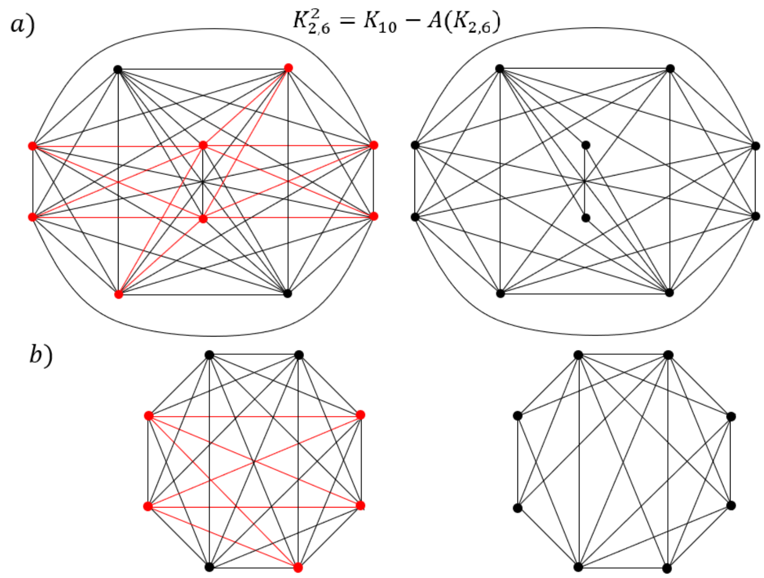


Figura 3.6: $a)$ La gráfica $K_{2,6}^2$ y $b)$ la gráfica $K_{2,3}^3$

que es adyacente a todo vértice en V_{n_i}*, con* $i = 1, 2$*. Por último vemos que* $K_{n_1,n_2}^k - w \cong K_{n_1,n_2}^{k-1}$*, si* $w \in V_k$ *y* $K_{n_1,n_2}^k - w \cong K_{n_1-1,n_2}^k$*, si* $w \in V_{n_1}$*. De aquí es fácil ver que, si* $n_1, k \geq 2$*, para* $u \in V_{n_1}$ *y* $v \in V_k$*, tenemos que* $K_{n_1,n_2}^k - \{u, v\} \cong K_{n_1-1,n_2}^{k-1}$*.*

Proposición 3.3.1. *Sean* $n, n_1, n_2, k \in \mathbb{N}$*, con* $n_2 \geq 1$*,* $n_1, k \geq 2$ *y* $n \geq 5$*, tales que* $n - k = n_1 + n_2$*, entonces:*

$$z(n_1, n_2, k) = z(n_1 - 1, n_2, k) + kz(n_1 - 1, n_2, k - 1) + (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k).$$

Demostración. Consideremos $\{V_{n_1}, V_{n_2}, V_k\}$ la partición de $V(K_{n_1,n_2}^k)$.

Sea $u \in V_{n_1}$, entonces $N_{K_{n_1,n_2}^k}(u) = V_k \cup (V_{n_1} - \{u\})$. Primero veamos el caso en el que $n_1 = 2$, sea $V_{n_1} = \{u, v\}$, es fácil ver que:

$$K_{2,n_2}^k - \{u, v\} \cong K_{n_2+k} \cong K_{n-2}.$$

Así, aplicando el lema de Hosoya 3.1.1, tenemos que:

$$\begin{aligned}
z(2, n_2, k) &= z(K_{2,n_2}^k - u) + \sum_{w \in V_k \cup \{v\}} z(K_{2,n_2}^k - \{w, u\}) \\
&= z(K_{1,n_2}^k) + \sum_{x \in V_k} z(K_{2,n_2}^k - \{x, u\}) + z(K_{2,n_2}^k - \{v, u\}) \\
&= z(K_{1,n_2}^k) + kz(K_{1,n_2}^{k-1}) + z(K_{n_2+k}) \\
&= z(1, n_2, k) + kz(1, n_2, k - 1) + z_{n_2+k}.
\end{aligned}$$

Ahora veamos para $n_1 \geq 3$. Usando la observación 3.3.1 y por el lema 3.1.1, tenemos que:

$$\begin{aligned}
z(n_1, n_2, k) &= z(K^k_{n_1,n_2}) \\
&= z(K^k_{n_1,n_2} - u) + \sum_{w \in N_{K^k_{n_1,n_2}}(u)} z(K^k_{2,n_2} - \{w, u\}) \\
&= z(K^k_{n_1,n_2} - u) + \sum_{x \in V_k} z(K^k_{n_1,n_2} - \{x, u\}) + \sum_{y \in V_{n_1} - \{u\}} z(K^k_{n_1,n_2} - \{y, u\}) \\
&= z(K^k_{n_1,n_2} - u) + \sum_{r=1}^{k} z(K^k_{n_1,n_2} - \{x_r, u\}) + \sum_{j=1}^{n_1-1} z(K^k_{n_1,n_2} - \{y_j, u\}) \\
&= z(K^k_{n_1,n_2} - u) + kz(K^{k-1}_{n_1-1,n_2}) + (n_1 - 1)z(K^k_{n_1-2,n_2}) \\
&= z(n_1 - 1, n_2, k) + kz(n_1 - 1, n_2, k - 1) + (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k).
\end{aligned}$$

□

Proposición 3.3.2. *Sean $n_1, n_2, k \in \mathbb{Z}^+$, tales que $n_1 + n_2 = n - k$, para alguna $n \geq 3$, entonces:*

$$i(n_1, n_2, k) = i(n_1 - 1, n_2, k) + n_2 + 1.$$

Demostración. Sea $\{V_{n_1}, V_{n_2}, V_k\}$ la partición de $V(K^k_{n_1,n_2})$, tal que $|V_{n_1}| = n_1$, $|V_{n_2}| = n_2$ y $|V_k| = k$, con $n_1 + n_2 + k = n$.

Consideremos $u \in V_{n_1}$, por el lema de Merrifield-Simmons, sabemos que si $G = K^k_{n_1,n_2}$, entonces:

$$i(G) = i(G - u) + i(G - N_G[u]).$$

Pero $N_{K_{n_1,n_2}}[u] = V_k \cup V_{n_1}$, así: $G - N_G[u] \cong K_{n_2}$ y $G - v \cong K^k_{n_1-1,n_2}$, lo que implica que:

$$\begin{aligned}
i(n_1, n_2, k) &= i(K^k_{n_1-1,n_2}) + i(K_{n_2}). \\
&= i(n_1 - 1, n_2, k) + n_2 + 1.
\end{aligned}$$

□

De esta demostración y tomando en cuenta a la gráfica $K^k_{n_1,n_2+1}$, con partición de $V(K^k_{n_1,n_2+1})$, $\{V_{n_1-1}, V_{n_2+1}, V_k\}$ y un $u \in V_{n_2+1}$, llegamos de la misma forma a que

$$i(n_1 - 1, n_2 + 1, k) = i(n_1 - 1, n_2, k) + n_1.$$

3.3.1. Lemas de orden para z e i de las gráficas $K^k_{n_1,n_2}$

Los lemas que a continuación se dan son importantes para aclarar las relaciones de orden que existen entre los índices topológicos de algunas gráficas.

Lema 3.3.1. *Si n_1, n_2 y k enteros positivos tales que $n_2 \geq n_1 \geq 2$, $k \geq 1$ y $n_1 + n_2 = n - k$, entonces: $z(n_1 - 1, n_2 + 1, k) > z(n_1, n_2, k)$.*

Demostración. Sean n_1, n_2 y k enteros positivos tales que $n_2 \geq n_1 \geq 2$, $k \geq 1$ y $n_1 + n_2 = n - k$.

Veamos para $k = 1$, como caso particular, y $n_2 \geq n_1 \geq 2$ enteros positivos. Sean $\{V_{n_{1-1}}, V_{n_{2+1}}, \{v\}\}$ y $\{V_{n_1}, V_{n_2}, \{u\}\}$ las particiones de $K^1_{n_1-1,n_2+1}$ y $K^1_{n_1,n_2}$, respectivamente.

Consideremos el vértice v de $K^1_{n_1-1,n_2+1}$, por el lema 3.1.1, tenemos que: $z(n_1-1,n_2+1,1)$

$$= z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - v) + \sum_{w\in N_{K^1_{n_1-1,n_2+1}}(v)} z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{w,v\})$$

$$= z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - v) + \sum_{y\in V_{n_1-1}} z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{y,v\}) + \sum_{z\in V_{n_2+1}} z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{z,v\}).$$

Es fácil ver que $K^1_{n_1-1,n_2+1} - v \cong K_{n_1-1}\cup K_{n_2+1}$, $K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{y,v\} \cong K_{n_1-2}\cup K_{n_2+1}$ y $K_{n_1-1,n_2} - \{z,v\} \cong K_{n_1-1}\cup K_{n_2}$, con $y\in V_{n_1-1}$ y $z\in V_{n_2+1}$. Así, tenemos que:

$$z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - v) + \sum_{y\in V_{n_1-1}} z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{y,v\}) + \sum_{z\in V_{n_2+1}} z(K^1_{n_1-1,n_2+1} - \{z,v\})$$

$$= z(K_{n_1-1}\cup K_{n_2+1}) + \sum_{y\in V_{n_1-1}} z(K_{n_1-2}\cup K_{n_2+1}) + \sum_{z\in V_{n_2+1}} z(K_{n_1-1}\cup K_{n_2}).$$

Finalmente:

$$\begin{aligned} z(n_1-1,n_2+1,1) &= z(K_{n_1-1})z(K_{n_2+1}) + (n_1-1)z(K_{n_1-2})z(K_{n_2+1}) + (n_2+1)z(K_{n_1-1})z(K_{n_2}) \\ &= z_{n_1-1}z_{n_2+1} + (n_1-1)z_{n_1-2}z_{n_2+1} + (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Procediendo de manera análoga para $z(n_1,n_2,1)$ y $u\in\{u\}$, tenemos que:

$$z(n_1,n_2,1) = z_{n_1}z_{n_2} + n_1 z_{n_1-1}z_{n_2} + n_2 z_{n_1}z_{n_2-1}. \tag{3.2}$$

Notemos que aplicando el lema 3.1.2 a la ecuación (3.1) y factorizando z_{n_2+1}, tenemos que:

$$\begin{aligned} z_{n_1-1}z_{n_2+1} + (n_1-1)z_{n_1-2}z_{n_2+1} + (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2} &= (z_{n_1-1} + (n_1-1)z_{n_1-2})z_{n_2+1} \\ &\quad + (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2} \\ &= z_{n_1}z_{n_2+1} + (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2}. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Por otro lado procediendo de manera análoga con la ecuación (3.2) y factorizando z_{n_1} obtenemos:

$$\begin{aligned} z_{n_1}z_{n_2} + n_1 z_{n_1-1}z_{n_2} + n_2 z_{n_1}z_{n_2-1} &= z_{n_1}(z_{n_2} + n_2 z_{n_2-1}) + n_1 z_{n_1-1}z_{n_2} \\ &= z_{n_1}z_{n_2+1} + n_1 z_{n_1-1}z_{n_2}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Así, de las ecuaciones (3.3) y (3.4) vemos que:

$$\begin{aligned} z(n_1-1,n_2+1,1) - z(n_1,n_2,1) &= z_{n_1}z_{n_2+1} + (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2} - (z_{n_1}z_{n_2+1} + n_1 z_{n_1-1}z_{n_2}) \\ &= (n_2+1)z_{n_1-1}z_{n_2} - n_1 z_{n_1-1}z_{n_2} \\ &= ((n_2+1) - n_1)z_{n_1-1}z_{n_2} > 0. \end{aligned}$$

Ahora, recordemos que $n_2 \geq n_1$, entonces $(n_2+1) - n_1 > 0$, de aquí que el lema es cierto.

Supongamos que $k \geq 2$, procedemos por inducción sobre n_1.

Si $n_1 = 2$. Dado que $K^k_{n_1-1,n_2+1} \cong K^k_{n_2+1,n_1-1}$, aplicando la proposición 3.1.1 tenemos que:

$$A = z(n_1-1,n_2+1,k) = z(n_1-1,n_2,k) + kz(n_1-1,n_2,k-1) + n_2 z(n_1-1,n_2-1,k).$$

Por otro lado, de la proposición 3.3.1 también se sigue que:

$$B = z(n_1, n_2, k) = z(n_1 - 1, n_2, k) + kz(n_1 - 1, n_2, k - 1) + (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k).$$

Así, para la diferencia diferencia $A - B = C$:

$$\begin{aligned} A - B &= z(n_1 - 1, n_2, k) + kz(n_1 - 1, n_2, k - 1) + n_2 z(n_1 - 1, n_2 - 1, k) \\ &\quad - [z(n_1 - 1, n_2, k) + kz(n_1 - 1, n_2, k - 1) + (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k)] \\ &= n_2 z(n_1 - 1, n_2 - 1, k) - (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Basta ver que:

$$C = n_2 z(n_1 - 1, n_2 - 1, k) - (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k) > 0. \tag{3.6}$$

Como $n_1 = 2$ y $n_1 + n_2 = n - k$, entonces $n_2 = n - k - 2$; además, $n_2 + k - 1 = n - 3$ y $n_2 + k - 2 = n - 4$. Y dado que $K^k_{n_1-2,n_2} \cong K_{n_2+k} \cong K_{n-2}$, entonces:

$$\begin{aligned} (n_1 - 1)z(n_1 - 2, n_2, k) &= 1 \cdot z(K_{n-2}) \\ &= z_{n-2}. \end{aligned}$$

Por la definición de z_n y como $n \geq 3$, entonces:

$$z_{n-2} = z_{n-3} + (n - 3)z_{n-4}.$$

Por otro lado, $n_2 z(n_1 - 1, n_2 - 1, k) = (n - k - 2)z(n_1 - 1, n_2 - 1, k)$ y por el lema 3.1.1, sabemos que si $u \in V_{n_1-1}$, en la gráfica $K^k_{n_1-1,n_2-1} = K^k_{1,n_2-1}$, entonces:

$$\begin{aligned} z(1, n_2 - 1, k) &= z(K^k_{1,n_2-1} - u) + \sum_{w \in N_G(u)} z(K^k_{1,n_2-1} - \{w, u\}) \\ &= z(K_{n_2 - 1^k}) + \sum_{w \in V_k} z(K^k_{1,n_2-1} - \{w, u\}) \\ &= z(K_{n_2+k-1}) + kz(K_{n_2+k-2}) \\ &= z(K_{n-3}) + kz(K_{n-4}) \\ &= z_{n-3} + kz_{n-4}. \end{aligned}$$

Por lo que:

$$\begin{aligned} C &= (n - k - 2)(z_{n-3} + kz_{n-4}) - (z_{n-3} + (n - 3)z_{n-4} \\ &= z_{n-3}(n - k - 3) + z_{n-4}(k - n + 3) \\ &= (n - k - 3)(z_{n-3} - z_{n-4}). \end{aligned}$$

Luego como $n - k = n_1 + n_2 \geq 4$ y $z_{n-3} > z_{n-4}$, entonces $n - k - 3 > 0$ y por tanto:

$$(n - k - 3)(z_{n-3} - z_{n-4}) > 0.$$

Por lo tanto $z(1, n_2 + 1, k) > z(2, n_2, k) > 0$.

Ahora, supongamos que para toda n_r, con $2 \leq n_r < n_1$ se tiene que $z(n_r - 1, n_2 + 1, k) > z(n_r, n_2, k)$. Basta demostrar que se cumple (3.6) para n_1.

Aplicando el lema de Hosoya 3.1.1 a $n_2 z(n_1-1, n_2-1, k)$, para $u \in V_{n_1-1}$, vemos que:

$$\begin{aligned}
E &= n_2 z(n_1-1, n_2-1, k) \\
&= n_2[z(K_{n_1-1,n_2-1}^k - u) + \sum_{w\in V_k \cup V_{n_1-1}-\{u\}} z(K_{n_1-1,n_2-1}^k - \{w,u\})] \\
&= n_2[z(K_{n_1-2,n_2-1}^k) + kz(K_{n_1-2,n_2-1}^{k-1}) + (n_1-2)z(K_{n_1-3,n_2-1}^k)] \\
&= n_2 z(n_1-2, n_2-1, k) + n_2 k z(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k).
\end{aligned}$$

Procediendo de manera análoga con $(n_1-1)z(n_1-2, n_2, k)$ y $v \in V_{n_2}$, tenemos que:

$$\begin{aligned}
F &= (n_1-1)z(n_1-2, n_2, k) \\
&= (n_1-1)[z(K_{n_1-2,n_2}^k - v) + \sum_{w\in V_k \cup V_{n_2}-\{v\}} z(K_{n_1-2,n_2}^k - \{w,v\})] \\
&= (n_1-1)[z(K_{n_1-2,n_2-1}^k) + kz(K_{n_1-2,n_2-1}^{k-1}) + (n_2-1)z(K_{n_1-2,n_2-2}^k)] \\
&= (n_1-1)z(n_1-2, n_2-1, k) + (n_1-1)kz(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Haciendo la diferencia $E-F$, podemos ver que:

$$\begin{aligned}
E-F &= n_2 z(n_1-2, n_2-1, k) + n_2 k z(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k) \\
&- [(n_1-1)z(n_1-2, n_2-1, k) + (n_1-1)kz(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k)].
\end{aligned}$$

Asociando y agrupando, tenemos que:

$$\begin{aligned}
E-F &= n_2 z(n_1-2, n_2-1, k) - (n_1-1)z(n_1-2, n_2-1, k) \\
&+ n_2 k z(n_1-2, n_2-1, k-1) - (n_1-1)kz(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k) - (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Así, con la diferencia de $E-F$:

$$\begin{aligned}
E-F &= (n_2-n_1+1)z(n_1-2, n_2-1, k) \\
&+ k(n_2-n_1+1)z(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k) - (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Por último, sumando $J = n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k) - (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k)$.

$$\begin{aligned}
J &= n_2(n_1-2)z(n_1-3, n_2-1, k) - (n_1-1)(n_2-1)z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&= n_2(n_1-1-1)z(n_1-3, n_2-1, k) - [(n_1-1)n_2 - (n_1-1)]z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&= [n_2(n_1-1) - n_2]z(n_1-3, n_2-1, k) - [n_2(n_1-1) - (n_1-1)]z(n_1-2, n_2-2, k) \qquad (3.7) \\
&= [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&- n_2 z(n_1-3, n_2-1, k) + (n_1-1)z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Sumando un $0 = n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) - n_2 z(n_1-2, n_2-2, k)$ a la ecuación (3.7), obtenemos que:

$$\begin{aligned}
J &= [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&+ n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) - n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&- n_2 z(n_1-3, n_2-1, k) + (n_1-1) z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&= [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&+ n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) - n_2 z(n_1-3, n_2-1, k) \\
&- n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) + (n_1-1) z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&= [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&+ n_2 z(n_1-2, n_2-2, k) - n_2 z(n_1-3, n_2-1, k) \\
&- (n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Teniendo que:

$$\begin{aligned}
J &= [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&- n_2[z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&- (n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-2, k).
\end{aligned}$$

Sustituyendo J en $E - F$:

$$\begin{aligned}
E - F &= (n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-1, k) \\
&+ k(n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ [n_2(n_1-1)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&- n_2[z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&- (n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-2, k) \\
&= (n_2-n_1+1)[z(n_1-2, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] \\
&+ k(n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-1, k-1) \\
&+ [n_2(n_1-2)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)].
\end{aligned}$$

Con la observación 3.3.2 se concluye que:

$$(n_2-n_1+1)[z(n_1-2, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] +$$

$$k(n_2-n_1+1) z(n_1-2, n_2-1, k-1) +$$

$$[n_2(n_1-2)][z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k)] > 0.$$

□

Observación 3.3.2. *Sabemos que $n_2 \geq n_1 \geq 2$ y $k \geq 2$, por lo que:*

1) $n_2 + 1 > n_1$ entonces $n_2 + 1 - n_1 > 0$ y $n_2(n_1-2) \geq 0$.

2) Es claro que $k(n_2 + 1 - n_1) > 0$.

3) $K^k_{n_1-2, n_2-1}$ contiene a $K^k_{n_1-2, n_2-2}$, por lo que $z(n_1-2, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k) > 0$.

4) Por último por hipótesis de inducción tenemos que $z(n_1-3, n_2-1, k) - z(n_1-2, n_2-2, k) > 0$.

El resultado que mostraremos a continuación, es un resultado nuevo que obtuvimos al realizar una prueba alternativa al Lema 3.3.1. En el se describe un comportamiento muy interesante de la sucesión que generan los índices de Hosoya de las gráficas completas.

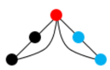
Teorema 3.3.1. *Para todo $n \geq 2$, si $z_n = z(K_n)$, entonces $z_{n+1}z_{n-1} > z_n^2$.*

Demostración. Procedemos a hacer la demostración por inducción sobre n. Sea $n = 2$, veamos que:

$$z_3 z_1 > z_2^2.$$

Veamos que $K_{2,2}^1$, $K_{2,2}^1 - v$ y $K_{2,2}^1 - \{v, u\}$, con v el vértice rojo y $u \in N_{K_{2,2}^1}(v)$ son:

$K_{2,2}^1$:



$H_1 = K_{2,2}^1 - v = K_2 \cup K_2$:

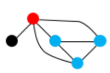
$H_2 = K_{2,2}^1 - \{v, u\} = K_1 \cup K_2$:

Así, aplicando el lema 3.1.1, resulta que:

$$z(K_{2,2}^1) = z_2 z_2 + 4 z_1 z_2 = 2 \cdot 2 + 4 \cdot 1 \cdot 2 = 12.$$

Procediendo de manera similar con $K_{1,3}^1$, tenemos $H_3 = K_{1,3}^1 - v = K_1 \cup K_3$ y si v es el vértice rojo y $u \in N_{K_{2,2}^1}(v)$, al realizar las gráficas $K_{1,3}^1 - \{v, u\}$ obtenemos $H_4 = K_3$ y $H_5 = K_1 \cup K_2$:

$K_{1,3}^1$:



$H_3 = K_1 \cup K_3$:

$H_4 = K_3$:

$H_5 = K_1 \cup K_2$:

Aplicando una vez más el lema 3.1.1, tenemos que:

$$z(K_{1,3}^1) = z_1 z_3 + z_3 + 3 z_1 z_2 = 1 \cdot 4 + 4 + 3 \cdot 1 \cdot 2 = 14.$$

En donde claramente $14 = z(K_{1,3}^1) > z(K_{2,2}^1) = 12$. Ahora, si $n = 3$, entonces $z_4 z_2 = 10 \cdot 2 = 20$ y $z_3^2 = 4^2 = 16$ y $20 > 16$.

Supongamos que para toda $3 \leq n < r$ se cumple que $z_{n+1} z_{n-1} > z_n z_n$.

Veamos que $z_{r+1} z_r > z_r z_r$. Sabemos que $z_r > 0$, para toda $r \in \mathbb{N}$, además $r \geq 4$, así, $z_{r-2} > z_{r-3} > 0$ y $r(r-2) > 0$. Notemos que $z_{r-2} < z_{r-1}$, entonces $z_{r-2}^2 < z_{r-1} z_{r-2}$ y por la hipótesis de inducción $z_{r-1} z_{r-3} > z_{r-2}^2$, lo que implica que:

$$r(r-2) z_{r-1} z_{r-3} > r(r-2) z_{r-2}^2,$$

entonces:

$$r(r-2) z_{r-1} z_{r-3} + z_{r-1} z_{r-2} > r(r-2) z_{r-2}^2 + z_{r-2} z_{r-2}$$
$$r(r-2) z_{r-1} z_{r-3} + z_{r-1} z_{r-2} > (r-1)^2 z_{r-2}^2.$$

Sumando $(r-1) z_{r-1} z_{r-2}$ en ambos lados de la desigualdad obtenemos que:

$$r(r-2) z_{r-1} z_{r-3} + z_{r-1} z_{r-2} + (r-1) z_{r-1} z_{r-2} > (r-1)^2 z_{r-2}^2 + (r-1) z_{r-1} z_{r-2}.$$

$$r(r-2) z_{r-1} z_{r-3} + r z_{r-1} z_{r-2} > (r-1)^2 z_{r-2}^2 + (r-1) z_{r-1} z_{r-2}.$$

si y sólo si

$$rz_{r-1}[(r-2)z_{r-3}+z_{r-2}] > (r-1)z_{r-2}[(r-1)z_{r-2}+z_{r-1}].$$

si y sólo si

$$rz_{r-1}z_{r-1} > (r-1)z_{r-2}z_r.$$

Sumando $z_r z_{r-1}$ en ambos lados de la desigualdad, se tiene que:

$$z_r z_{r-1} + rz_{r-1}z_{r-1} > z_r z_{r-1} + (r-1)z_{r-2}z_r.$$

Si y sólo si

$$z_{r-1}[z_r + rz_{r-1}] > z_r[z_{r-1}+(r-1)z_{r-2}].$$

Si y sólo si

$$z_{r-1}z_{r+1} > z_r z_r.$$

□

Con resultado anterior podemos demostrar de manera independiente el caso particular $k = 1$ del lema 3.3.1 en una forma más simple.

Corolario 3.3.1 (del lema 3.3.1)**.** *Si l y n son enteros positivos, con $l \geq 2$ tales que $2l = n-1$, entonces: $z(l-1, l+1, 1) > z(l, l, 1)$.*

Demostración. Sea $l \geq 2$.

1) $z(l-1, l+1, 1) = z_{l-1}z_{l+1} + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} + (l+1)z_{l-1}z_l$.

2) $z(l, l, 1) = z_l^2 + 2lz_{l-1}z_l$, entonces:

$$\begin{aligned}
z(l-1,l+1,1) - z(l,l,1) &= z_{l-1}z_{l+1} + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} + (l+1)z_{l-1}z_l - (z_l^2 + 2lz_{l-1}z_l) \\
&= z_{l-1}z_{l+1} + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} + (l+1)z_{l-1}z_l - z_l^2 - 2lz_{l-1}z_l \\
&= (z_{l-1}z_{l+1} - z_l^2) + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} + lz_{l-1}z_l \\
&+ z_{l-1}z_l - lz_{l-1}z_l - lz_{l-1}z_l \\
&= (z_{l-1}z_{l+1} - z_l^2) + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} + z_{l-1}z_l - lz_{l-1}z_l \\
&= (z_{l-1}z_{l+1} - z_l^2) + (l-1)z_{l-2}z_{l+1} - (l-1)z_{l-1}z_l \\
&= (z_{l-1}z_{l+1} - z_l^2) + (l-1)(z_{l-2}z_{l+1} - z_{l-1}z_l).
\end{aligned}$$

Pero

$$\begin{aligned}
z_{l-2}z_{l+1} &= z_{l-2}(z_l + lz_{l-1}) \\
&= z_{l-2}z_l + lz_{l-2}z_{l-1}.
\end{aligned}$$

Además

$$\begin{aligned}
z_{l-1}z_l &= z_{l-1}(z_{l-1} + (l-1)z_{l-2}) \\
&= z_{l-1}z_{l-1} + (l-1)z_{l-1}z_{l-2}.
\end{aligned}$$

Por lo que

$$\begin{aligned}
z_{l-2}z_{l+1} - z_{l-1}z_l &= z_{l-2}z_l + lz_{l-2}z_{l-1} - (z_{l-1}z_{l-1} + (l-1)z_{l-1}z_{l-2}) \\
&= z_{l-2}z_l + lz_{l-2}z_{l-1} - z_{l-1}z_{l-1} - lz_{l-1}z_{l-2} + z_{l-1}z_{l-2} \\
&= z_{l-2}z_l - z_{l-1}z_{l-1} + z_{l-1}z_{l-2}.
\end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned} z(n-1,n+1,1)-z(n,n,1) &= (z_{l-1}z_{l+1}-z_l^2)+(l-1)(z_{l-2}z_{l+1}-z_{l-1}z_l) \\ &= (z_{l-1}z_{l+1}-z_l^2)+(l-1)(z_{l-2}z_l-z_{l-1}z_{l-1}+z_{l-1}z_{l-2}) \\ &= (z_{l-1}z_{l+1}-z_l^2)+(l-1)(z_{l-2}z_l-z_{l-1}z_{l-1})+(l-1)z_{l-1}z_{l-2} \\ &> 0. \end{aligned}$$

Ya que $z_{l-1}z_{l+1}-z_l^2>0$ y $z_{l-2}z_l-z_{l-1}^2>0$ por el teorema 3.3.1 y como $l\geq 2$, tenemos que $l-1>0$ y $z_{l-1}z_{l-2}>0$. Con lo que concluimos la demostración.

□

Lema 3.3.2. *Sean n_1, n_2 y k enteros positivos tales que $n_2\geq n_1\geq 2$, $k\geq 2$ y $n_1+n_2=n-k$. Entonces $i(n_1-1,n_2+1,k)<i(n_1,n_2,k)$.*

Demostración. Sean n_1, n_2 y k enteros positivos tales que $n_2\geq n_1\geq 2$, $k\geq 2$ y $n_1+n_2=n-k$. Sea $\{V_{n_1},V_{n_2},V_k\}$ la partición que se ha descrito antes.

Por el lema 3.3.2 sabemos que $i(n_1,n_2,k)=i(n_1-1,n_2,k)+n_2+1$ y $i(n_1-1,n_2+1,k)=i(n_1-1,n_2,k)+n_1$, respectivamente. De donde tenemos que:

$$\begin{aligned} i(n_1,n_2,k)-i(n_1-1,n_2+1,k) &= i(n_1-1,n_2,k)+n_2+1-[i(n_1-1,n_2,k)+n_1] \\ &= i(n_1-1,n_2,k)+n_2+1-i(n_1-1,n_2,k)-n_1 \\ &= n_2-n_1+1>0. \end{aligned}$$

De lo que podemos concluir que $i(n_1,n_2,k)>i(n_1-1,n_2+1,k)$.

□

Lema 3.3.3. *Sea G un árbol de orden n, si G no es la estrella S_n, entonces $z(G)>z(S_n)=n$ e $i(G)<i(S_n)=2^{n-1}+1$.*

Demostración. Primero veremos que para toda S_n, se cumple que $z(S_n)=n$ y que $i(S_n)=2^{n-1}+1$.

Sea S_n una estrella de orden n, entonces por ser árbol, $m=n-1$ y todas las aristas inciden en un vértice v, con $d(v)=n-1$, por lo que existen $n-1$ apareamientos de cardinalidad 1 y el apareamiento trivial. Así, tenemos n apareamientos, entonces $z(S_n)=n$.

Demostraremos que si $G=S_n$, entonces $i(S_n)=2^{n-1}+1$. Sean $G=S_n$ una gráfica, $u\in V(S_n)$, tal que $d(u)=\Delta(G)=n-1$, esto implica que, $S_n-u=K_{n-1}^c$ y $S_n-N_{S_n}[u]=\emptyset$, ya que todo $v\in V(S_n)-\{v\}$ es vecino de u. Así, tenemos que

$$i(S_n)=i(K_{n-1}^c)+i(\emptyset).$$

Por lo que, usando el lema 3.2.3, $i(K_n^c)=2^n$

$$\begin{aligned} i(S_n) &= i(K_{n-1}^c)+i(\emptyset) \\ &= 2^{n-1}+1. \end{aligned}$$

Por lo tanto $z(S_n)=n$ e $i(S_n)=2^{n-1}+1$.

Notemos que para todo $v, w \in V(S_n)$ distintos de u, $d(v) = d(w) = 1$, $\{v, w\}$ es independiente en G y que u es el único vértice de grado máximo.

Ahora, sea G un árbol de orden n, que no es una estrella, esto implica que $n \geq 4$. Sabemos que $m_G = m_{S_n} = n - 1$, de donde tenemos que $p(G : 0) = 1$, $p(G : 1) = n - 1$ y además existen $u, v \in V(G)$, tales que $d(u, v) = 3$, es decir existe una única geodésica $T = (u, w, z, v)$ contenida en G, para algunos $w, z \in V(G)$, esto implica que existen dos aristas no adyacentes entre sí. Por lo tanto $p(G : 2) \geq 1$, de donde $z(G) \geq n + 1 > z(S_n) = n$.

Por último, sea $x \in V(G)$ tal que $\Delta(G) = d(x)$, esto implica que existe $T = (u, x, y, v)$, para algunos $u, y, v \in V(G)$ distintos de x, en caso contrario, por ser x de grado máximo, tenemos que $d(x, z) = 1$, para todo $z \in V(G)$, de donde $G = S_n$, lo que contradice la hipótesis. Por lo que existe T, así $\{y, v\}$ no es independiente en G, por lo tanto $i(G) \leq 2^{n-1} < 2^{n-1} + 1 = i(S_n)$. $\square$

3.4. Los índices máximo z y mínimo i del conjunto $\mathscr{V}_{n,k}$

Recordemos que $\mathscr{V}_{n,k}$ es el conjunto de todas la gráficas conexas con conexidad puntual a lo más k, con $1 \leq k \leq n - 1$. Demostraremos que las gráficas K_n^k, son las que tienen máximo índice de Hosoya y mínimo índice de Merrifield-Simmons en el conjunto $\mathscr{V}_{n,k}$.

Sabemos que toda $G \in \mathscr{V}_{n,k}$ tiene conexidad k, con $1 \leq k \leq n-1$, de este modo, si $k = n-1$, tenemos que $K_n \in \mathscr{V}_{n,n-1}$ y $z(K_n) \geq z(H)$, para toda $H \in \mathscr{V}_{n,n-1}$.

Ahora, sabemos que $i(K_n) = n + 1$, por lema 3.2.2. Sea $G \in \mathscr{V}_{n,k}$, tal que $G \ncong K_n$, entonces existen $u, v \in V(G)$, tales que $uv \notin A(G)$, por lo que $\{u, v\}$ es independiente en G, por lo tanto $i(G) \geq n + 2 > n + 1 = i(K_n)$, por lo tanto $i(K_n) \leq i(G)$, para toda $G \in \mathscr{V}_{n,n-1}$.

Sea $\mathscr{V}_{n,k}$, con $k = n - 2$, es decir, el conjunto de todas las gráficas conexas con conexidad a lo más $n - 2$. Notemos que $\kappa(K_{1,1}^{n-2}) = n - 2$, por lo que $K_{1,1}^{n-2} \in \mathscr{V}_{n,n-2}$ y que $K_{1,1}^{n-2} \cong K_n - uv$, para cualquier $uv \in A(K_n)$, por la definición de $K_{1,1}^{n-2}$, lo que implica que $z(K_{1,1}^{n-2}) = z(K_n - uv)$ e $i(K_{1,1}^{n-2}) = i(K_n - uv)$.

Sea $G \in \mathscr{V}_{n,n-2}$, entonces si $G \cong K_n - uv$, tenemos que $z(G) = z(K_{1,1}^{n-2})$ e $i(G) = i(K_{1,1}^{n-2})$. En caso contrario G tiene $n-1 \leq |A(G)| = \frac{n(n-1)}{2} - r \leq \frac{n(n-1)}{2} - 2$ aristas, con $2 \leq r \leq \frac{(n-1)(n-2)}{2}$. Por la definición de $\mathscr{V}_{n,n-2}$, $G \ncong K_n$.

Demostraremos por inducción sobre el número de aristas r que se borran de una gráfica completa, con $2 \leq r \leq \frac{(n-1)(n-2)}{2}$ y $|A(G)| = \frac{n(n-1)}{2} - r$.

Sea $r = 2$, entonces $|A(G)| = \frac{n(n-1)}{2} - 2 = \left(\frac{n(n-1)}{2} - 1\right) - 1 = |A(K_n - uv)| - 1 = |A(K_{1,1}^{n-2})| - 1$, es claro que $|A(K_{1,1}^{n-2})| - 1 = |A(K_{1,1}^{n-2} - xy)|$, para algún $xy \in A(K_{1,1}^{n-2})$. Consideremos $H = K_{1,1}^{n-2} - xy$, por lo que $H + xy = K_{1,1}^{n-2}$. Aplicando el corolario 3.1.1, tenemos que $z(K_{1,1}^{n-2}) = z(H + xy) > z(H) = z(K_{1,1}^{n-2} - xy)$, y por el corolario 3.2.1, se obtiene que $i(K_{1,1}^{n-2}) = i(H + xy) < i(H) = i(K_{1,1}^{n-2} - xy)$.

Supongamos que para toda $2 \leq r - 1$, se cumple que si $|A(H)| = \frac{n(n-1)}{2} - (r - 1)$, entonces $z(G) < z(K_{1,1}^{n-2})$ e $i(G) > i(K_{1,1}^{n-2})$.

Sea $G \in \mathscr{V}_{n,n-2}$, con $r = \frac{(n-1)(n-2)}{2}$. Entonces $r = \frac{(n-1)(n-2)}{2}$, de donde tenemos que $\frac{n(n-1)}{2} - r = \frac{n(n-1)}{2} - \frac{(n-1)(n-2)}{2} = n - 1$, lo que implica que G es un árbol, ya que es conexa. Así, existen $x, y \in V(G)$, tales que $xy \notin A(G)$. Consideremos $H = G + xy$, así, $H - xy = G$, entonces $|A(H)| = |A(G + xy)| = n = \left(\frac{n(n-1)}{2} - r\right) + 1 = \frac{n(n-1)}{2} - (r - 1)$.

Por hipótesis inductiva, tenemos que $z(K_{1,1}^{n-2}) > z(H)$ e $i(K_{1,1}^{n-2}) < i(H)$, por los corolarios 3.1.1 y 3.2.1 sabemos que $z(H) > z(G)$ e $i(H) < i(G)$. Por transitividad concluimos que $z(K_{1,1}^{n-2}) > z(G)$ e $i(K_{1,1}^{n-2}) < i(G)$.

Teorema 3.4.1. *Si G es una gráfica, tal que $G \in \mathscr{V}_{n,k}$ y $1 \leq k < n - 3$, entonces se cumple que $z(G) \leq z(K_n^k) = z_{n-1} + kz_{n-2}$, en donde la igualdad se da si y sólo si $G \cong K_n^k$.*

Demostración. Sean G una gráfica, con $G \in \mathscr{V}_{n,k}$, tal que para toda $H \in \mathscr{V}_{n,k}$, $z(G) \geq z(H)$ y $S \subsetneq V(G)$ un conjunto de corte mínimo en G. Supongamos sin pérdida de generalidad que $|S| = k$, con $1 \leq k \leq n - 3$. Observemos que la gráfica inducida por S, $G[S] = K_k$, de lo contrario, existen $u, v \in S$, tal que $uv \notin A(G)$, lo que implica que $G + uv \in \mathscr{V}_{n,k}$ y $z(G + uv) > z(G)$, por el corolario 3.1.1, lo cual es una contradicción al hecho de que $z(G)$ es máximo en $\mathscr{V}_{n,k}$. Por lo tanto $G[S] = K_k$.

Afirmamos que:

1. $c(G - S) = 2$.

Supongamos que no es verdadero que $c(G-S) = 2$, entonces existen al menos tres componentes conexas de $G - S$. Sean u y v dos vértices en diferentes componentes conexas de $G - S$, sea $G' = G + uv$.

Notemos que $c(G' - S) = c(G - S) - 1 \geq 2$, por lo que S es de corte en G', más aún es de corte mínimo, de lo contrario existiría $S' \subsetneq V(G') = V(G)$ con $|S'| < |S|$ tal que $c(G' - S') \geq 2$, y por tanto S' sería también de corte en G, lo que contradice la elección de S.

Así $G' \in \mathscr{V}_{n,k}$. Por el corolario 3.1.1 sabemos que $z(G') = z(G + uv) > z(G)$, lo cual es una contradicción. Por lo tanto, $c(G - S) = 2$.

2. Si G_1 y G_2 son las dos componentes conexas de $G - S$, entonces $V(G_1) \cup S$ y $V(G_2) \cup S$ son clanes en G.

Supongamos por contradicción que $V(G_1) \cup S$ o $V(G_2) \cup S$ no es clan de G; supongamos sin pérdida de generalidad que existen $u, v \in V(G_1) \cup S$, tales que $uv \notin A(G)$. Sea $G' = G + uv$. Notemos que S es de corte mínimo en G' y por tanto $G' \in \mathscr{V}_{n,k}$. Además por el corolario 3.1.1 $z(G') > z(G)$ lo que contradice la elección de G.

Por lo tanto $V(G_1) \cup S$ y $V(G_2) \cup S$ son clanes de G; más aún $V(G_1)$ y $V(G_2)$ son clanes de G pues son subconjuntos de clanes de G; y puesto que G_1 y G_2 son las componentes conexas de $G - S$, sabemos que en G no hay aristas entre G_1 y G_2; así, si $V(G_1) = n_1$ y $V(G_2) = n_2$ y dado que $|S| = k$, se tiene que $G \cong K_{n_1,n_2}^k$.

3. Se cumple que o $n_1 = 1$ o $n_2 = 1$.

De no ser así, tenemos que $n_1 \geq 2$ y $n_2 \geq 2$. Supongamos sin pérdida de generalidad que $n_2 \geq n_1 \geq 2$; por el lema 3.3.1 sabemos que $z(n_1 - 1, n_2 + 1, k) > z(n_1, n_2, k)$, con $n_1 + n_2 = n - k$, y dado que $(n_1 - 1) + (n_2 + 1) = n - k$, entonces $K_{n_1-1,n_2+1}^k \in \mathscr{V}_{n,k}$, pero por la afirmación 2, $z(n_1, n_2, k) \geq z(H)$, para toda $H \in \mathscr{V}_{n,k}$ Por lo tanto $n_1 = 1$ o $n_2 = 1$.

Finalmente de las afirmaciones 1, 2 y 3 podemos concluir que $G \cong K_{1,n-1-k}^k = K_n^k$. Sea $\{V_1, V_{n-r-1}, V_k\}$ la partición de $V(K_{1,n-1-k}^k)$ y sea v el vértice en V_1. Por el lema de Hosoya 3.1.1, sabemos que:

$$z(K_n^k) = z(K_n^k - v) + \sum_{w \in N_{K_n^k}(v)} z(K_n^k - \{w, u\}).$$

Pero $K_n^k - v \cong K_{n-1}$ y para todo $w \in N_{K_n^k}(v) = V_k$, $K_n^k - \{w, v\} \cong K_{n-2}$; así,

$$\begin{aligned} z(K_n^k) &= z(K_{n-1}) + \sum_{i=1}^{k} z(K_{n-2}) \\ &= z_{n-1} + kz_{n-2}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

□

Teorema 3.4.2. *Si G es una gráfica, tal que $G \in \mathscr{V}_{n,k}$ y $1 \leq k < n-3$, entonces se cumple que $i(G) \geq i(K_n^k) = 2n - k$, en donde la igualdad se cumple si y sólo si $G \cong K_n^k$.*

Demostración. Sean G una gráfica en $\mathscr{V}_{n,k}$, tal que $i(G) \geq i(H)$, para toda $H \in \mathscr{V}_{n,k}$ y S un conjunto de corte mínimo por vértices en G. Supongamos que $|S| = k$, con $1 \leq k \leq n-3$.

Primero, notemos que $G[S]$ es completa, de lo contrario existen $u, v \in S$ tales que $vu \notin V(G)$. Si $G' = G + uv$, se tiene que como G es subgráfica generadora de G', entonces $\kappa(G) \leq \kappa(G')$. Así, $k \leq \kappa(G')$.

Por otro lado, $G - S \cong G' - S$, lo que implica que $c(G - S) = c(G' - S)$, por lo que S es un conjunto de corte en G' y por tanto $\kappa(G') \leq k$, entonces $\kappa(G') = k$. De este modo podemos afirmar que $G' \in \mathscr{V}_{n.k}$. Además, del corolario 3.2.1, sabemos que $i(G') < i(G)$, lo que contradice la elección de G. Por lo tanto S es un clan de G.

Afirmamos que:

1. $c(G - S) = 2$.

Supongamos por el contrario que $c(G-S) \geq 3$. Sean u y v en diferentes componentes conexas de $G - S$. Por la demostración del teorema 3.4.1 sabemos que $G' = G + uv$ está en $\mathscr{V}_{n,k}$. Por el corolario 3.1.1, sabemos que $i(G') < i(G)$, lo cual es una contradicción.

Por lo tanto $G - S$ tiene exactamente dos componentes conexas.

2. Si G_1 y G_2 son las componentes conexas de $G - S$, entonces $V(G_1) \cup S$ y $V(G_2) \cup S$ son clanes de G.

Esto se sigue de manera inmediata de la demostración del teorema 3.4.1, pues de lo contrario, podríamos construir una gráfica $G' = G + uv$, para algunos $u, v \in V(G)$, de tal modo que $G' \in \mathscr{V}_{n,k}$ y sabemos que $i(G') < i(G)$, lo que contradice la elección de G.

Por lo tanto $V(G_1) \cup S$ y $V(G_2) \cup S$, $V(G_1)$, $V(G_2)$ son clanes de G. De aquí que si $|V(G_1)| = n_1$ y $|V(G_2)| = n_2$, entonces $G \cong K_{n_1,n_2}^k$.

3. Se cumple que o $n_1 = 1$ o $n_2 = 1$.

Esto se sigue del lema 3.3.2, pues si $n_1 \neq 1$ y $n_2 \neq 1$, podemos suponer sin pérdida de generalidad que $n_2 \geq n_1 \geq 2$; así $K_{n_1-1,n_2+1}^k \in \mathscr{V}_{n,k}$ y cumple que $i(n_1, n_2, k) > i(n_{1-1}, n_{2+1}, k)$, pero por hipótesis $i(n_1, n_2, k) = i(G) \leq i(H)$, para cualquier $H \in \mathscr{V}_{n,k}$.

Por lo tanto $n_1 = 1$ o $n_2 = 1$; es decir, $G \cong K_{1,n-k-1}^k \cong K_n^k$.

Por último, si $\{V_1, V_{n-k-1}, V_k\}$ es la partición de $V(K_n^k)$ y v es el único vértice en V_1, entonces, por el lema 3.2.1 de Merrifield-Simmons tenemos que:

$$i(K_n^k) = i(K_n^k - w) + i(K_n^k - N_{K_n^k}[w]).$$

Pero $K_n^k - v \cong K_{n-1}$ y $K_n^k - N[v] \cong K_{n-k-1}$.

Entonces:

$$\begin{aligned} i(K_n^k) &= i(K_{n-1}) + i(K_{n-k-1}) \\ &= n + (n-k) \\ &= 2n - k. \end{aligned} \tag{3.9}$$

□

Corolario 3.4.1. *Para cualquier $H \in \mathscr{V}_{n,k}$:*

1) $z(H) \leq z_{n-1} + kz_{n-2}$

2) $2n - k \leq i(H)$.

3.4.1. Algunos resultados inmediatos de z máximo e i mínimo en $\mathscr{V}_{n,k}$

Hasta el momento hemos demostrado que para cualquier gráfica $G \in \mathscr{V}_{n,k}$, $z(G) \leq z(K_n^k)$ e $i(G) \geq i(K_n^k)$; es decir, los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons de K_n^k son máximo y mínimo, respecto de cualquier gráfica conexa de orden n, con conexidad puntual k. La pregunta ahora es, ¿qué gráficas maximizan y minimizan los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons, respectivamente en $\mathscr{A}_{n,k}$? En esta sección daremos respuesta a esa pregunta.

Observación 3.4.1. *Es fácil ver que $K_n^k \in \mathscr{A}_{n,k}$. Recordemos que K_n^k se puede ver como $(K_k \cup K_{n-k-1}) + K_1$, entonces si S es el conjunto de aristas que van de K_k a K_1, es claro que $K_n^k - S$ es no conexa, así que $\lambda(K_{n-k}) \leq k$.*

Teorema 3.4.3. *Para cualquier gráfica en $G \in \mathscr{A}_{n,k}$:*

1) $z(G) \leq z(K_n^k)$.

2) $i(K_n^k) \leq i(G)$.

Demostración. De la observación 3.4.1, sabemos que $K_n^k \in \mathscr{A}_{n,k}$.

Basta demostrar que $\mathscr{A}_{n,k} \subset \mathscr{V}_{n,k}$.

Sea $G \in \mathscr{A}_{n,k}$, por definición, G es una gráfica conexa de orden n, tal que $\lambda(G) \leq k$, para alguna $1 \leq k \leq n-1$. Pero por el teorema 2.1.1 sabemos que $\kappa(G) \leq \lambda(G)$, así, $\kappa(G) \leq k$ y por lo tanto $G \in \mathscr{V}_{n,k}$ y de los teoremas 3.4.1 y 3.4.2 se sigue el resultado. □

Ahora, daremos otro teorema que muestra que los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons de S_n también son cotas en los conjuntos $\mathscr{V}_{n,k}$ y $\mathscr{A}_{n,k}$.

Teorema 3.4.4. *Para cualquier gráfica $G \in \mathscr{V}_{n,k}$, se cumple que:*

1) $z(S_n) \leq z(G)$ *y*

2) $i(G) \leq i(S_n)$

Demostración. Primero vemos que $S_n \in \mathscr{A}_{n,k} \subseteq \mathscr{V}_{n,k}$.

Por definición de S_n, sabemos que $\kappa(S_n) = \lambda(S_n) = k$, por lo que para toda $1 \leq k \leq n-1$, así $S_n \in \mathscr{A}_{n,n}$.

Sea $G \in \mathscr{V}_{n,k}$. Procederemos por inducción sobre $m = |A(G)|$.

Si $m = n-1$, entonces G es un árbol y por el lema 3.3.3 sabemos que:

$$n = z(S_n) \leq z(G) \text{ e } i(G) \leq i(S_n) = 2^{n-1} + 1.$$

Supongamos que para toda gráfica $G' \in \mathscr{V}_{n,k}$ de tamaño $m \geq n-1$ se cumple que:

$$n = z(S_n) \leq z(G') \text{ e } i(G') \leq i(S_n) = 2^{n-1} + 1.$$

Sea $G \in \mathscr{V}_{n,k}$ de tamaño $m+1 \geq n$, entonces G posee un ciclo, consideremos a $uv \in A(G)$, tal que uv es cíclica, entonces $G' = G - uv$ es conexa de orden n. Además $\kappa(G') \leq \kappa(G) \leq k$, por lo que $G' \in \mathscr{V}_{n,k}$ y por lo tanto G' cumple la hipótesis inductiva.

Por el corolario 3.1.1 se tiene que:

$$z(G') < z(G' + uv) = z(G)$$

y por el corolario 3.2.1 sabemos que:

$$i(G) = i(G' + uv) < i(G).$$

Así:

$$z(S_n) \leq z(G') < z(G' + uv) = z(G).$$
$$i(G) = i(G' + uv) < i(G) \leq i(S_n).$$

Observación: Si G es conexa y A es un árbol generador de G, entonces:

$$z(A) \leq z(G) \text{ e } i(G) \leq i(A).$$

Ahora consideremos $G \in \mathscr{V}_{n,k}$, tal que $z(G) = n$, como G es conexa, entonces $m \geq n-1$, además para toda gráfica G, $z(G) \geq m+1$, por lo que $z(G) = n$ si y sólo si $m = n-1$, por lo tanto G es árbol y por el teorema 3.3.3 sabemos que para todo árbol A, tal que $A \neq G$ $n = z(S_n) < z(A)$; así que $G = S_n$.

Luego, si $i(G) = 2^{n-1} + 1$, y suponemos que $G \neq S_n$, dado que G es conexa, entonces G posee un árbol generador A y del teorema 3.3.3 sabemos que $i(A) < (S_n) = 2^{n-1} + 1$ si y sólo si $A \neq S_n$. Ademas de la observación anterior se tiene que $i(G) \leq i(A)$, así que $i(G) < i(S_n) = 2^{n-1} + 1$ por lo tanto $G = S_n$, lo cual es una contradicción.

□

Corolario 3.4.2. *Para toda gráfica $G \in \mathscr{A}_{n,k}$,*

1) $n = z(S_n) \leq z(G)$ y

2) $i(G) \leq i(S_n) = 2^{n-1} + 1$.

En la figura 3.7, podemos ver los índices máximos y mínimos de Hosoya y de Merrifield-Simmons para el conjunto $\mathscr{V}_{5,2}$, recordemos que son las mismas cotas que las del conjunto $\mathscr{A}_{5,2}$.

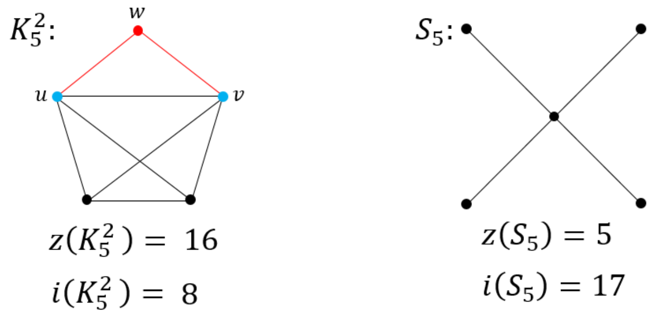


Figura 3.7: Cotas de $\mathscr{V}_{5,2}$

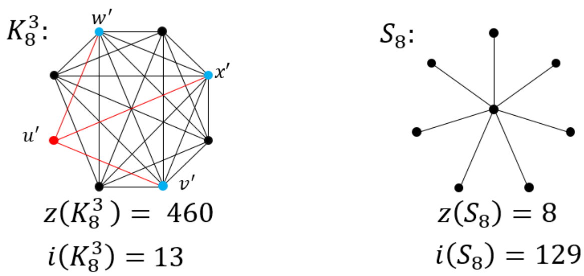


Figura 3.8: Cotas de $\mathscr{V}_{8,3}$

i) $z(K_5^2) = z_4 + 2z_3 = 10 + 2(4) = 18$.

ii) $i(S_5) = 2^4 + 1 = 17$.

iii) $z(S_5) = 5$.

iv) $i(K_5^2) = 2(5) - 2 = 10 - 2 = 8$.

En la figura 3.7 y la figura 3.8 vemos a K_1 en rojo, que se hace adyacente a dos vértices (azules) de K_4 formando K_5^2 (figura 3.7) y a tres vértices (azules) de K_7, para obtener K_8^3 (figura 3.8). Por último, en ambas figuras podemos ver que se pueden utilizar los resultados que se han trabajado en este texto.

i $z(K_8^3) = z_7 + 3z_6 = z_6 + 6z_5 + 3(z_5 + 5z_4) = z_5 + 5z_4 + 9(z_4 + 4z_3) + 15z_4 = z_4 + 4z_3 + 29z_4 + 36z_3 = 30z_4 + 40z_3 = 30(10) + 40(4) = 300 + 160 = 460$.

ii $i(S_8) = 2^7 + 1 = 129$.

iii $k(S_8) = 8$.

iv $i(K_8^3) = 2(8) - 3 = 16 - 3 = 13$.

Capítulo 4

Aplicaciones de los índices de Hosoya y Merrifiel-Simmons en el área química

La Química Combinatoria es una rama de la Química, que se encarga de predecir la formación, estructura, estabilidad, utilidad y propiedades fisicoquímicas de compuestos químicos con base en los compuestos ya conocidos, llamados en este contexto ***biblioteca química***. La denominación de Combinatoria surge de emplear al mismo tiempo dicha biblioteca química en conjunto con métodos computacionales y matemáticos para predecir la síntesis de nuevos compuestos químicos, principalmente orgánicos.

En general, en la Química Combinatoria los compuestos químicos se representan con gráficas simples, donde los átomos de los elementos son representados como vértices y el enlace químico entre dos átomos es asociado a una arista. En la Química Orgánica, los hidrocarburos se forman por cadenas de carbonos lineales o ramificadas, éstas se deben a que el carbono es tetravalente (tiene la capacidad de formar hasta cuatro enlaces) y puede generar cadenas muy largas de carbonos consecutivos. En este sentido las gráficas asociadas a los compuestos orgánicos son diferentes a las de los compuestos químicos en general, ya que en ellas los vértices sólo representan átomos de carbono y las aristas representan sólo enlaces carbono carbono.

Dentro de la Química, los compuestos orgánicos se agrupan por el tipo de enlace entre los átomos de carbono. Por ejemplo los alcanos presentan enlaces sencillos carbono-carbono en toda su estructura, mientras que los alquenos y alquinos presentan al menos un enlace doble y triple, respectivamente. Los enlaces dobles y triples presentan variaciones en la cantidad de energía necesaria para romper o formar nuevos enlaces, respecto al enlace sencillo, por lo que se toman otros criterios para asignar una gráfica a estos compuestos.

Otro compuesto al que se le puede asignar una gráfica simple es el benceno, debido a que posee tres enlaces "dobles" resonantes, es decir, son temporales y giran periódicamente, esto genera que la cantidad de energía necesaria para romper cualquiera de sus enlaces sea la misma para cualquier parte de la estructura, por lo que se representa como el ciclo C_6, como si el benceno tuviera enlaces sencillos. En este trabajo sólo mencionaremos los índices de Hosoya y Merrified-Simmons de compuestos con enlaces sencillos.

En la tabla 4.1, se muestra la fórmula química desarrollada y la gráfica asociada de los primeros seis alcanos, donde se puede ver que los vértices de la gráfica asociada representan cada uno de los átomos de carbono. Los alcanos simples se asocian a trayectorias P_n.

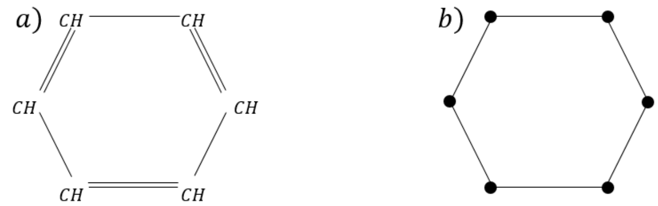
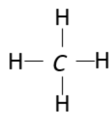
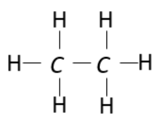
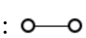
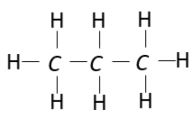
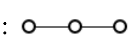
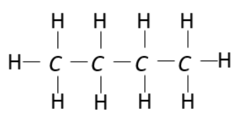
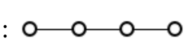
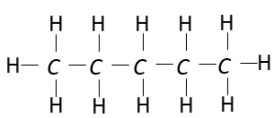
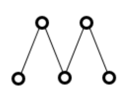
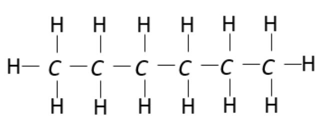
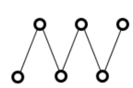


Figura 4.1: a) Molécula del benceno, enlaces dobles resonantes, b) Gráfica asociada C_6

Tabla 4.1:

Algunos alcanos, su fórmula química, su representación desarrollada y la gráfica asociada.

Compuesto	Fórmula desarrollada	Gráfica
Metano (CH_4)		P_1 : 
Etano (C_2H_6)		P_2 : 
Propano (C_3H_8)		P_3 : 
Butano (C_4H_{10})		P_4 : 
Pentano (C_5H_{12})		P_5 : 
Hexano (C_6H_{14})		P_6 : 

4.0.1. Índices de Hosoya y Merrifield-Simmons de algunos alcanos

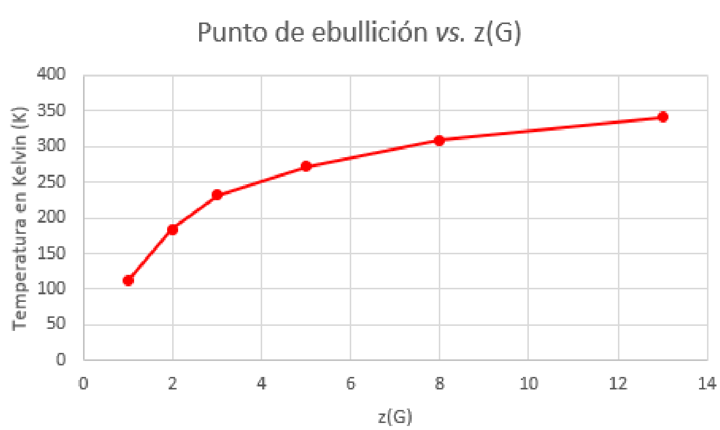
Los ejemplos que veremos en este trabajo, son aquellos que se fijan en la relación que existe entre los índices de Hosoya y de Merrifiel-Simmons de las gráficas asociadas a los alcanos e hidrocarburos no saturados con sus puntos de ebullición. En la siguiente tabla vemos la relación del indice de Hosoya $z(P_n)$ y el punto de ebullición de los primeros seis alcanos.

Tabla 4.2:

La relación entre $z(P_n)$ y los puntos de ebullición de los alcanos

Trayectoria	$p(G:0)$	$p(G:1)$	$p(G:2)$	$p(G:3)$	$z(P_n)$	*p.e. (K)*
$P_1 : CH_4$	1				1	111.45
$P_2 : C_2H_6$	1	1			2	184.55
$P_3 : C_3H_8$	1	2			3	231.05
$P_4 : C_4H_{10}$	1	3	1		5	272.65
$P_5 : C_5H_{12}$	1	4	3		8	309.25
$P_1 : C_6H_{14}$	1	5	6	1	13	341.85

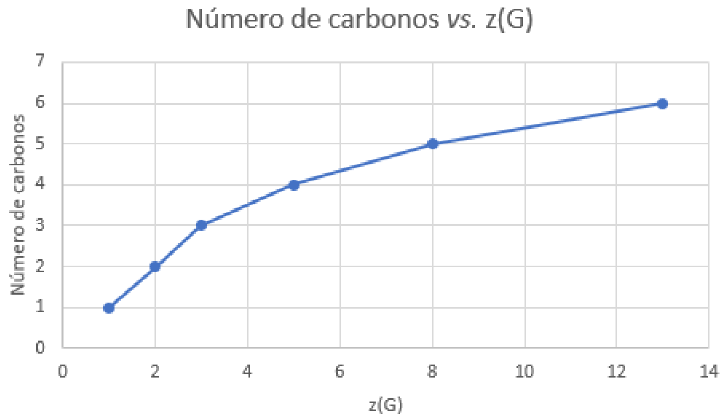
Así mismo el comportamiento del punto de ebullición respecto del índice de Hosoya se muestra en la siguiente gráfica:



Gráfica 4.1: Comportamiento del Punto de ebullición *p.e.* respecto a $z(P_n)$

Se observa que cuando aumenta $z(G)$, aumenta el punto de ebullición, lo que da la posibilidad de encontrar una regla de proporcionalidad directa entre el número de apareamientos de una trayectoria P_n y el punto de ebullición del alcano asociado.

La siguiente gráfica muestra la relación entre $z(G)$ y el número de carbonos.



Gráfica 4.2: Relación del número de carbonos *vs.* $z(P_n)$

De la misma manera el número de carbonos aparenta ser una función creciente de $z(G)$.

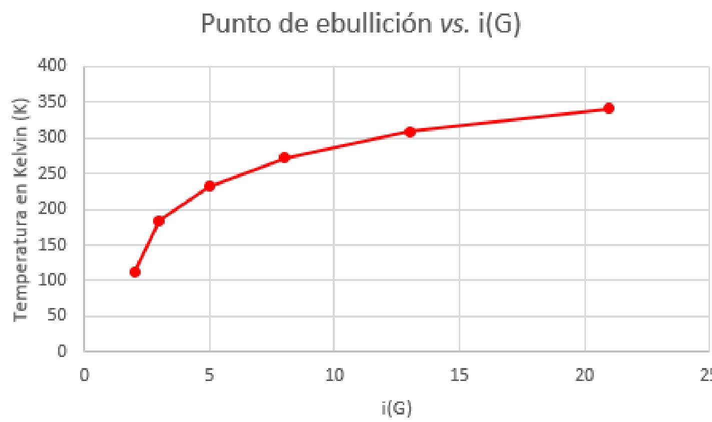
Ahora observemos el comportamiento de algunos alcanos respecto al índice de Merrifield-Simmons

Tabla 4.3:

Relación entre $i(P_n)$ y los puntos de ebullición de los alcanos.

Trayectoria	$q(G:0)$	$q(G:1)$	$q(G:2)$	$q(G:3)$	$i(P_n)$	*p.e. (K)*
$P_1 : CH_4$	1	1			2	111.45
$P_2 : C_2H_6$	1	2			3	184.55
$P_3 : C_3H_8$	1	3	1		5	231.05
$P_4 : C_4H_{10}$	1	4	3		8	272.65
$P_5 : C_5H_{12}$	1	5	6	1	13	309.25
$P_1 : C_6H_{14}$	1	6	10	4	21	341.85

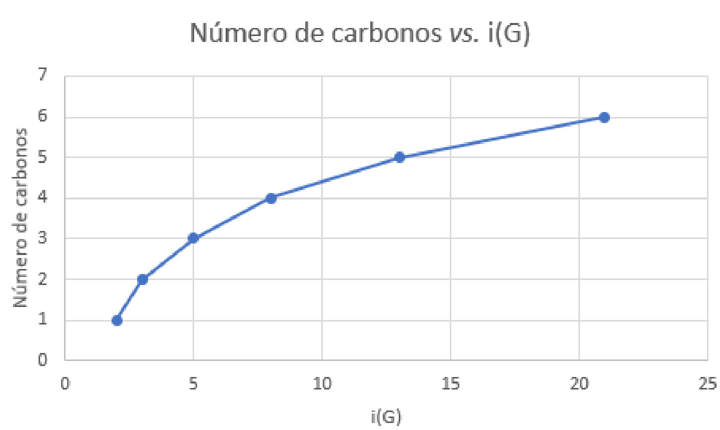
Al hacer la gráfica de la relación entre los puntos de ebullición y el índice de Merrifield-Simmons, obtenemos:



Gráfica 4.3: Comportamiento del Punto de ebullición *p.e.* respecto a $i(P_n)$

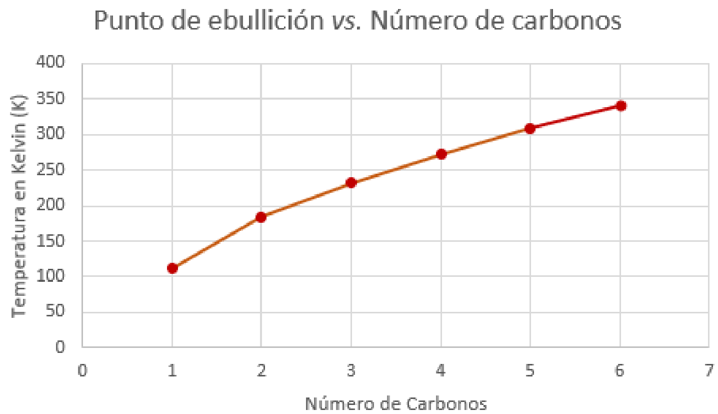
Analizando el comportamiento de las gráficas anteriores, se puede decir con cierta certidumbre que la gráfica que relaciona al número de carbonos con el índice de Merrifield-Simmons es similar a las gráficas anteriores, lo que nos indica que el punto de ebullición y el número de carbonos de los alcanos cuya fórmula general es C_nH_{2n+2}, modelados por las trayectorias P_n, tienen funciones crecientes con respecto a los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons.

El comportamiento del índice de Merrifield-Simmons respecto del número de carbonos se muestra en la siguiente gráfica.



Gráfica 4.4: Relación $i(P_n)$ *vs.* Número de carbonos

La grafica 4.4 sí presenta un comportamiento parecido a las anteriores como se había predicho, de donde, podemos conjeturar que entre el número de carbonos y el punto de ebullición existe una función creciente. Lo cual se muestra en la siguiente gráfica:



Gráfica 4.5: Comportamiento del punto de ebullición *p.e.* respecto al número de carbonos

En la gráfica 4.5 es claro que la relación entre las variables físicas es también una función creciente. Notemos que el cambio de la pendiente en la curva es muy suave, lo cual explica la gran similitud en las relaciones anteriores ya que el comportamiento de gráfica 4.5 es casi lineal y creciente.

4.0.2. Los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons de los isómeros

Los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons de las trayectorias están relacionados de manera directa con los números de Fibonacci, recordando que la sucesión de Fibonacci está dada por $0, 1, 1, 2, 3, ..., \mathscr{F}_n$, en donde el n-ésimo término está dado por $\mathscr{F}_n = \mathscr{F}_{n-1} + \mathscr{F}_{n-2}$.

Notemos que si $v \in V(P_n)$, tal que $d(v) = 1$, entonces $N_{P_n}(v) = \{u\}$ y $= N_{P_n}[v] = \{u, v\}$ para algún $u \in V(P_n)$, además $P_n - v \cong P_{n-1}$ y $P_n - \{v, u\} \cong P_{n-2}$.

Proposición 4.0.1. *Sea P_n una trayectoria de orden n, entonces:*

$$z(P_n) = \mathscr{F}_{n+1}$$

e

$$i(P_n) = \mathscr{F}_{n+2}.$$

Para $n \in \mathbb{N}$ y $\mathscr{F}_{n+1}$, $\mathscr{F}_{n+2}$ números en la sucesión de Fibonacci.

Demostración. Haremos la demostración por inducción sobre n.

Si $n = 1$, entonces $z(P_1) = 1 = \mathscr{F}_2$ e $i(P_1) = 2 = \mathscr{F}_3$.

Si $n = 2$, entonces $z(P_2) = 2 = \mathscr{F}_3$ e $i(P_2) = 3 = \mathscr{F}_4$.

Supongamos que para toda $m < n$, tenemos que $z(P_m) = \mathscr{F}_{m+1}$.

Sean P_n la trayectoria de orden n y $v \in V(P_n)$, con $d(v) = 1$, entonces aplicando el Lema de Hosoya 3.1.1, tenemos:

$$\begin{aligned} z(P_n) &= z(P_n - v) + \sum_{w \in N_{P_n}(v)} z(P_n - \{w, v\}) \\ &= z(P_{n-1}) + z(P_{n-2}). \end{aligned}$$

Por hipótesis de inducción tenemos que $z(P_{n-1})+z(P_{n-2}) = \mathscr{F}_n + \mathscr{F}_{n-1} = \mathscr{F}_{n+1}$. Por lo que:

$$z(P_n) = \mathcal{F}_{n+1}.$$

Por último supongamos que para toda $m < n$, se tiene que $i(P_m) = \mathscr{F}_{m+2}$. Sean P_n la trayectoria de orden n y $v \in V(P_n)$, con $d(v) = 1$, entonces por el lema de Merrifield-Simmons 3.1.1:

$$\begin{aligned} i(P_n) &= i(P_n - v) + i(P_n - N_{P_n}[v]) \\ &= i(P_{n-1}) + i(P_{n-2}). \end{aligned}$$

Sabemos por hipótesis de inducción que $i(P_{n-1}) + i(P_{n-2}) = \mathscr{F}_{n+1} + \mathscr{F}_n = \mathscr{F}_{n+2}$. Por lo tanto:

$$i(P_n) = \mathcal{F}_{n+2}.$$

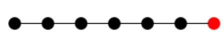
□

Finalmente, mostraremos la relación que existe entre los puntos de ebullición y los isómeros de un mismo alcano, recordando que los isómeros son compuestos con la misma fórmula química condensada, pero con diferencias en el arreglo espacial de sus átomos, lo cual modifica las propiedades fisicoquímicas entre ellos. Por ejemplo, el heptano, cuya fórmula condensada es C_7H_{16} y presenta nueve diferentes isómeros que se muestran a continuación.

Ordenaremos a los isómeros en forma decreciente de sus índices de Hosoya y Merrifield-Simmons. Para obtener dichos índices utilizaremos en cada uno de los isómeros del heptano, aplicando los lemas 3.1.1 y 3.2.1 a cada isómero. Considere las gráficas: 1) la que resulta de borrar el vértice rojo, 2) las que se obtienen de borrar el vértice rojo y uno a uno sus vecinos y 3) por último la que se obtiene de borrar la vecindad cerrada del vértice rojo.

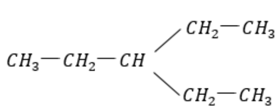
Heptano *Gráfica asociada P_7.*

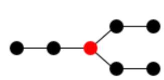
$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$



$z(P_7) = \mathscr{F}_8 = 21$ e $i(P_7) = \mathscr{F}_9 = 34$, punto de ebullición 371.55 K.

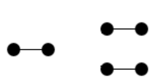
2–Etil–pentano *Gráfica asociada G_1:*

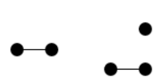




Sean $H_1 = G_1 - v$, $H_2 = G_1 - \{u, v\}$ y $H_3 = G_1 - N_{G_1}[v]$ con v el vértice rojo y $u \in N_{G_1}(v)$, obtenemos:

$H_1 = P_2 \cup P_2 \cup P_2$: $H_2 = P_1 \cup P_2 \cup P_2$: $H_3 = P_1 \cup P_1 \cup P_1$:





Recordando que para cada vecino u de v, $G_1 - \{u, v\}$ genera una gráfica isomorfa a H_2, tenemos que:

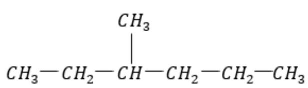
$$\begin{aligned} z(G_1) &= z(G_1 - v) + \sum_{w \in N_{G_1}(v)} z(G_1 - \{w, v\}) \\ &= z(H_1) + 3z(H_2) \\ &= z(P_2)^3 + 3z(P_1)z(P_2)^2 \\ &= (2)^3 + 3 \cdot 1 \cdot (2)^2 \\ &= 20. \end{aligned}$$

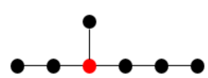
Para obtener $i(G_1)$, hacemos:

$$\begin{aligned} i(G_1) &= i(G_1 - v) + i(G_1 - N_{G_1}[v]) \\ &= i(H_1) + i(H_3) \\ &= i(P_2)^3 + i(P_1)^3 \\ &= (3)^3 + (2)^3 \\ &= 35. \end{aligned}$$

Por lo que $z(G_1) = 20$, $i(G_1) = 35$ y su punto de ebullición es 366.55 K.

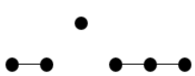
3–Metil–hexano *Gráfica asociada* G_2:

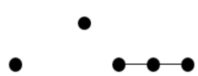




A continuación se presentan las gráficas $H_1 = G_2 - v$, $H_2 = G_2 - \{u, v\}$, $H_3 = G_2 - \{u, v\}$, $H_4 = G_2 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_2}(v)$ y $H_5 = G_2 - N_{G_2}[v]$. Notemos que $H_2 \ncong H_3$, $H_2 \ncong H_4$ y $H_3 \ncong H_4$.

$H_1 = P_1 \cup P_2 \cup P_3$: $H_2 = P_1 \cup P_1 \cup P_3$: $H_3 = P_1 \cup P_2 \cup P_2$:





$H_4 = P_2 \cup P_3$: $H_5 = P_1 \cup P_2$:

Por lo que:

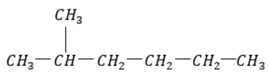
$$\begin{aligned} z(G_2) &= z(G_2 - v) + \sum_{w \in N_{G_2}(v)} z(G_2 - \{w, v\}) \\ &= z(H_1) + z(H_2) + z(H_3) + z(H_4) \\ &= z(P_1)z(P_2)z(P_3) + z(P_1)^2 z(P_3) + z(P_1)z(P_2)^2 + z(P_2)z(P_3) \\ &= 1 \cdot 2 \cdot 3 + 1^2 \cdot 3 + 1 \cdot 2^2 + 2 \cdot 3 \\ &= 19. \end{aligned}$$

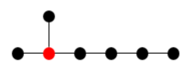
E

$$\begin{aligned} i(G_2) &= i(G_2 - v) + i(G_2 - N_{G_2}[v]) \\ &= i(H_1) + i(H_5) \\ &= i(P_1)i(P_2)i(P_3) + i(P_1)i(P_2) \\ &= 2 \cdot 3 \cdot 5 + 2 \cdot 3 \\ &= 36. \end{aligned}$$

De donde tenemos que $z(G_2) = 19$, $i(G_2) = 36$ y su punto de ebullición es $365.05\ K$.

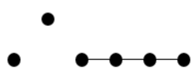
2–Metil–hexano *Gráfica asociada* G_3:



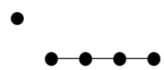


Sean $H_1 = G_3 - v$, $H_2 = G_3 - \{u, v\}$, $H_3 = G_3 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_3}(v)$ y $H_4 = G_3 - N_{G_3}[v]$. Notemos que $H_2 \ncong H_3$.

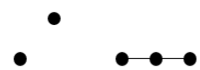
$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup P_4$:



$H_2 = P_1 \cup P_4$:



$H_3 = P_1 \cup P_1 \cup P_3$:



$H_4 = P_3$:

Tomemos en cuenta que al hacer G_3 menos $\{v, u\}$, con u vecino de v, se obtienen dos gráficas isomorfas a H_2.

Así, tenemos que:

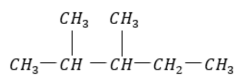
$$\begin{aligned} z(G_3) &= z(G_3 - v) + \sum_{w \in N_{G_3}(v)} z(G_3 - \{w, v\}) \\ &= z(H_1) + 2z(H_2) + z(H_3) \\ &= z(P_1)^2 z(P_4) + 2z(P_1)z(P_4) + z(P_1)^2 z(P_3) \\ &= 1^2 \cdot 5 + 2 \cdot 1 \cdot 5 + 1^2 \cdot 3 \\ &= 18. \end{aligned}$$

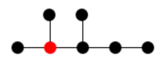
E

$$\begin{aligned} i(G_3) &= i(G_3 - v) + i(G_3 - N_{G_3}[v]) \\ &= i(H_1) + i(H_4) \\ &= i(P_1)^2 i(P_4) + i(P_3) \\ &= 2^2 \cdot 8 + 5 \\ &= 37. \end{aligned}$$

De donde tenemos que $z(G_3) = 18$, $i(G_3) = 37$ y su punto de ebullición es $363.15\ K$.

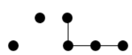
2,3–Dimetil–pentano *Gráfica asociada G_4:*



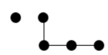


Sean: $H_1 = G_4 - v$, $H_2 = G_4 - \{u, v\}$, $H_3 = G_4 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_4}(v)$ y $H_4 = G_3 - N_{G_4}[v]$. Notemos que $H_2 \ncong H_3$. Análogamente, tenemos que al hacer $G_4 - \{v, u\}$, se tiene dos gráficas isomorfas a H_2.

$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup P_4$:

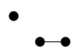


$H_2 = P_1 \cup P_4$:



$H_3 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_2$:

$H_4 = P_1 \cup P_2$:



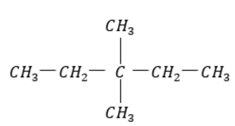
$$\begin{aligned}
z(G_4) &= z(G_4 - v) + \sum_{w \in N_{G_4}(v)} z(G_4 - \{w, v\}) \\
&= z(H_1) + 2z(H_2) + z(H_3) \\
&= z(P_1)^2 z(P_4) + 2z(P_1)z(P_4) + z(P_1)^3 z(P_2) \\
&= 1^2 \cdot 5 + 2 \cdot 1 \cdot 5 + 1^3 \cdot 2 \\
&= 17.
\end{aligned}$$

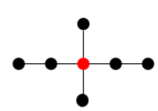
E

$$\begin{aligned}
i(G_4) &= i(G_4 - v) + i(G_4 - N_{G_4}[v]) \\
&= i(H_1) + i(H_4) \\
&= 1(P_1)^2 i(P_4) + i(P_1)i(P_2) \\
&= 2^2 \cdot 8 + 2 \cdot 3 \\
&= 38.
\end{aligned}$$

Por lo que $z(G_4) = 17$, $i(G_4) = 38$ y su punto de ebullición es $362.85\ K$.

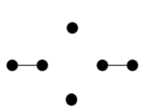
3,3–Dimetil–pentano *Gráfica asociada G_5:*



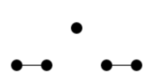


Procediendo de la misma manera. Sean $H_1 = G_5 - v$, $H_2 = G_5 - \{u, v\}$, $H_3 = G_5 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_5}(v)$ y $H_4 = G_5 - N_{G_5}[v]$. Con $H_2 \ncong H_3$, y dos casos de isomorfismos con H_2 y dos para H_3 de la gráfica $G_5 - \{v, u\}$.

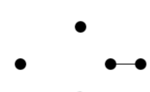
$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup P_2 \cup P_2$:



$H_2 = P_1 \cup P_2 \cup P_2$:



$H_3 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_2$:



$H_4 = P_1 \cup P_1$:

De donde, tenemos que:

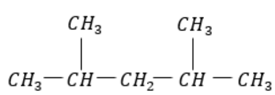
$$\begin{aligned}
z(G_5) &= z(G_5 - v) + \sum_{w \in N_{G_5}(v)} z(G_5 - \{w, v\}) \\
&= z(H_1) + 2z(H_2) + z(H_3) \\
&= z(P_1)^2 z(P_2)^2 + 2z(P_1)z(P_2)^2 + 2z(P_1)^3 z(P_2) \\
&= 1^2 \cdot 2^2 + 2 \cdot 1 \cdot 2^2 + 2 \cdot 1^3 \cdot 2 \\
&= 16.
\end{aligned}$$

E

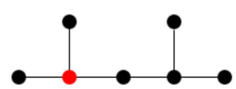
$$\begin{aligned}
i(G_5) &= i(G_5 - v) + i(G_5 - N_{G_5}[v]) \\
&= i(H_1) + i(H_4) \\
&= i(P_1)^2 i(P_2)^2 + i(P_1)^2 \\
&= 2^2 \cdot 3^2 + 2^2 \\
&= 40.
\end{aligned}$$

Por lo tanto $z(G_5) = 16$, $i(G_5) = 40$ y su punto de ebullición es 359.15 K.

2,4−Dimetil−pentano

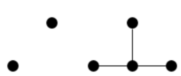


Gráfica asociada G_6:



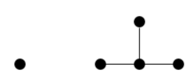
Considerando a las gráficas $H_1 = G_6 - v$, $H_2 = G_6 - \{u, v\}$, $H_3 = G_6 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_6}(v)$ y $H_4 = G_6 - N_{G_6}[v]$. Observemos que una vez más $H_2 \ncong H_3$ y que en este caso hay dos gráficas isomorfas a H_3.

$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup S_4$:

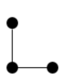


$H_2 = P_1 \cup P_1 \cup P_2$:

$H_3 = P_1 \cup S_4$:



$H_4 = P_3$:



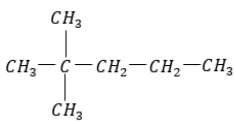
$$\begin{aligned}
z(G_6) &= z(G_6 - v) + \sum_{w \in N_{G_6}(v)} z(G_6 - \{w, v\}) \\
&= z(H_1) + 2z(H_2) + z(H_3) \\
&= z(P_1)^2 z(S_4) + z(P_1)^2 z(P_3) + 2z(P_1)z(S_4) \\
&= 1^2 \cdot 4 + 1^2 \cdot 3 + 2 \cdot 1 \cdot 4 \\
&= 15.
\end{aligned}$$

E

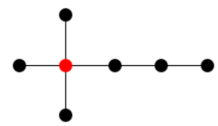
$$\begin{aligned} i(G_6) &= i(G_6 - v) + i(G_6 - N_{G_6}[v]) \\ &= i(H_1) + i(H_4) \\ &= i(P_1)^2 i(S_4) + i(P_3) \\ &= 2^2 \cdot 9 + 5 \\ &= 41. \end{aligned}$$

Vemos que $z(G_6) = 15$, $i(G_6) = 41$ y su punto de ebullición es 353.65.

2,2–Dimetil–pentano

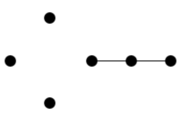


Gráfica asociada G_7:

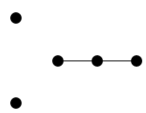


Sean $H_1 = G_7 - v$, $H_2 = G_7 - \{u, v\}$, $H_3 = G_7 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_7}(v)$ y $H_4 = G_6 - N_{G_7}[v]$. Veamos que $H_2 \ncong H_3$ y que existen tres gráficas isomorfas a H_2.

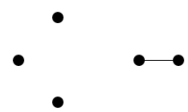
$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_3$:



$H_2 = P_1 \cup P_1 \cup P_3$:



$H_3 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_2$:



$H_4 = P_2$:

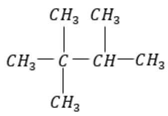
$$\begin{aligned} z(G_7) &= z(G_7 - v) + \sum_{w \in N_{G_7}(v)} z(G_7 - \{w, v\}) \\ &= z(H_1) + 2z(H_2) + z(H_3) \\ &= z(P_1)^3 z(P_3) + 3z(P_1)^2 z(P_3) + z(P_1)^3 z(P_2) \\ &= 1^3 \cdot 3 + 3 \cdot 1^2 \cdot 3 + 1^2 \cdot 2 \\ &= 14. \end{aligned}$$

E

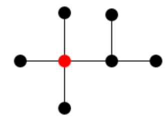
$$\begin{aligned} i(G_7) &= i(G_7 - v) + i(G_7 - N_{G_7}[v]) \\ &= i(H_1) + i(H_4) \\ &= i(P_1)^3 i(P_3) + i(P_2) \\ &= 2^3 \cdot 5 + 3 \\ &= 43. \end{aligned}$$

Así, tenemos que $z(G_7) = 14$, $i(G_7) = 43$ y su punto de ebullición es 352.35.

2,2,3– Trimetil– butano

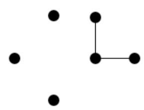


Gráfica asociada G_8:

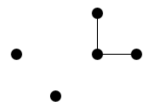


Considerando a las gráficas $H_1 = G_8 - v$, $H_2 = G_8 - \{u, v\}$, $H_3 = G_8 - \{u, v\}$, con $u \in N_{G_8}(v)$ y $H_4 = G_8 - N_{G_8}[v]$. Observemos que una vez más $H_2 \ncong H_3$ y que en este caso hay tres gráficas isomorfas a H_2.

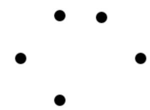
$H_1 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_3$:



$H_2 = P_1 \cup P_1 \cup P_3$:



$H_2 = P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_1 \cup P_1$:



$H_4 = P_1 \cup P_1$:

$$
\begin{aligned}
z(G_8) &= z(G_8 - v) + \sum_{w \in N_{G_8}(v)} z(G_8 - \{w, v\}) \\
&= z(H_1) + 3z(H_2) + z(H_3) \\
&= z(P_1)^3 z(P_3) + 3z(P_1)^2 z(P_3) + z(P_1)^5 \\
&= 1^3 \cdot 3 + 3 \cdot 1^2 \cdot 3 + 1^5. \\
&= 13.
\end{aligned}
$$

E

$$
\begin{aligned}
i(G_8) &= i(G_8 - v) + i(G_8 - N_{G_8}[v]) \\
&= i(H_1) + i(H_4) \\
&= i(P_1)^3 i(P_3) + i(P_1)^2 \\
&= 2^3 \cdot 5 + 2^2 \\
&= 44.
\end{aligned}
$$

Finalmente, podemos notar que $z(G_8) = 13$, $i(G_8) = 44$ y su punto de ebullición es 354.05, lo cual nos indica que en este caso no se cumple la proporcionalidad.

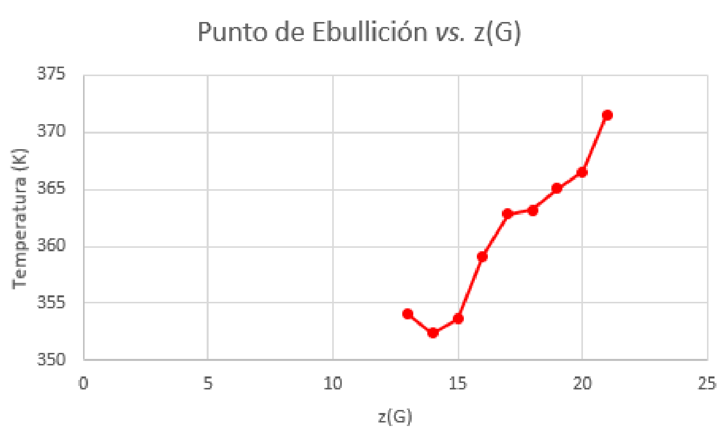
Mostramos ahora los datos concentrados en una tabla (los puntos de ebullición son los reportados en la literatura, como [2], seguida de las gráficas, y para finalizar con una pequeña discusión de los resultados obtenidos de la aplicación de los índices de Merrifield-Simmons y Hosoya en el área química.

Tabla 4.4:

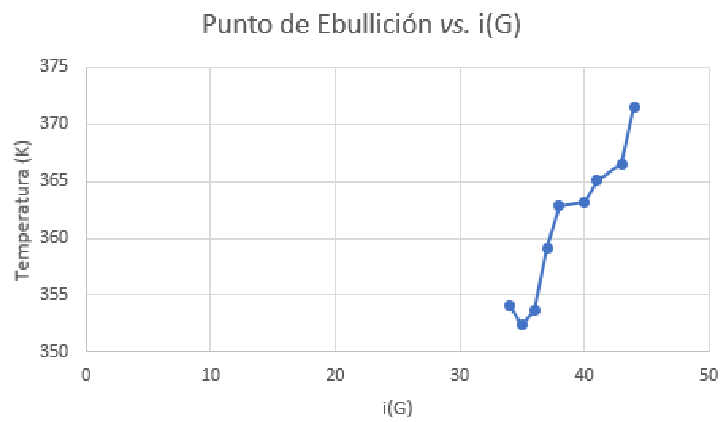
Índices de Hosoya y Merrifield-Simmons de los isómeros del heptano C_7H_{16}.

Trayectoria	$z(G)$	$i(G)$	*p.e. (K)*
Heptano	21	34	371.55
2-Etil-hexano	20	35	366.55
3-Metil-hexano	19	36	365.05
2-Metil-hexano	18	37	363.15
2, 3-Dimetil-pentano	17	38	362.85
3, 3-Dimetil-pentano	16	40	359.15
2, 4-Dimetil-pentano	15	41	353.65
2, 2-Dimetil-pentano	14	43	352.35
2, 2, 3-Trimetil-butano	13	44	354.05

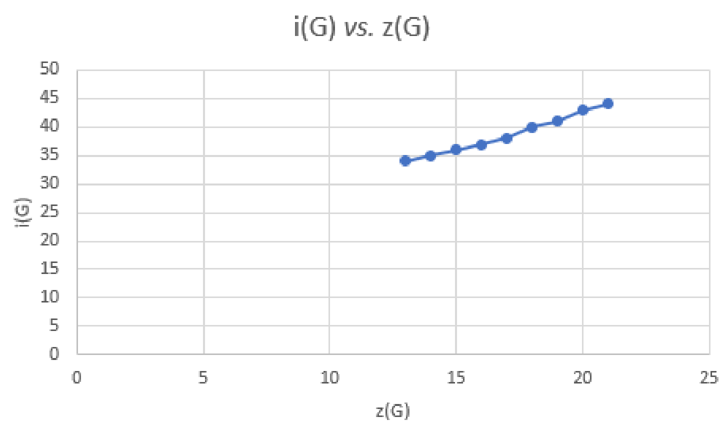
a) *p.e. vs.* $z(G)$



b) $p.e.$ $vs.$ $i(G)$



c) $i(G)$ $vs.$ $z(G)$



En los resultados de la tabla 4.4 observamos que el comportamiento del punto de ebullición es en general, el de una función creciente de los índices de Hosoya y Merrifield-Simmons, salvo el último caso del $2, 2, 3$-Trimetil-butano.

En la gráfica del inciso c) se observa que la relación entre el índice de Hosoya y Merrifiel-Simmons tiene un comportamiento muy similar al de una función de recta, hecho que en el caso de la Teoría de Gráficas será muy interesante de estudiar y en el contexto de la Química Combinatoria nos brinda la posibilidad de utilizar a conveniencia cualquiera de ambos, lo que es claro al comparar las gráficas de los incisos a) y b), en donde podemos notar que es casi indistinto el comportamiento de los puntos de temperatura de ebullición de los isómeros del heptano respecto a los índices de Hosoya y de Merrifield-Simmons.

Capítulo 5

Conclusiones

Se demostró que para toda gráfica conexa G de orden n, con conexidad $\kappa(G) \leq k$ y $1 \leq k \leq n-1$, se tiene que:

i) $n = z(S_n) \leq z(G) \leq z(K_n^k) = z_{n-1} + kz_{n-2}$.

ii) $2n - k = i(K_n^k) \leq i(G) \leq i(S_n^k) = 2^{n-1} + 1$.

Uno de los resultados centrales de este trabajo dice que $z(K^k_{n_1-1,n_2+1}) > z(K^k_{n_1,n_2})$, cuando $n, n_1, n_2, k \in \mathbb{N}$, tales que $n_1 + n_2 = n - k$. Para desarrollar a profundidad la demostración de este teorema fue necesario estudiar fuertemente el caso particular $k = 1$, lo cual nos llevó a obtener de manera independiente un nuevo resultado sobre los índices de Hosoya de las gráficas completas: demostramos que si $z_n = z(K_n)$, entonces $z_{n-1}z_{n+1} > z_n z_n$, para toda $n \geq 2$.

Se observó que dado $S \subseteq (V(K^k_{n_1,n_2}) - V_{n_i})$, con $i = 1, 2$, la subgráfica inducida $K^k_{n_1,n_2}[S] \cong K_{|S|}$, por lo que S es un clan en $K^k_{n_1,n_2}$. De esta manera podemos decir que el número de clan de $K^k_{n_1,n_2}$, esta dado por $\omega(K^k_{n_1,n_2}) = |V_{n_i} \cup V_k| = |V_{n_i}| + |V_k|$, con $V_{_{n_i}} = \max\{|V_{n_1}|, |V_{n_2}|\}$.

Se logró ver para las trayectorias de orden n que:

i) $z(P_n) = \mathscr{F}_{n+1}$.

ii) $i(P_n) = \mathscr{F}_{n+2}$.

Por lo cual el índice de Merrifiel-Simmons es llamado el número de Fibonacci de las gráficas, en el contexto de la Teoría de Gráficas.

Este resultado es importante dentro de la tesis, tomando en cuenta que los alcanos son modelados como trayectorias y sus isómeros son modelados como árboles de a lo más cuatro ramas por vértice. Por lo cual al aplicar el lema 3.1.1 a un vértice de corte adecuado, se generan trayectorias de menor orden.

De esta manera, utilizando los número de Fibonacci, que son ya conocidos, podemos facilitar los cálculos del índice de Hosoya en dichos compuestos químicos.

La relación de los índices de Hozoya y Merrifield-Simmons de los isómeros del heptano C_7H_{16}, tiene un comportamiento que puede ser ajustado a una recta. Por lo que la pregunta que nos gustaría responder es: ¿este hecho es una generalidad en el estudio de los isómeros de otros alcanos y de sus gráficas asociadas?

Bibliografía

[1] Kexiang X., Jianxi L., Lingping Z. (2012). *The Hosoya indices and Merrifield-Simmons indices of graphs with connectivity at most k*. Applied Mathematics Letters, 25, 476-480.

[2] Haruo, H. (1994). *Topological Index and Some Counting Polynomials for Characterizing the Topological Structure and Propieties of Molecular Graphs*. KTK Scientific Publishers, 63-75.

[3] Haruo, H. (1972). *Topological Index as a sorting device for coding chemical structures*. Journal of Chemical Documentation , 12, 181-183.

[4] Dosal, L. (2011). *Tesis: Los números de Fibonacci de las Gráficas Circulantes de Salto consecutivo (1,2,...,r)*. Universidad Nacional Autónoma de México, (101). México: UNAM.

[5] Dosal, L. (2014). *Tesina: Sobre los números de Fibonacci de las Gráficas*. Universidad Nacional Autónoma de México, (17). México: UNAM.

[6] Chartrand G., Zhang P. (2009). *Chromatic Graph Theory* Ed. Chapman & Hall/CRC, (498). USA: New York.

[7] Bondy J. A. (1976). *Graph Theory with Applications* Ed. North Holland, (260). USA: New York.

[8] Trinajstić N. (1983). *Chemical Graph Theory* Ed. Chapman & Hall/CRC, Vol II (160). USA: New York.