# El Índice de Kirchhoff y la Capacidad de Wiener de una red *

E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas y J.M. Gesto[1]

Departament de Matemàtica Aplicada III. UPC angeles.carmona@upc.edu

**Resumen.** En este trabajo presentamos una aplicación de la Teoría del Potencial a la computación del Índice de Kirchhoff de redes finitas. Este parámetro ha mostrado su utilidad en el ámbito de la Química Teórica para discriminar entre diferentes moléculas que presentan formas y estructuras similares. Presentamos una aplicación de la metodología desarrollada al cálculo del Índice de Kirchhoff de Polyominos lineales.

**Palabras clave:** Índice de Kirchhoff, Resistencia Efectiva, Medida de equilibrio, Capacidad de Wiener, Polyominos

## 1 Preliminares

Es bien conocido que el cálculo de la *resistencia efectiva* entre cualquier par de vértices de una red tiene interés en el análisis de los circuitos eléctricos y, en su versión probabilística, de los caminos aleatorios. El *Índice de Kirchhoff* de una red, es decir, la suma de todas las resistencias efectivas, es un parámetro de la misma que proporciona información valiosa sobre su estructura. Durante los últimos años ha habido un interés creciente en el ámbito de la Química por la determinación del Índice de Kirchhoff, ya que se ha mostrado capaz de discriminar entre diferentes moléculas con formas y estructuras semejantes, [?,?,?,?]. De hecho, el Índice de Kirchhoff fue introducido por primera vez en [?], trabajo que ha supuesto el punto de partida de una línea de investigación en el ámbito de la Química y que ha generado una considerable producción. El Índice de Kirchhoff ha sido computado de forma explícita para algunas clases de moléculas con un alto grado de simetría, ver [?,?,?,?,?,?].

Nuestro análisis del Índice de Kirchhoff está basado en la Teoría Discreta del Potencial asociada a las redes. Concretamente, en [?] hemos utilizado las medidas de equilibrio de la red y sus correspondientes capacidades de Wiener para obtener una fórmula cerrada del Índice de Kirchhoff que muestra que

* Trabajo parcialmente financiado por la ETSECCPB y la Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología (MTM2007-6252)

éste no es más que la capacidad media de los vértices de la red. Aplicaremos aquí la fórmula obtenida al cálculo del Índice de Kirchhoff de los polyominos lineales.

En todo el trabajo entenderemos que una *red* es una terna $\Gamma = (V, E, c)$ donde $(V, E)$ es un grafo que supondremos conexo y $c\colon V \times V \longrightarrow [0, +\infty)$ es una función simétrica denominada *conductancia* que satisface que $c(x, y) > 0$ si y sólo si $\{x, y\} \in E$. Denotaremos por $n$ al número de nodos de la red y por $\mathcal{C}(V)$ al conjunto de funciones de $V$ en $\mathbb{R}$. En particular, para cada $x \in V$, $\varepsilon_x$ denota la *delta de Dirac en* $x \in V$. El *grado* y el *grado máximo* son las funciones $k, k_M \in \mathcal{C}(V)$ definidas respectivamente como $k(x) = \sum\limits_{y \in V} c(x, y)$ y $k_M(x) = \max\limits_{y \in V}\{c(x, y)\}$, para cada $x \in V$.

El *Laplaciano* de $\Gamma$ es el operador $\mathcal{L}\colon \mathcal{C}(V) \longrightarrow \mathcal{C}(V)$ definido para cada $u \in \mathcal{C}(V)$ como $\mathcal{L}(u)(x) = \sum\limits_{y \in V} c(x, y)\big(u(x) - u(y)\big)$, para cada $x \in V$. En [?], se demostró que para cada $x \in V$, la ecuación $\mathcal{L}(u) = 1 - n\varepsilon_x$ tiene una única solución tal que $\nu_x(x) = 0$, que además verifica que $\nu_x > 0$ en $V \setminus \{x\}$. Para cada $x \in V$, denominaremos *medida de equilibrio de* $V \setminus \{x\}$ a la función $\nu_x$ y *capacidad de Wiener de* $x$ a $\mathsf{cap}(x) = \sum\limits_{y \in V} \nu_x(y)$.

## 2 Índice de Kirchhoff

Uno de los problemas fundamentales en Teoría de Redes es el cálculo de la resistencia efectiva entre cualquier par de nodos de una red. Si las ramas de $\Gamma$ constituyen las resistencias de un circuito donde el valor de tal resistencia es el inverso de la conductacia de la rama, entonces para cada $x, y \in V$, la resistencia efectiva entre $x$ e $y$, $R(x, y)$, es la diferencia de potencial medida en los nodos $x$ e $y$ cuando entre ellos se aplica una corriente unitaria. Así pues, la *resistencia efectiva entre* $x$ *e* $y$ es $R(x, y) = u(x) - u(y)$, donde $u \in \mathcal{C}(V)$ es cualquier solución de la ecuación $\mathcal{L}(u) = \varepsilon_x - \varepsilon_y$. Como dos soluciones de la anterior ecuación se diferencian en una constante, resulta que el valor $R(x, y)$ no depende de la solución escogida y también que $R(y, x) = R(x, y)$, $R(x, x) = 0$ y $R(x, y) > 0$ cuando $x \neq y$. De hecho, $R$ define una distancia sobre $\Gamma$, que suele denominarse *distancia resistiva*, ver por ejemplo [?,?]. La utilidad práctica de la distancia resistiva reside en que representa una medida de lo conectados que están los nodos ya que $R(x, y)$ es tanto menor cuando más caminos de baja resistencia existan entre $x$ e $y$.

El *Índice de Kirchhoff de* $\Gamma$, denominado también la *resistencia total de* $\Gamma$, está definido como

$$R(\Gamma) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in V}^{n} R(x, y) \tag{1}$$

y representa una medida de la conexión de la red o cómo es su tamaño en términos de distancia resistiva. La información proporcionada por el Índice de Kirchhoff puede usarse en varios contextos. Así por ejemplo, en una red eléctrica representa la potencia media disipada por una corriente aleatoria mientras que en el ámbito de caminos aleatorios expresa, salvo factor de escala, el tiempo de encuentro promedio, ver [**?**].

Es bien conocido que tanto la resistencia efectiva entre cualquier par de nodos como el Índice de Kirchhoff están íntimamente relacionados con los autovalores y autovectores del Laplaciano, hasta tal punto que el siguiente resultado representa una de las formas más frecuentes de calcularlos, ver por ejemplo [**?**,**?**,**?**].

**Proposición 1.** *Sean $\{\lambda_j\}_{j=2}^n$ los valores propios no nulos de $\mathcal{L}$ y $\{u_j\}_{j=2}^n$ el sistema ortonormal de autofunciones correspondiente. Entonces,*

$$R(x,y)=\sum_{j=2}^n \frac{1}{\lambda_j}\big(u_j(x)-u_j(y)\big)^2 \quad y \quad R(\Gamma)=n\sum_{j=2}^n \frac{1}{\lambda_j}.$$

Los autores obtuvieron en [**?**] una expresión de la resistencia efectiva entre cualquier par de nodos de la red en términos de las medidas de equilibrio que condujo en [**?**] a caracterizar el Índice de Kirchhoff como la media de las capacidades de Wiener los nodos de la red. Además, obtuvimos una cota inferior del Índice de Kirchhoff en términos del grado y del grado máximo.

**Teorema 1. ([?])** *Se satisface que $R(x,y)=\dfrac{1}{n}\big(\nu_x(y)+\nu_y(x)\big)$ para cada $x,y\in V$ y por tanto, $R(\Gamma)=\dfrac{1}{n}\sum_{x\in V}\mathsf{cap}(x)$. En particular, para cada $x,y\in V$ se tiene que*

$$R(x,y)\geq \frac{k_M(x)+k_M(y)}{nk_M(x)k_M(y)}+\frac{k(x)+k(y)}{nk(x)k(y)}-\frac{c(x,y)\big(k(x)k_M(y)+k(y)k_M(x)\big)}{nk(x)k(y)k_M(x)k_M(y)}$$

*y por tanto,*

$$R(\Gamma)\geq \frac{(n-1)}{n}\sum_{x\in V}\left(\frac{1}{k_M(x)}+\frac{1}{k(x)}\right)-\frac{1}{n}\sum_{x,y\in V}\frac{c(x,y)}{k_M(x)k(y)}$$

*con igualdad si y sólo si $\Gamma$ es una red completa y la conductancia es constante.*

Es importante remarcar que la última parte del Teorema anterior establece que la estructura del grafo subyacente a $\Gamma$ no garantiza que se satisfaga la igualdad del Índice de Kirchhoff con su cota inferior. Para plasmar esta conclusión con un ejemplo, consideremos $\Gamma$ la red cuyo grafo subyacente es el completo y donde hemos fijado un nodo $x^*$ tal que las conductancias están determinadas por $c(x,y)=c_0>0$ si $x,y\neq x^*$, $x\neq y$ y

**Figura 1.** Red completa de $n$ nodos

$c(x^*,x) = c_1 > 0$ si $x \neq x^*$, tal y como se muestra en la Figura **??**. Es fácil verificar $\nu_{x^*}(y) = \dfrac{1}{c_1}$, para cada $y \neq x^*$, mientras que si $x \neq x^*$, entonces $\nu_x(y) = \dfrac{n}{(n-1)c_0 + c_1}$ cuando $y \neq x^*$ y $\nu_x(x^*) = \dfrac{c_0 + (n-1)c_1}{c_1[(n-1)c_0 + c_1]}$. En consecuencia, $\mathsf{cap}(x^*) = \dfrac{n-1}{c_1}$, $\mathsf{cap}(x) = \dfrac{c_0 + (n^2-n-1)c_1}{c_1[(n-1)c_0 + c_1]}$ si $x \neq x^*$ y por tanto, $R(\Gamma) = \dfrac{(n-1)[c_0 + (n-1)c_1]}{c_1[(n-1)c_0 + c_1]}$. Por otra parte, $k(x^*) = (n-1)c_1$, $k_M(x^*) = c_1$, $k(x) = (n-2)c_0 + c_1$ y $k_M(x) = \text{máx}\{c_0, c_1\}$, para cada $x \neq x^*$, lo que implica que si $c_0 \neq c_1$, entonces

$$R(\Gamma) = \frac{(n-1)[c_0 + (n-1)c_1]}{c_1[(n-1)c_0 + c_1]} > \frac{(n-1)}{n}\left[\frac{n-1}{\text{máx}\{c_0, c_1\}} + \frac{1}{c_1}\right].$$

La aplicación del Teorema anterior al caso en el que $\Gamma$ es un grafo, es decir al caso en el que la conductancia es 1 para los nodos adyacentes, permite recuperar algunos resultados bien conocidos, ver [**?**]. Debe tenerse en cuenta que en estas circunstancias la función $k_M$ es constantemente igual a 1.

**Corolario 1.** *Si $\Gamma$ es un grafo, entonces $R(x,y) \geq \dfrac{2}{n}$ cuando $x \sim y$, mientras que $R(x,y) \geq \dfrac{1}{n}\left(2 + \dfrac{1}{k(x)} + \dfrac{1}{k(y)}\right)$ si $x \not\sim y$. Por tanto,*

$$R(\Gamma) \geq n - 2 + \frac{n-1}{n}\sum_{x \in V}\frac{1}{k(x)} \geq n-1$$

*y se verifica la primera igualdad si y sólo si se verifica la segunda y esto ocurre si y sólo si $\Gamma$ es el grafo completo de $n$ nodos.*

Terminamos esta sección señalando que el conocimiento de autovalores y autofunciones del Laplaciano permite también calcular fácilmente las medidas de equilibrio, de manera que las expresiones de la Proposición **??** aparecen como consecuencia directa de los resultados del Teorema 1. Concretamente,

$$\nu_x(y) = \sum_{j=2}^{n}\frac{n}{\lambda_j}\,u_j(x)\Big(u_j(x) - u_j(y)\Big) \quad \text{y} \quad \mathsf{cap}(x) = \sum_{j=2}^{n}\frac{n^2}{\lambda_j}\,u_j^2(x).$$

## 3 El Índice de Kirchhoff de los polyominos lineales

Una consecuencia importante del Teorema 1, es que para computar la resistencia efectiva entre cualquier par de nodos de una red $\Gamma$ y posteriormente su

Índice de Kirchhoff, es suficiente resolver $n$ problemas de equilibrio, número que puede decrecer drásticamente si poseemos información adicional sobre la estructura de la red, especialmente si ésta presenta algún tipo de simetrías. El ejemplo paradigmático de esta situación es el de los denominados *Grafos Distancia-Regulares*, cuyas resistencias efectivas e Índice de Kirchhoff han sido determinados por diferentes autores [**?**,**?**]. En este trabajo mostraremos la aplicación de nuestras fórmulas al análisis de redes construídas sobre Polyominos lineales cuyos grafos subyacentes no son ni siquiera regulares. El Índice de Kirchhoff para estos grafos fue obtenido en [**?**] basándose en el conocimiento de sus autovalores. El desconocimiento de las correspondientes autofunciones hace inviable para estos autores el cálculo de la resistencia efectiva entre cualquier par de nodos.

Los grafos *Polyominos*, conocidos en el ámbito de la combinatoria como *ladders*, tienen muchas aplicaciones en Física Estadística y en modelado de superficies químicas, ver [**?**,**?**,**?**]. El *Polyomino lineal* de $2n$ nodos es el grafo formado por dos copias de un camino de $n$ nodos dónde cada vértice del camino está conectado con el correspondiente vértice de su copia, es decir $K_2 \times P_n$. Consideremos aquí la siguiente red cuyo grafo subyacente es el polyomino lineal, ver la Figura **??**. En este caso $V = \{x_1, \dots, x_n, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n\}$

**Figura 2.** Red Polyomino Lineal de $2n$ nodos

y las conductancias están dadas por $c(x_j, x_{j+1}) = c(\hat{x}_j, \hat{x}_{j+1}) = c$ si $j = 1, \dots, n-1$, $c(x_j, \hat{x}_j) = a$, $j = 1, \dots, n$ y $c(x, y) = 0$ en otro caso.

Para calcular las medidas de equilibrio de esta red necesesitaremos recordar algunas propiedades de los denominados *Polinomios de Chebyshev de Primera y Segunda Especie*, que están respectivamente definidos por las recurrencias:

$$\begin{aligned} &T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x, \quad T_{m+2}(x) = 2\,x\,T_{m+1}(x) - T_m(x), \qquad m \in \mathbb{Z}, \\ &U_0(x) = 1,\, U_1(x) = 2x, \quad\ U_m(x) = 2\,x\,U_{m-1}(x) - U_{m-2}(x),\, m \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \tag{2}$$

Los polinomios de Chebyshev de primera y segunda especie satisfacen múltiples propiedades y están relacionados entre sí. El lector interesado puede consultar cualquiera de las numerosas monografías dedicadas a su estudio, como por ejemplo [**?**]. Nos limitaremos aquí, a mencionar aquéllas que serán relevantes en nuestro trabajo. Para cada $m \geq 0$ se satisface que $T_m = T_{-m}$, $\sum_{j=1}^{m} T_{m+1-2j} = U_{m-1}$ y $2T_nT_m = T_{n+m+1} + T_{n-m}$, para cada $n \in \mathbb{Z}$. También, para cada $x \in \mathbb{R}$ se verifica que $T_m(x) = xU_{m-1}(x) - U_{m-2}(x)$ y $(x^2-1)U'_m(x) = mT_{m+1}(x) - U_{m-1}(x)$.

**Proposición 2.** *En las condiciones anteriores si* $q = 1 + \dfrac{a}{c}$, *entonces*

$$\nu_{x_j}(x_i) = \nu_{\hat{x}_j}(\hat{x}_i) = \frac{n\left(T_n(q) + T_{n+1-2j}(q) - T_{n-|j-i|}(q) - T_{n+1-j-i}(q)\right)}{2a(q+1)U_{n-1}(q)}$$
$$+ \frac{|i-j|}{2c}\begin{cases} 2n+1-i-j, & 1 \le j \le i \le n \\ i+j-1, & 1 \le i \le j \le n. \end{cases}$$

$$\nu_{x_j}(\hat{x}_i) = \nu_{\hat{x}_j}(x_i) = \frac{n\left(T_n(q) + T_{n+1-2j}(q) + T_{n-|j-i|}(q) + T_{n+1-j-i}(q)\right)}{2a(q+1)U_{n-1}(q)}$$
$$+ \frac{|i-j|}{2c}\begin{cases} 2n+1-i-j, & 1 \le j \le i \le n \\ i+j-1, & 1 \le i \le j \le n. \end{cases}$$

*En particular, para cada $j = 1, \ldots, n$ se tiene que $\mathsf{cap}(x_j) = \mathsf{cap}(\hat{x}_j)$ y además*

$$\mathsf{cap}(x_j) = \frac{n}{3c}(n-1)(2n-1) - \frac{2n}{c}(j-1)(n-j) + \frac{n^2\Big(T_n(q) + T_{n+1-2j}(q)\Big)}{a(q+1)U_{n-1}(q)}$$

*Demostración.* Fijado $j$, consideremos el escalar $K = \dfrac{n\left(T_n(q) + T_{n+1-2j}(q)\right)}{2a(q+1)U_{n-1}(q)}$ y para cada $i = 1, \ldots, n$,

$$\alpha_j(x_i) = \frac{n\Big(T_{n-|j-i|}(q) + T_{n+1-j-i}(q)\Big)}{2a(q+1)U_{n-1}(q)}$$
$$\gamma_j(x_i) = \frac{|i-j|}{2c}\begin{cases} 2n+1-i-j, & 1 \le j \le i \le n \\ i+j-1, & 1 \le i \le j \le n. \end{cases}$$

Entonces $\nu_{x_j}(x_i) = K - \alpha_j(x_i) + \gamma_j(x_i)$, $\nu_{x_j}(\hat{x}_i) = K + \alpha_j(x_i) + \gamma_j(x_i)$ y en un punto genérico

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\nu_{x_j})(x_i) &= -(2c+a)\alpha_j(x_i) + c\alpha_j(x_{i-1}) + c\alpha_j(x_{i+1}) - a\alpha_j(x_i) \\ &\quad + c\Big(2\gamma_j(x_i) - \gamma_j(x_{i-1}) - \gamma_j(x_{i+1})\Big) \\ &= -c\Big(2q\alpha_j(x_i) - \alpha_j(x_{i-1}) - \alpha_j(x_{i+1})\Big) + 1 = 1,\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que $\mathcal{L}(K) = 0$, que $\gamma_j$ es la medida de equilibrio de $x_j$ en el camino y que $\alpha_j$ verifica la recurrencia (**??**). El resto de casos se comprueba de manera análoga. Por otra parte,

$$\mathsf{cap}(x_j) = 2nK + 2\sum_{i=1}^{n}\gamma_j(x_i) = 2nK + \frac{n}{3c}(n-1)(2n-1) - \frac{2n}{c}(j-1)(n-j).\square$$

**Proposición 3.** *Para cada $i, j = 1, \ldots, n$ se tiene que $R(x_j, x_i) = R(\hat{x}_j, \hat{x}_i)$ y*

$$R(x_j, x_i) = \frac{|i-j|}{c} + \frac{\big(T_n(q) - T_{n-|j-i|}(q) + T_{n+1-i-j}(q)\big(T_{i-j}(q) - 1\big)\big)}{a(q+1)U_{n-1}(q)}.$$

$$R(\hat{x}_j, x_i) = \frac{|i-j|}{c} + \frac{\big(T_n(q) + T_{n-|j-i|}(q) + T_{n+1-i-j}(q)\big(T_{i-j}(q)+1\big)\big)}{a(q+1)U_{n-1}(q)}.$$

*Además,*

$$R(\Gamma) = \frac{n}{3c}\,(n^2-1) + n\sum_{k=0}^{n-1}\frac{1}{a + 2c\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right)}$$

*Demostración.* Teniendo en cuenta que

$$T_{n+1-2j}(q) + T_{n+1-2i}(q) = 2T_{n+1-i-j}(q)T_{i-j}(q),$$

la expresión para la resistencia efectiva se deduce directamente de aplicar el Teorema 1 a las fórmulas obtenidas en la proposición anterior. Por otra parte,

$$\sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{n}{3c}\,(n-1)(2n-1) - \frac{2n}{c}\,(j-1)(n-j)\Big) = \frac{n^2}{3c}\,(n^2-1)$$

y como $\sum\limits_{j=1}^{n} T_{n+1-2j}(q) = U_{n-1}(q)$ y el número de nodos es $2n$, obtenemos que

$$R(\Gamma) = \frac{n}{3c}\,(n^2-1) + \frac{n\Big(nT_n(q) + U_{n-1}(q)\Big)}{a(q+1)U_{n-1}(q)}$$

De la identidad $T_n(q) = qU_{n-1}(q) - U_{n-2}(q)$, deducimos que

$$R(\Gamma) = \frac{n}{3c}\,(n^2-1) + \frac{n}{a} + \frac{n\Big((n-1)T_n(q) - U_{n-2}(q)\Big)}{a(q+1)U_{n-1}(q)}$$

y como $(q^2-1)U'_{n-1}(q) = (n-1)T_n(q) - U_{n-2}(q)$, resulta que

$$R(\Gamma) = \frac{n}{3c}\,(n^2-1) + \frac{n}{a} + \frac{nU'_{n-1}(q)}{cU_{n-1}(q)} = \frac{n}{3c}\,(n^2-1) + n\sum_{k=0}^{n-1}\frac{1}{c + a - c\cos\left(\frac{k\pi}{n}\right)},$$

donde hemos tenido en cuenta que $\{\cos\left(\frac{k\pi}{n}\right)\}_{k=1}^{n-1}$ son los ceros de $U_{n-1}$. $\square$

## Referencias


[1] D. Babić, D.J. Klein, I. Lukovits, S. Nikolić y N. Trinajstić. Resistance-distance matrix: A computational algorithm and its application. *Int. J. Quantum Chem.*, 90: 166–176, 2002.

[2] E. Bendito, A. Carmona y A.M. Encinas. Equilibrium measures, Poisson kernel and effective resistance on networks. en *Random Walks and Geometry*, 363–376. Walter de Gruyter, Berlin 2004.

[3] E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas y J.M. Gesto. A Formula for the Kirchhoff Index. *Int. J. Quantum Chem.*, 108: 1200–1206, 2008.

[4] N.L. Biggs. Potential theory on distance-regular graphs. *Combin., Probab. Comput.*, 2: 243–255, 1993.

[5] J.R. Dias. Properties and relationships of conjugated polyenes having a reciprocal eigenvalue spectrum-Dendralene and radialene hydrocarbons. *Croat. Chem. Acta,* 77: 325–330, 2004.

[6] A. Ghosh, S. Boyd y A. Saberi. Minimizing effective resistance of a graph. *SIAM Review,* 50: 37–66, 2008.

[7] D.J. Klein y M. Randić. Resistance distance. *J. Math. Chem.*, 12: 81–95, 1993.

[8] I. Lukovits, S. Nikolić y N. Trinajstić. Resistance distance in regular graphs. *Int. J. Quantum Chem.*, 71: 217–225, 1999.

[9] J.C. Mason y D.C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials.* Chapman & Hall/CRC, 2003.

[10] J.L. Palacios. Closed-form formulas for Kirchhoff index. *Int. J. Quantum Chem.*, 81: 135–140, 2001.

[11] J.L. Palacios. Foster's Formulas via probability and the Kirchhoff index. *Methodol. Comput. Appl. Probab.*, 6: 381–387, 2004.

[12] J. Rubinstein y M. Schatzman. Spectral properties and symetries of double coberings of graphs with appplications to superconductivity. *Math. Models Methods Appl. Sci.,* 15: 301–324, 2005.

[13] W. Xiao y I. Gutman. Resistance distance and Laplacian spectrum. *Theor. Chem. Acc.*, 110: 284–289, 2003.

[14] Y. Yang y H. Zhang. Kirchhoff index of linear hexagonal chains. *Int. J. Quantum Chem.*, 108: 503–512, 2008.

[15] H. Zhang y Y. Yang. Resistance distance and Kirchhoff index in circulant graphs. *Int. J. Quantum Chem.*, 107: 330–339, 2007.