

RANGO DE GRAFICAS ANILLADAS CON UN ENFOQUE EN EL DISEÑO DE MATERIALES

RANGE OF RING CHARTS WITH A FOCUS ON MATERIAL DESIGN

Jonathan Toledo Toledo¹, Nancy Márquez Lazaro², Azucena Escobar Santiago³, Darío Salvador Garcia⁴.

¹Doctor en Matemáticas, Instituto Tecnológico del Valle de Etlá. jonathan.tt@itvalletla.edu.mx. 5536732916. Abasolo S/N, Barrio Del Agua Buena, Santiago Suchilquitongo, Oaxaca, México, 68230.

²Lic. En Matemáticas. Instituto Tecnológico del Valle de Etlá. nancy.ml@itvalletla.edu.mx. 771 566 3763. Abasolo S/N, Barrio Del Agua Buena, Santiago Suchilquitongo, Oaxaca, México, 68230.

³Ing. Instituto Tecnológico del Valle de Etlá. azucena740@gmail.com. 55 3922 5507. Abasolo S/N, Barrio Del Agua Buena, Santiago Suchilquitongo, Oaxaca, México, 68230.

⁴Ing. Instituto Tecnológico del Valle de Etlá. dariosalvadorgarcia42@gmail.com. 971 208 5966. Abasolo S/N, Barrio Del Agua Buena, Santiago Suchilquitongo, Oaxaca, México, 68230.

Resumen – En este trabajo estudiamos el rango de la matriz de adyacencia de graficas anilladas, ya que muchas moléculas tienen esta configuración como gráfica molecular. Con este invariante podemos estudiar el polinomio característico y la energía de la gráfica, con el fin de tener herramienta matemática para el estudio y desarrollo de materiales sustentables y utilizarlos en la generación de energía.

Palabras Clave: Energía de gráficas, graficas moleculares, matriz de adyacencia.

Abstract -- In this work we study the rank of the adjacency matrix of ring graphs, since many molecules have this configuration as a molecular graph. With this invariant we can study the characteristic polynomial and the energy of the graph, in order to have a mathematical tool for the study and development of sustainable materials and use them in energy generation.

Key words – Energy graphs, molecular graphs, adjacency matrix.

INTRODUCCIÓN

El diseño y desarrollo de materiales utilizables en energías renovables es una necesidad en estos tiempos, ya que con estos podemos desarrollar y construir dispositivos de generación de energía limpia y de manera sustentable. Lo cual es un punto prioritario en la agenda política nacional y mundial. Por esta razón, tener una teoría matemática como herramienta para diseñar sistemáticamente materiales que cumplan con requerimientos específicos es muy importante.

Sabemos que la estructura molecular determina propiedades específicas del material, como la resistencia a deformaciones o rupturas, así como conductividad

térmica o conductividad eléctrica. Para diseñar materiales necesitamos conocer la estructura molecular requerida de acuerdo con las características físicas deseadas para finalmente intentar sintetizarlo.

Para esto establecemos un puente entre las estructuras químicas y algunas estructuras matemáticas. Uno de estos puentes es la gráfica molecular, la cual es la gráfica asociada a una molécula y cuyos vértices representan átomos y las aristas, enlaces químicos

La información de la gráfica molecular puede ser almacenada en matrices, índices numéricos, polinomios, espectros, etc. Mediante invariantes como energías (valores propios) y rango de matrices los cuales quedan inmersos en ecuaciones que al resolverlas podemos caracterizar las moléculas y así lograr su diseño.

En ese trabajo nos enfocaremos en un índice específico que es el rango de la matriz de adyacencia de graficas moleculares, más específicamente estudiaremos las graficas anilladas, las cuales forman una clase que puede surgir y con las cuales tratar de generalizar resultados que ya se tienen, como por ejemplo para el caso de bencenioides. Definiremos sumas entre estas graficas que podremos interpretar de manera natural a nivel molecular.

DESARROLLO

Definición 1: Dada una gráfica G con vértices $V(G) = \{x_1, \dots, x_n\}$ y aristas $E(G) = \{f_1, \dots, f_m\}$ La matriz de adyacencia es la matriz $A(G) = (a_{ij})$ de tamaño $n \times n$ donde:

$$a_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } x_i x_j \notin E(G) \\ 1 & \text{si } x_i x_j \in E(G) \end{cases}$$

Similarmente, la matriz de incidencia de G es la matriz $B(G) = (b_{ij})$ de tamaño $m \times n$ donde:

$$b_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } x_j \notin e_i \\ 1 & \text{si } x_j \in e_i \end{cases}$$

Y finalmente la matriz de k -caminos es la matriz de tamaño $n \times n$, $C_k(G) = (c_{ij})$ donde c_{ij} es el número de caminos de longitud k que van x_i a x_j .

Ejemplo 1:

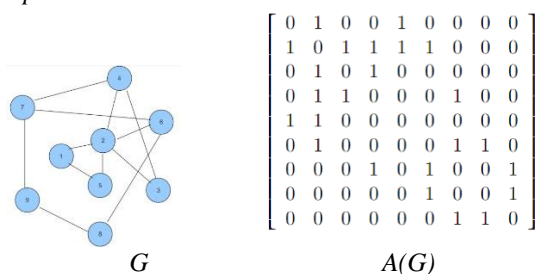


Figura 1. Una gráfica y su matriz de adyacencia.

La matriz de adyacencia de una gráfica es un concepto muy importante en Combinatoria Algebraica. Esta matriz asociada mantiene información sobre la gráfica, incluso podemos obtener algunas caracterizaciones

Calcular el rango de la matriz es un problema abierto y conocer el rango es útil para el interés combinatorio. En [1] se presenta una lista de invariantes que están acotados por una función del rango, por ejemplo:

1. Número de componentes conexas (no vértices aislados)
2. Número de clan.
3. Número cromático
4. El menor número de factores en una partición de aristas en gráficas k -partidas completos, para k fijo.
5. Número de dominación $\gamma(G)$ y número de dominación total $\gamma_t(G)$ (sin vértices aislados)
6. Diámetro de una gráfica conexa.

El número coincidente, el número de independencia y el índice cromático están acotados en [2] el número cromático en [3] y el número cromático cuando la matriz de adyacencia tiene rango par en

En [5] el autor estudia el rango a través de la gráfica reducida, prueba que el conjunto de gráficas reducidas de rango dado r es finito y su cardinalidad está acotada por $c2^{2^r}$. Y el número máximo de vértice de un grafo reducido con rango r denotado por $m(r)$ está acotado por $c2^{\frac{r}{2}}$ para algún c independiente de r .

También prueban que

$$m(r) \geq \begin{cases} 5 \cdot 2^{\frac{r-3}{2}} - 1 & \text{si } r \text{ es impar} \\ 2^{\frac{r+2}{2}} - 1 & \text{si } r \text{ es par} \end{cases}$$

En [1] los autores conjeturan que en la desigualdad anterior la igualdad se alcanza para cada r . Finalmente, en [6] demuestre que la conjetura es verdadera para r impar.

Las gráficas cuya matriz de adyacencia tiene un rango de 3 como máximo se estudian en [7] y se caracterizan en [8] cuando el rango es 2 o 3. Las gráficas conexas cuya matriz de adyacencia tiene rango 5 y 4 se caracterizan en [9] y [10] respectivamente.

Definición 2: El Determinante de una matriz $A = (a_{ij})$ de tamaño $n \times n$ se denota y se define como

$$Det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sig}(\sigma) \left(\prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)} \right)$$

Donde S_n es el grupo simétrico de orden n

Definición 3: El Polinomio característico de una matriz $A = (a_{ij})$ de tamaño $n \times n$ se denota y se define como.

$$C(A)(\lambda) = Det(\lambda I - A)$$

Cuando A es la matriz de adyacencia de una gráfica G , a sus valores propios (las raíces del polinomio característico) también le llamamos energías de la gráfica. Este nombre lo recibe en este contexto pues, si G es una gráfica molecular, estos valores son precisamente los posibles estados cuántizados de energía del sistema al cual G representa. Para caracterizar dicho sistema a través de sus valores de energía utilizamos el polinomio característico, pues sus coeficientes para muchos casos están dados en función de invariantes de la gráfica.

Si escribimos el polinomio característico de una gráfica G con matriz de adyacencia A como

$$C(A)(\lambda) = \sum_{i=0}^n a_i \lambda^{n-i}$$

Nos gustaría saber cuáles son sus coeficientes, más aún, saber si estos los podemos escribir en función de algún invariante de la gráfica tenemos que

$$c_k = \sum_{i=1}^n (\lambda_i)^k$$

Donde c_k es el número de caminos cerrados de longitud k , que también es la traza de A^k . Para benzenoides

conocemos sus coeficientes y los primeros 4 coeficientes. a_0 claramente es 1 y los siguientes 3 serán:

$$1) a_1(G) = \sum_{i=1}^n r_i = 0$$

$$2) a_2(G) = |E| = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n r_i^2$$

$$3) a_3(G) = -2C_3 \text{ donde } C_3 \text{ es el numero de 3-ciclos de } G.$$

Para el caso de graficas moleculares de bencenoides estos coeficientes ya se conocen y están en función de invariantes de la gráfica. Ahora, nos gustaría extender estos resultados a otras familias para las cuales esto se sigan cumpliendo.

Para eso notamos que los bencenoides se obtienen uniendo hexágonos por medio de aristas y vértices.

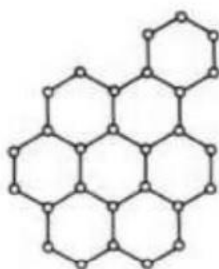


Figura 2. Grafica esqueleto de un bencenoide

La siguiente familia que podemos estudiar son las graficas anilladas. Las cuales son graficas que se construyen a partir de un ciclo al que se le van adhiriendo inductivamente ciclos pegándolos por medio de vértices y aristas. Las siguientes son equivalencias para una gráfica anillada.

Definición 4: El rango de una matriz A con entradas en un campo, es la dimensión de la imagen de A .

Lema 1: El rango es igual al máximo número de columnas de A linealmente independientes .

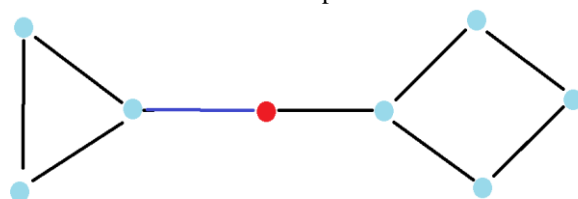
La matriz de adyacencia depende de la indexación de las aristas. Pero el rango es invariante bajo las permutaciones de filas y columnas, por lo que el rango está bien definido.

Ejemplo 2: La gráfica del Ejemplo 1 tiene rango 8. Mas aun $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6, b_8, b_9$ son la base para $Im(A(G))$

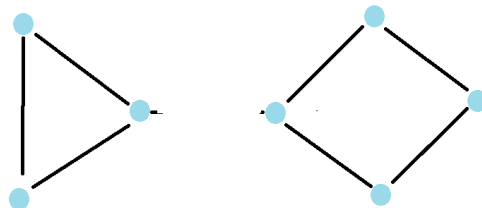
$$b_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, b_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, b_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, b_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, b_5 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, b_6 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, b_8 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, b_9 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Definición 5. Dada una gráfica G decimos que vértice es de corte si su eliminación incrementa el número de componentes conexas. Similarmente una arista es un puente cuando al ser eliminada aumenta el número de componentes conexas.

Ejemplo 3: Una gráfica donde el vértice rojo es un vértice de corte. Y la arista azul es un puente.



G



La eliminación del vértice rojo en G

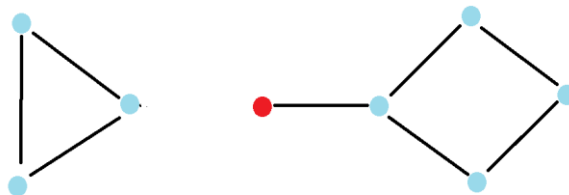


Figura 3. La eliminación de la arista azul en G

Una subgráfica conexas maximal que no tiene vértice de corte se llama bloque. Una gráfica G es una gráfica anillada si cada bloque de G que no tiene puentes ni vértices de corte, puede construirse inductivamente comenzando con un solo ciclo, y luego en cada paso agregando un camino H que incide en la gráfica en el paso anterior en dos vértices adyacentes, estas graficas son principalmente estudiadas en [12] y [13]

Un ciclo sin cuerdas se llama primitivo. Una gráfica G tiene la propiedad del ciclo primitivo si dos ciclos

primitivos se intersecan como máximo en una arista. Una subdivisión de una gráfica es cualquier gráfica que se puede obtener del grafo original reemplazando aristas por caminos. Se dice que dos gráficas son homeomorfas si ambas se pueden obtener de la misma gráfica por subdivisión.

Proposición 1:

Las siguientes condiciones son equivalentes para una gráfica G con n vértices y q aristas:

- i. G es una gráfica anillada.
- ii. El número de ciclos primitivos es igual a $q - n + r$, donde r es el número de componentes de G .
- iii. G satisface la propiedad del ciclo primitivo y G no contiene una subdivisión de K_4 como subgráfica.

Demostración. Ver [11, Theorem 2.13].

Proposición 2:

Sea C_n un ciclo de longitud n y B_n su matriz de incidencia. Entonces.

$$\text{Rank}(B_n^t) = \begin{cases} n & \text{si } n \text{ es impar} \\ n - 1 & \text{si } n \text{ es par} \end{cases}$$

Demostración. Las columnas de B_n^t son los vectores

$$b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}, \dots, b_{n-1} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, b_n = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Si n es impar, son linealmente independientes. Si n es par, los vectores $b_1 \dots, b_{n-1}$ son linealmente independientes y

$$b_n = \sum_{i=1}^{n-1} (-1)^{i+1} b_i.$$

Proposición 3:

Sea $A = A(C_n)$ la matriz de adyacencia de un n ciclo, entonces

$$\text{Rank}(A) = \begin{cases} n & \text{si } 4 \nmid n \\ n - 2 & \text{si } 4 \mid n \end{cases}$$

Demostración. Suponemos que $E(C_n) = \{x_1x_2, x_2x_3, \dots, x_{n-1}x_n, x_1x_n\}$ y consideramos la gráfica L_n cuyas aristas son:

$$\{x_i x_j \mid 1 \leq i, j \leq n, j \equiv i + 2 \pmod{n}\}$$

Si n es impar, esta gráfica es un ciclo de longitud n . Si n es par, la gráfica consiste en dos ciclos disjuntos de longitud $\frac{n}{2}$.

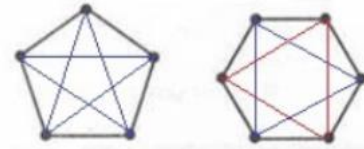


Figura 4. La gráfica L_n para el caso impar y par respectivamente.

Ahora, consideramos las permutaciones siguientes, para cualquier n

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots & n \\ 1 & [\frac{n}{2}] + 1 & 2 & [\frac{n}{2}] + 2 & 3 & \dots & [\frac{n}{2}] \end{pmatrix}$$

Para n par,

$$\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots & n \\ \frac{n}{2} + 1 & 1 & \frac{n}{2} + 2 & 2 & \frac{n}{2} + 3 & \dots & \frac{n}{2} \end{pmatrix}$$

Finalmente, para n impar,

$$\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots & n-1 & n \\ [\frac{n}{2}] + 1 & 1 & [\frac{n}{2}] + 2 & 2 & [\frac{n}{2}] + 3 & \dots & \frac{n-1}{2} & n \end{pmatrix}$$

La matriz σA^τ es la matriz obtenida al aplicar la permutación σ a las columnas de A y la permutación τ a las filas de A . Entonces tenemos.

$$\sigma A^\tau = \begin{cases} B_n^t & \text{si } n \text{ es impar} \\ \begin{pmatrix} B_{\frac{n}{2}}^t & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & B_{\frac{n}{2}}^t \end{pmatrix} & \text{si es par} \end{cases}$$

Como el rango es invariante bajo permutaciones de filas y columnas, tenemos.

$$\text{Rank}(A) = \text{Rank}(\sigma A^\tau) = \begin{cases} n & \text{si } n \text{ es impar} \\ \frac{n}{2} + \frac{n}{2} & \text{si } n \equiv 2 \pmod{4} \\ \frac{n}{2} - 1 + \frac{n}{2} - 1 & \text{si } 4 \mid n \end{cases} = \begin{cases} n & \text{si } 4 \nmid n \\ n - 2 & \text{si } 4 \mid n \end{cases}$$

Definición 2: Sean G y H graficas simples disjuntas, Q_n y P_n dos n -clanes $Q_n \equiv K_n \equiv P_n$ de G y respectivamente, definimos la suma por clanes o clan-suma de G y H como la gráfica $G +_{K_n} H$ cuyos vértices son $V(G) \cup V(H) / \sim$ donde las clases de equivalencia son $\{x_i, \varphi(x_i)\}$ si $x_i \in$

Ejemplo 6: La 1-suma de dos graficas.

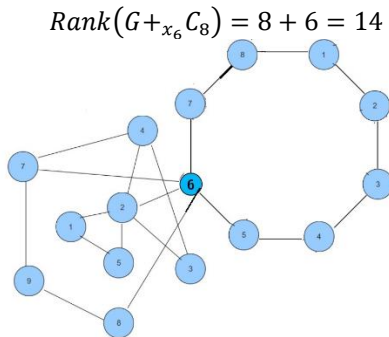


Figura 8. El rango de la 1-suma de una gráfica y un 8-ciclo.

La idea de esta etapa del proyecto es poder descomponer graficas más complejas en graficas más pequeñas de las cuales conocemos su rango. Por ejemplo.

Ejemplo 7: la siguiente graficas de rango 7, la podemos descomponer en tres graficas más pequeñas de rango 3, 2 y 2

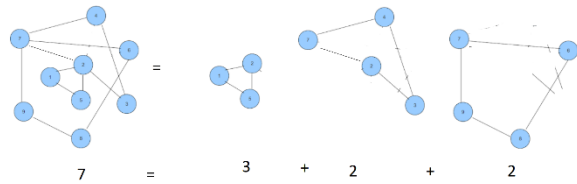


Figura 9. La descomposición en 1-sumas de una gráfica en 3 graficas de orden más pequeños con sus respectivos rangos de matriz de adyacencia.

Ejemplo 8: El resultado anterior no se puede generalizar para las 2-sumas, pues podemos usar el Ejemplo 1, el cual lo escribimos como 2-sumas de las graficas que se muestra en la siguiente figura, donde dichas graficas tienen rangos 3, 2 y 2 respectivamente cuya suma es $7 \neq 8$, que es el rango de la gráfica original.

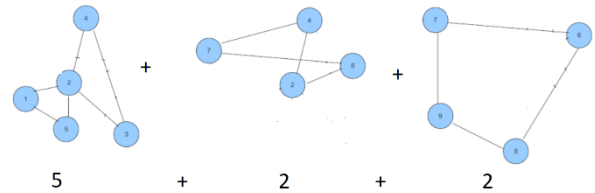
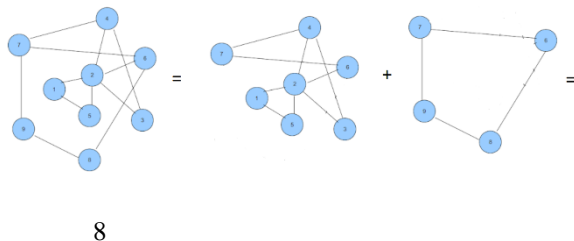


Figura 10. Las 3 graficas tienen rango 5, 2, 2 respectivamente. Pero la gráfica original tiene rango 8.

DISCUSIÓN Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

En [11] se estudia el rango libre y el rango cíclico de una gráfica los que se denotan por $frank(G)$ y $rank(G)$ respectivamente, no debemos confundir estos rangos con el rango de la matriz de adyacencia $rank(A(G))$ o el de la matriz de incidencia $rank(B(G))$ que no son lo mismo, pero resulta estar relacionados con la dimensión de Krull del subanillo de aristas $k[G]$ de G , los cuales coinciden. Y lo cual le da mucha importancia al estudio de teste rango dentro en el álgebra conmutativa.

Si bien el ejemplo 8 podría desmotivarnos, ya que a los matemáticos nos interesan propiedades lineales, propiedades que preserven las operaciones, en este caso la clan suma, esto no debe ser impedimento, pues nuestro objetivo es calcular el rango y no precisamente que el rango sea lineal.



Notamos que la gráfica de rango 5 que es uno de los sumandos en el ejemplo 8, es una de las graficas caracterizadas de rango 5 en [9, Theorem 3]. La grafica G_{22} [9, Figura 3]

La prueba de la Proposición 1, es una prueba para un caso particular, el caso general es enunciado y probado en [13, Colloray 6.3]. Pues en este caso, si n es impar, C_n es no bipartita y si n es par entonces C_n es bipartita.

En [14] estudian propiedades moleculares a atreves de graficas moleculares, aquí implementan un método estadístico para analizar los datos de que arroja dicha gráfica y que mejora el clásico GNN (redes neuronales graficas) donde vemos que nuestro proyecto y los resultados de este podrían contribuir en mejorar aún más este método.

Similarmente en [15] trabajan con el modelo MPNN (message-passing Neuralnet Works) para construir el potencial empírico, para mejorar la precisión informática y la capacidad de generalización. Donde nuestros resultados pueden ayudar.

CONCLUSIONES

Como hemos mencionado, este sólo es el inicio de un estudio que llevará un largo tiempo, pero que será un pilar en el desarrollo de las energías renovables, por ahora logramos encontrar el rango de la matriz de adyacencia para sumas de gráficas y $4k$ -ciclos.

Lo siguiente será estudiar la suma de cualesquiera ciclos en general y así lograrlo para las gráficas anilladas, concluimos que, aunque tenemos camino por recorrer en este problema vamos encamados y con buenos resultado. Pero son la base con la estudiar y caracterizar gráficas moleculares más generales como las de los polímeros, las cuáles son el objetivo del proyecto.

El siguiente paso será el cálculo estadístico para la búsqueda de moléculas con características deseadas por medio de medio algoritmos de aprendizaje automático como los MPNN y GNN los que podremos mejorar con nuestro resultados.

BIBLIOGRAFÍA

[1] S. Akbari, P. J. Cameron, G. B. Khosrovshahi. Ranks and signatures of adjacency matrices.

[2] L. Wang and D. Wong (2014), Bounds for the matching number, the edge chromatic number and the independence number of a graph in terms of rank}, Discrete Appl. Math. **166**, páginas 276-281.

[3] A. Kotlov(1997), Rank and chromatic number of a graph}, J. Graph Theory **26**, páginas 1–8.

[4] C.D. Godsil and G.F. Royle(2001), Chromatic number and the 2-rank of a graph, J. Combin. Theory Ser. B **81** páginas 142–149.

[5] A. Kotlov, L. Lovász (1996), The rank and size of graphs, J. Graph Theory **23(2)**, , páginas 185–189.

[6] W. H. Haemers M. J. P. Peeters (2012), Designs, Codes and Cryptography. The maximum order of adjacency matrices of graphs with a given rank volume **65**, páginas 223–232.

[7] I. Sciriha (1999), On the rank of graphs, in: Y. Alavi, D.R. Lick, A. Schwenk (Eds.), Combinatorics, Graph Theory, and Algorithms, vol. II, New Issue Press, Western Michigan University, Kalamazoo, Michigan, páginas 769–778.

[8] B. Cheng and B.L. Liu(2007), On the nullity of graphs, electron, J. Linear Algebra. **16**, páginas 60–67.

[9] G.J. Chang, L.-H. Huangd and H.-G. Yeh(2012) (2012), A characterization of graphs with rank 5. Linear Algebra Appl., 436, páginas 4241-4250.

[10] G.J. Chang, L.-H. Huangd and H.-G. Yeh(2012) A characterization of graphs with rank 4. Linear Algebra Appl., 434, páginas 1793–1798.

[11] I. Gitler, E. Reyes, R. H. Villarrea eal(2010), Ring graphs and complete intersection toric ideals. Discrete Mathematics, Vol. **310**, No. 3

[12] Mahdi Reza Khorsandi(2020), Graphs whose line graphs are ring graphs, AKCE International Journal of Graphs and Combinatorics . **Volumme 17**, Pag. 801-803. Issue 3.

[13] R. H. Villarreal (2003.), Monomial Algebras and Polyhedral Geometry, Handbook of Algebra, **Vol. 3**, 257–314, Elsevier Science B.V., Amsterdam.

[14] Shengli Jiang, Shiyi Qin, Reid C. VanLehn, Prasanna Balaprakash and Victor M. Zavala. (2023) Uncertainty Quantification for Molecular Property Predictions with Graph Neural Architecture Search. ArXiv preprint.

[15] HaiLan, Xian Wei (2023) Simplicial Message Passing for Chemical Property Prediction, Preprint ArXiv

ROLES DE CONTRIBUCIÓN

| Rol | Autor (es) |
|--|--------------------------|
| Conceptualización, Metodología, Administración del Proyecto, Supervisión | Jonathan Toledo Toledo |
| Curación de datos 50%, Software, Validación | Nancy Márquez Lázaro |
| Curación de datos 25%, Redacción 50%, Visualización 50 %, | Azucena Escobar Santiago |
| Curación de datos 25%, Redacción 50%, Visualización 50 %, | Darío Salvador García |



Esta obra está bajo una licencia internacional Creative Commons Atribución 4.0.