

---

# La Función de Green y el Índice de Kirchhoff de Redes Cluster <sup>\*</sup>

C. Araúz, E. Bendito, A. Carmona y A.M. Encinas<sup>1</sup>

Dept. Matemàtica Aplicada III, UPC

{cristina.arauz, enrique.bendito, angeles.carmona, andres.marcos.  
encinas}@upc.edu

**Resumen.** En este trabajo determinamos las Funciones de Green, respecto de un peso fijado sobre los vértices, en una amplia clase de redes compuestas que se engloban bajo la denominación de redes cluster. También aplicamos las expresiones obtenidas al cálculo de la *resistencia efectiva*, respecto de un peso, entre cualquier par de vértices y el Índice de Kirchhoff de la red *cluster*, en términos de los parámetros correspondientes a cada uno de sus factores. Finalmente mostramos que la particularización de nuestros resultados al caso estándar, esto es, al caso de grafos con peso constante en los vértices recupera las expresiones obtenidas por otros autores en trabajos previos.

**Palabras clave:** Índice de Kirchhoff, Resistencia efectiva, Laplaciano, Cluster

## 1 Introducción

El Índice de Kirchhoff fue introducido en el campo de la Química Orgánica como una alternativa mejor a otros parámetros usados para discriminar entre diferentes moléculas con formas y estructuras similares (ver [10]). Desde entonces, se ha desarrollado una nueva línea de investigación con una cantidad de producción considerable y se ha computado el Índice de Kirchhoff para algunas clases de grafos con simetrías; ver, por ejemplo, [2,3,7,8,12] y las referencias que en ellos se indican.

También resulta de sumo interés calcular este parámetro para redes compuestas y encontrar posibles relaciones entre los Índices de Kirchhoff de las redes de origen y los de sus composiciones. Recientemente, se ha resuelto este problema en algunos tipos de grafos compuestos como el producto, unión, corona, cluster; ver [13], donde la técnica empleada se basa en la relación entre la resistencia efectiva y el Índice de Kirchhoff con los autovalores de la red o grafo, ver por ejemplo [3].

---

<sup>\*</sup> Trabajo parcialmente financiado por la Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología mediante el proyecto MTM2007-62551.

En [1] y en [4], los autores introdujeron el concepto de resistencia efectiva respecto de un peso sobre los vértices de la red, con el objeto de caracterizar qué matrices positivas son inversas de  $M$ -matrices simétricas y en [5] llevaron a cabo un estudio sistemático de estos nuevos parámetros, calcularon los Índices de Kirchhoff correspondientes y establecieron su relación con los autovalores y autofunciones de operadores de Schrödinger semidefinidos positivos.

En este trabajo determinaremos las resistencias efectivas, respecto de un peso, y el Índice de Kirchhoff correspondiente, para un tipo especial de redes compuestas, concretamente las denominadas *redes cluster*. A diferencia de [5], donde las técnicas se basaron en la Teoría del Potencial asociada a los operadores de Schrödinger, nuestros razonamientos se basarán aquí en las relaciones entre las funciones de Green asociadas a tales operadores y la resistencia efectiva establecidas en [4]. Por tanto, después de la introducción de las principales definiciones de los operadores involucrados y sus propiedades, obtenemos la expresión de la función de Green de una red cluster en términos de las funciones de Green de los factores y, como consecuencia, la expresión del Índice de Kirchhoff y de las resistencias efectivas entre todo par de nodos, todo ello en función de los parámetros análogos de los factores. Finalmente, damos un ejemplo de aplicación de dichos resultados.

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  $c: V \times V \rightarrow [0, +\infty)$  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  $x \in V$*  y  $1$  es la función definida como  $1(x) = 1$ , para cada  $x \in V$ . El producto interno estándar en  $\mathcal{C}(V)$  se denota por  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , donde si  $u, v \in \mathcal{C}(V)$  entonces  $\langle u, v \rangle = \sum_{x \in V} u(x)v(x)$ . Por otro lado,  $\omega \in \mathcal{C}(V)$  se denomina un *peso* si satisface  $\omega(x) > 0$  para cada  $x \in V$  y además  $\langle \omega, \omega \rangle = 1$ . El conjunto de pesos sobre  $V$  será denotado por  $\Omega(V)$ .

El *Laplaciano* de  $\Gamma$  es el operador  $\mathcal{L}: \mathcal{C}(V) \rightarrow \mathcal{C}(V)$  definido para cada  $u \in \mathcal{C}(V)$  como  $\mathcal{L}(u)(x) = \sum_{y \in V} c(x, y)(u(x) - u(y))$ , para cada  $x \in V$ .

Dada  $q \in \mathcal{C}(V)$ , el *operador de Schrödinger* en  $\Gamma$  con *potencial  $q$*  es el endomorfismo de  $\mathcal{C}(V)$  que asigna a cada  $u \in \mathcal{C}(V)$  la función  $\mathcal{L}_q(u) = \mathcal{L}(u) + qu$ , donde  $qu \in \mathcal{C}(V)$  está definida como  $(qu)(x) = q(x)u(x)$ ; ver por ejemplo [1,9]. Es bien conocido que un operador de Schrödinger es autoadjunto y estamos interesados en aquellos operadores de Schrödinger que son semidefinido positivos. La caracterización de este tipo de operadores se obtuvo en [1] considerando para cualquier  $\omega \in \Omega(V)$ , el *potencial determinado por  $\omega$*  definido como la función  $q_\omega = -\omega^{-1}\mathcal{L}(\omega)$ .

**Proposición 1 ([1, Prop. 3.3]).** *El operador de Schrödinger  $\mathcal{L}_q$  es semi-definido positivo y singular sii existe un peso  $\omega \in \Omega(V)$  tal que  $q = q_\omega$ . Además,  $\omega$  está unívocamente determinado y  $\mathcal{L}_{q_\omega}(v) = 0$  sii  $v = a\omega$ ,  $a \in \mathbb{R}$ .*

Si  $\omega \in \Omega(V)$ , la Alternativa de Fredholm establece que dada  $f \in \mathcal{C}(V)$  la ecuación  $\mathcal{L}_{q_\omega}(u) = f$ , denominada *ecuación de Poisson*, tiene solución sii  $\langle f, \omega \rangle = 0$  y además en este caso existe una única solución verificando  $\langle u, \omega \rangle = 0$ .

El operador que asigna a cada  $f \in \mathcal{C}(V)$  la única  $u \in \mathcal{C}(V)$  tal que  $\mathcal{L}_{q_\omega}(u) = f - \langle \omega, f \rangle \omega$  y  $\langle u, \omega \rangle = 0$  se denomina *operador de Green* y se denota por  $\mathcal{G}_{q_\omega}$ ; ver [4]. La *función o núcleo de Green* es  $G_{q_\omega} : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  definida como  $G_{q_\omega}(x, y) = \mathcal{G}_{q_\omega}(\varepsilon_y)(x)$ , para cualquier par  $x, y \in V$ . Observemos que  $\mathcal{G}_q(\omega) = 0$  y que además para cada  $u \in \mathcal{C}(V)$

$$\mathcal{G}_{q_\omega}(\mathcal{L}_{q_\omega}(u)) = \mathcal{L}_{q_\omega}(\mathcal{G}_{q_\omega}(u)) = u - \omega \langle u, \omega \rangle. \quad (1)$$

**Definición 1 ([4,5]).** *Si  $u, v \in \mathcal{C}(V)$  son soluciones de las ecuaciones de Poisson  $\mathcal{L}_{q_\omega}(u) = \frac{\varepsilon_x}{\omega(x)} - \frac{\varepsilon_y}{\omega(y)}$  y  $\mathcal{L}_{q_\omega}(v) = \frac{\varepsilon_x}{\omega(x)} - \omega$ , respectivamente, definimos la resistencia efectiva entre  $x$  e  $y$  respecto del peso  $\omega$  como*

$$R_\omega(x, y) = \langle \mathcal{L}_q(u), u \rangle = \frac{u(x)}{\omega(x)} - \frac{u(y)}{\omega(y)}$$

y la resistencia total en  $x$  respecto del peso  $\omega$  como

$$r_\omega(x) = \langle \mathcal{L}_q(v), v \rangle = \frac{v(x)}{\omega(x)} - \frac{1}{n} \langle v, \omega \rangle.$$

Definimos finalmente el Índice de Kirchhoff de  $\Gamma$  respecto del peso  $\omega$  como

$$k(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in V} R_\omega(x, y) \omega^2(x) \omega^2(y).$$

Observemos que para cada  $x, y \in V$ , la definición de  $r_\omega(x)$  y de  $R_\omega(x, y)$  no dependen ni de  $u$  ni de  $v$ , respectivamente. Además,  $r_\omega$  es siempre positiva, mientras que  $R_\omega$  es simétrica, no negativa y  $R_\omega(x, y) = 0$  sii  $x = y$ .

Las siguientes fórmulas, que expresan estos diferentes parámetros en términos de la función de Green, serán cruciales en el momento de obtener los principales resultados de este trabajo; ver las demostraciones en [4].

**Proposición 2 ([4, Prop. 4.3]).** *Para cualquier par  $x, y \in V$  se cumple:*

$$r_\omega(x) = \frac{G_q(x, x)}{\omega^2(x)} \quad y \quad R_\omega(x, y) = r_\omega(x) + r_\omega(y) - \frac{2G_q(x, y)}{\omega(x)\omega(y)}.$$

En consecuencia,

$$G_q(x, y) = \frac{1}{2}\omega(x)\omega(y)\left(r_\omega(x) + r_\omega(y) - R_\omega(x, y)\right),$$

$$k(\omega) = \sum_{x \in V} r_\omega(x)\omega^2(x) = \sum_{x \in V} G_q(x, x)$$

y

$$r_\omega(x) = \sum_{y \in V} R_\omega(x, y)\omega^2(y) - k(\omega).$$

Cuando  $\omega$  es constante, la penúltima de las igualdades de la proposición anterior establece que el Índice de Kirchhof de una red es la traza de la inversa de Moore-Penrose del laplaciano combinatorio de la red. Este es un resultado ampliamente conocido, y utilizado en las aplicaciones, ver por ejemplo [8,13], aunque debemos remarcar que en estos trabajos el Índice de Kirchhoff aparece multiplicado por  $n$ , debido a que nosotros consideramos pesos normalizados.

## 2 Índices de Kirchhoff en redes Cluster

En la literatura el cluster  $\Gamma_0\{\Gamma_1\}$  de dos grafos  $\Gamma_0 = (V_0, E_0)$  y  $\Gamma_1 = (V_1, E_1)$ , tales que  $V_0 \cap V_1 = \emptyset$ , y un vértice distinguido de  $V_1$  consiste en crear  $|V_0|$  copias de  $\Gamma_1$  e identificar cada vértice de  $V_0$  con el vértice distinguido de una de las copias de  $\Gamma_1$ , manteniendo las ramas originales en cada factor, ver [13]. En este trabajo consideraremos la siguiente generalización.

Sea  $\Gamma_0 = (V_0, E_0, c_0)$ , donde  $V_0 = \{x_1, \dots, x_m\}$ , una red conexa y para cada  $i = 1, \dots, m$  consideremos  $\Gamma_i = (V_i, E_i, c_i)$  una red conexa tal que  $x_i \in V_i$ . Llamamos *red cluster con base  $\Gamma_0$  y peso  $\omega$*  a la red  $\Gamma$ , también denotada por  $\Gamma_0\{\Gamma_1, \dots, \Gamma_m\}$ , cuyo conjunto de vértices es  $V = \coprod_{i=1}^m V_i$  la unión disjunta de todos los conjuntos de vértices y cuya conductancia está dada por  $c(x, y) = c_i(x, y)$ , para todo par  $x, y \in V_i$ ,  $i = 0, \dots, m$  y por  $c(x, y) = 0$  en caso contrario.

Por otro lado,  $\omega \in \Omega(V)$  es un peso en  $V$ , y para cada  $i = 0, \dots, m$  se define el valor  $\sigma_i = \left(\sum_{x \in V_i} \omega(x)^2\right)^{\frac{1}{2}}$ . Entonces, dado  $i = 0, \dots, m$  si para cada  $x \in V_i$  definimos  $\omega_i(x) = \sigma_i^{-1}\omega(x)$ , es claro que  $\omega_i \in \Omega(V_i)$ ; es decir, hemos restringido el peso  $\omega$  para obtener pesos derivados de éste en cada factor de la red cluster.

Para cada  $i = 0, \dots, m$  identificamos  $\mathcal{C}(V_i)$  con el subespacio de  $\mathcal{C}(V)$  formado por las funciones que son nulas en  $V \setminus V_i$ . Por otro lado, si  $u \in \mathcal{C}(V)$ , la restricción de  $u$  a  $V_i$ ,  $i = 0, \dots, m$  se denota también por  $u$ . Observamos que si  $u \in \mathcal{C}(V_i)$  y  $v \in \mathcal{C}(V)$ , entonces  $\langle u, v \rangle = \sum_{x \in V_i} u(x)v(x)$ . En particular, si  $u \in \mathcal{C}(V_i)$  y  $v \in \mathcal{C}(V_j)$  donde  $0 \leq i < j \leq m$ , entonces  $\langle u, v \rangle = 0$  cuando  $i \neq 0$ , mientras que  $\langle u, v \rangle = u(x_j)v(x_j)$  cuando  $i = 0$ .

Denotamos por  $\mathcal{L}$  al Laplaciano combinatorio de  $\Gamma$  y para cada  $i = 0, \dots, m$  por  $\mathcal{L}^i$  al Laplaciano combinatorio de la red  $\Gamma_i$ .

**Lema 1.** *Para toda  $u \in \mathcal{C}(V)$ , se verifica:*

$$\mathcal{L}(u)(x) = \mathcal{L}^i(u)(x) + \mathcal{L}^0(u)(x_i)\varepsilon_{x_i}(x), \text{ para todo } i = 1, \dots, m, \quad x \in V_i.$$

**Lema 2.** *Consideremos los potenciales  $q_\omega = -\omega^{-1}\mathcal{L}(\omega)$  definido en  $V$  y  $q_{\omega_i} = -\omega_i^{-1}\mathcal{L}^i(\omega_i)$  definido en  $V_i$ , para  $i = 0, \dots, m$ . Entonces,*

$$q_\omega = q_{\omega_i} + q_{\omega_0}(x_i)\varepsilon_{x_i} \quad \text{en } V_i, \quad i = 0, \dots, m.$$

**Proposición 3.** *Para toda  $u \in \mathcal{C}(V)$ , se verifica:*

$$\mathcal{L}_{q_\omega}(u)(x) = \mathcal{L}_{q_{\omega_i}}^i u(x) + \mathcal{L}_{q_{\omega_0}}^0 u(x_i)\varepsilon_{x_i}(x) \quad \text{para todo } x \in V_i, \quad i = 0, \dots, m.$$

## 2.1 Función de Green y resistencias efectivas

El principal objetivo de esta sección es obtener la función de Green de la red cluster en términos de las funciones de Green de sus factores. Como consecuencia, obtendremos también los Índices de Kirchhoff y las resistencias efectivas respecto del peso dado en términos de los parámetros análogos de los factores, simplemente aplicando las identidades de la Proposición 2. A lo largo de esta sección,  $\mathcal{G}_{q_{\omega_i}}^i$  y  $G_{q_{\omega_i}}^i$  denotarán el operador y la función de Green asociados al operador de Schrödinger  $\mathcal{L}_{q_{\omega_i}}^i$  en  $\Gamma_i$ , donde  $i = 0, \dots, m$ .

**Proposición 4.** *Si  $f \in \mathcal{C}(V)$  es tal que  $\langle \omega, f \rangle = 0$ , entonces la única solución de la ecuación de Poisson  $\mathcal{L}_q(u) = f$  tal que  $\langle \omega, u \rangle = 0$  es:*

$$u = \sum_{i=1}^m \left( \mathcal{G}_{q_{\omega_i}}^i(f) - h(x_i)\mathcal{G}_{q_{\omega_i}}^i(\varepsilon_{x_i}) + d_i\omega_i \right) - C\omega, \quad ,$$

donde para cada  $i = 1, \dots, m$

$$h(x_i) = \frac{\langle f, \omega_i \rangle}{\omega_i(x_i)},$$

$$d_i = \frac{1}{\omega_i(x_i)} \left( \mathcal{G}_{q_{\omega_0}}^0(h)(x_i) - \mathcal{G}_{q_{\omega_i}}^i(f)(x_i) + h(x_i)G_{q_{\omega_i}}^i(x_i, x_i) \right),$$

$$C = \sum_{i=1}^m \sigma_i d_i.$$

*Demostración.* Aplicando la Proposición 3 obtenemos que si  $u$  es solución de  $\mathcal{L}_q(u) = f$ , entonces  $u$  es solución de  $\mathcal{L}_{q_{\omega_j}}^j(u) + \mathcal{L}_{q_{\omega_0}}^0(u)(x_j)\varepsilon_{x_j} = f$  en  $V_j$  para cada  $j = 1, \dots, m$ . Por tanto, si consideramos la función  $h \in \mathcal{C}(V_0)$

definida como  $h = \mathcal{L}_{q\omega_0}^0(u)$ , entonces  $u$  es solución de  $\mathcal{L}_q(u) = f$  sii para cada  $j = 1, \dots, m$

$$\mathcal{L}_{q\omega_j}^j(u) = f - h(x_j)\varepsilon_{x_j}, \text{ en } V_j.$$

Teniendo en cuenta que  $\mathcal{L}_{q\omega_j}^j(\omega_j) = 0$  para cada  $j = 1, \dots, m$ , de las identidades anteriores concluimos que

$$0 = \langle f, \omega_j \rangle - h(x_j)\omega_j(x_j)$$

y por tanto,  $h(x_j) = \frac{\langle f, \omega_j \rangle}{\omega_j(x_j)}$ ,  $j = 1, \dots, m$ .

Por otra parte, como  $\langle f - h(x_j)\varepsilon_{x_j}, \omega_j \rangle = 0$  resulta que existe  $a_j \in \mathbb{R}$  tal que

$$u = \mathcal{G}_{q\omega_j}^j(f) - h(x_j)\mathcal{G}_{q\omega_j}^j(\varepsilon_{x_j}) + a_j\omega_j \text{ en } V_j.$$

Si para cada  $j = 1, \dots, m$  definimos  $u_j = \mathcal{G}_{q\omega_j}^j(f) - h(x_j)\mathcal{G}_{q\omega_j}^j(\varepsilon_{x_j}) + a_j\omega_j$ , entonces  $u_j \in \mathcal{C}(V_j)$  y  $u = \sum_{i=1}^m u_i$  es solución de la ecuación de Poisson. Además,

$$\langle \omega, u \rangle = \sum_{i=1}^m \langle \omega, u_i \rangle = \sum_{i=1}^m \sigma_i \langle \omega_i, u_i \rangle = \sum_{i=1}^m \sigma_i \langle \omega_i, u_i \rangle = \sum_{i=1}^m \sigma_i a_i,$$

de manera que  $\langle u, \omega \rangle = 0$  sii  $\sum_{i=1}^m a_i \sigma_i = 0$ .

Por otro lado, si definimos las funciones  $v, z \in \mathcal{C}(V_0)$  como  $v(x_j) = a_j\omega_j(x_j)$  y como  $z(x_j) = \mathcal{G}_{q\omega_j}^j(f)(x_j) - h(x_j)\mathcal{G}_{q\omega_j}^j(\varepsilon_{x_j})$ ,  $j = 1, \dots, m$ , entonces  $u = z + v$  en  $V_0$  y por tanto,  $\mathcal{L}_{q\omega_0}^0(v) = h - \mathcal{L}_{q\omega_0}^0(z)$  en  $V_0$ . Como  $\langle h - \mathcal{L}_{q\omega_0}^0(z), \omega_0 \rangle = 0$ , podemos resolver la anterior ecuación usando el operador de Green, obteniendo

$v = \mathcal{G}_{q\omega_0}^0(h - \mathcal{L}_{q\omega_0}^0(z)) + \alpha\omega_0 = \mathcal{G}_{q\omega_0}^0(h) - z + \omega_0 \langle z, \omega_0 \rangle + \alpha\omega_0 = \mathcal{G}_{q\omega_0}^0(h) - z + \beta\omega_0$  en  $V_0$ , donde  $\beta = \alpha + \langle \omega_0, z \rangle$ .

Substituyendo en esta igualdad el valor de  $v(x_j)$  y teniendo en cuenta que  $\omega_j(x_j) = \frac{\omega(x_j)}{\sigma_j} = \frac{\sigma_0\omega_0(x_j)}{\sigma_j}$ , obtenemos la siguiente expresión para los coeficientes  $a_j$

$$a_j = \frac{\mathcal{G}_{q\omega_0}^0(h)(x_j)}{\omega_j(x_j)} - \frac{z(x_j)}{\omega_j(x_j)} + \beta \frac{\sigma_j}{\sigma_0}, \quad j = 1, \dots, m$$

lo que, a su vez, que, implica que  $\sum_{i=1}^m a_i \sigma_i = 0$  sii

$$\beta = \sigma_0 \sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i}{\omega_i(x_i)} \left( z(x_i) - \mathcal{G}_{q\omega_0}^0(h)(x_i) \right),$$

de donde finalmente se deduce la identidad del enunciado.

**Teorema 1.** *La función de Green de la red cluster  $\Gamma_0\{\Gamma_1, \dots, \Gamma_m\}$  con peso  $\omega$  está determinada por las identidades*

$$G_{q_\omega} = G_{q_{\omega_j}}^j(\cdot, \cdot) + \frac{\sigma_j^2 - 1}{\omega_j(x_j)} G_{q_{\omega_j}}^j(x_j, \cdot) \otimes \omega_j + \frac{\sigma_j^2 - 1}{\omega_j(x_j)} \omega_j \otimes G_{q_{\omega_j}}^j(\cdot, x_j) + g_j \omega_j \otimes \omega_j,$$

en  $V_j \times V_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ ,

$$G_{q_\omega} = \frac{\sigma_i \sigma_j}{\omega_i(x_i)} G_{q_{\omega_i}}^i(\cdot, x_i) \otimes \omega_j + \frac{\sigma_i \sigma_j}{\omega_j(x_j)} \omega_i \otimes G_{q_{\omega_j}}^j(x_j, \cdot) + g_{ij} \omega_i \otimes \omega_j,$$

en  $V_i \times V_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ ,  $i \neq j$ ,

donde para cada  $i, j = 1, \dots, m$

$$g_j = \frac{G_{q_{\omega_0}}^0(x_j, x_j)}{\omega_j^2(x_j)} + \frac{1 - 2\sigma_j^2}{\omega_j^2(x_j)} G_{q_{\omega_j}}^j(x_j, x_j) + \sigma_j^2 \sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i^2}{\omega_i(x_i)} G_{q_{\omega_i}}^i(x_i, x_i) -$$

$$- \frac{2\sigma_j}{\omega_j(x_j)} \sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i}{\omega_i(x_i)} G_{q_{\omega_0}}^0(x_i, x_j) + \sigma_j^2 \sum_{i=1}^m \frac{\sigma_i}{\omega_i(x_i)} \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_k}{\omega_k(x_k)} G_{q_{\omega_0}}^0(x_i, x_k),$$

$$g_{ij} = \frac{G_{q_{\omega_0}}^0(x_i, x_j)}{\omega_i(x_i) \omega_j(x_j)} - \frac{\sigma_i \sigma_j}{\omega_j^2(x_j)} G_{q_{\omega_j}}^j(x_j, x_j) - \frac{\sigma_i \sigma_j}{\omega_i^2(x_i)} G_{q_{\omega_i}}^i(x_i, x_i) -$$

$$- \frac{\sigma_i}{\omega_j(x_j)} \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_k}{\omega_k(x_k)} G_{q_{\omega_0}}^0(x_k, x_j) - \frac{\sigma_j}{\omega_i(x_i)} \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_k}{\omega_k(x_k)} G_{q_{\omega_0}}^0(x_k, x_i) +$$

$$+ \sigma_i \sigma_j \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_k^2}{\omega_k^2(x_k)} G_{q_{\omega_k}}^k(x_k, x_k) + \sigma_i \sigma_j \sum_{k=1}^m \frac{\sigma_k}{\omega_k(x_k)} \sum_{l=1}^m \frac{\sigma_l}{\omega_l(x_l)} G_{q_{\omega_0}}^0(x_k, x_l)$$

*Demostración.* De la Identidad (1) se concluye que si  $y \in V$  y consideramos la función  $u = G_{q_\omega}(\cdot, y)$ , entonces  $u$  es la única solución de la ecuación de Poisson  $\mathcal{L}_{q_\omega}(u) = \varepsilon_y - \omega(y)\omega$  tal que  $\langle \omega, u \rangle = 0$ . Por tanto la expresión de  $u$  se deduce de aplicar la expresión de tal solución dada en la proposición anterior cuando  $f = \varepsilon_y - \omega(y)\omega$ . Se deja al lector la substitución de  $f = \varepsilon_y - \omega(y)\omega$  en las ecuaciones anteriores para obtener el resultado.

**Corolario 1.** *El índice de Kirchhoff del cluster  $\Gamma$  respecto del peso  $\omega$  viene dado en función del índice de Kirchhoff respecto del peso  $\omega_i$  de cada subred  $\Gamma_i$  que compone el cluster según la siguiente fórmula:*

$$k(\omega) = \sum_{i=1}^m k_i(\omega_i) + \frac{1}{2\sigma_0^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sigma_i^2 \sigma_j^2 R_{\omega_0}(x_i, x_j) + \sum_{i=1}^m \left( (1 - \sigma_i^2) \sum_{x \in V_i} r_{\omega_i}(x_i) \right),$$

donde

$$k_i(\omega_i) = \sum_{x \in V_i} G_{q_{\omega_i}}^i(x, x) \text{ es el índice de Kirchhoff de } \Gamma_i \text{ respecto del peso } \omega_i.$$

Además, las resistencias efectivas para la red cluster respecto del peso  $\omega$  vienen dadas para todo  $x, y \in V$  por:

$$R_\omega(x, y) = \frac{R_{\omega_i}(x, y)}{\sigma_i^2} \quad \text{si } x, y \in V_i;$$

$$R_\omega(x, y) = \frac{R_{\omega_j}(x, x_j)}{\sigma_j^2} + \frac{R_{\omega_i}(y, x_i)}{\sigma_i^2} + \frac{R_{\omega_0}(x_i, x_j)}{\sigma_0^2} + \frac{2\sigma_j^2 - 1}{\sigma_j^2} r_{\omega_j}(x_j) +$$

$$+ \frac{2\sigma_i^2 - 1}{\sigma_i^2} r_{\omega_i}(x_i) + 2t_{ij} \quad \text{si } x \in V_j, y \in V_i, i = 1, \dots, m, i \neq j,$$

donde para cada  $i, j = 1, \dots, m$

$$t_{ij} = - \sum_{k=1}^m \sigma_k^2 r_{\omega_k}(x_k) - \frac{1}{\sigma_0^2} \sum_{k=1}^m \sigma_k^2 r_{\omega_0}(x_k) - \frac{1}{2\sigma_0^2} \sum_{k=1}^m \sigma_k^2 R_{\omega_0}(x_k, x_i) -$$

$$- \frac{1}{2\sigma_0^2} \sum_{k=1}^m \sigma_k^2 R_{\omega_0}(x_k, x_j) + \frac{1}{2\sigma_0^2} \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \sigma_k^2 \sigma_l^2 R_{\omega_0}(x_k, x_l).$$

*Demostración.* Dejamos los cálculos, que son inmediatos a partir de las fórmulas dadas, al lector.

### 3 Aplicaciones

Para dar una aplicación práctica del cálculo de estos parámetros de una red cluster, supondremos ahora que tenemos un grafo  $\Gamma_0 = (V_0, E_0)$  con  $m = |V_0|$  y  $m$  grafos más  $\Gamma_i = (V_i, E_i)$ , no necesariamente iguales, con  $n_i = |V_i|$  para toda  $i = 1, \dots, m$ . El cluster  $\Gamma = (V, E)$  con peso constante  $\omega \equiv w \in \Omega(V)$ , grafo base  $\Gamma_0 = (V_0, E_0)$  con las notaciones anteriores y grafos satélite  $\Gamma_i = (V_i, E_i)$  representaría, en el campo de la Química Orgánica, una molécula a la que se han unido  $m$  moléculas distintas: lo que nos interesa saber es el Índice de Kirchhoff de la nueva molécula en función de los Índices de Kirchhoff de las moléculas originales.

Observemos primero que  $V = n_1 + \dots + n_m$ . Como  $\omega \in \Omega(V)$  y  $\omega \equiv w$  es constante, se tiene que  $\omega = w = \frac{1}{\sqrt{n_1 + \dots + n_m}}$ . Además,

$$\sigma_0 = w\sqrt{m}, \quad \sigma_i = w\sqrt{n_i} \quad \text{para toda } i = 1, \dots, m$$

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{m}}, \quad \omega_i = \frac{1}{\sqrt{n_i}} \quad \text{para toda } i = 1, \dots, m$$

Con las notaciones anteriores el Índice de Kirchhoff de la red cluster es:

$$k(\omega) = w^2 \sum_{i=1}^m n_i k_i(\omega_i) + \frac{w^2}{2m} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m n_i n_j R_{\omega_0}(x_i, x_j) +$$

$$+ \sum_{i=1}^m \left( \frac{1 - w^2 n_i}{n_i} \sum_{x \in V_i} R_{\omega_i}(x, x_i) \right).$$



Ahora añadimos condiciones sobre el ejemplo anterior: supongamos ahora que todos los grafos satélite  $\Gamma_1, \dots, \Gamma_m$  son el mismo grafo  $\Gamma_1$  con el mismo vértice distinguido  $x_1$ . Entonces, si definimos  $n = n_1 = \dots = n_m$ , el peso es  $\omega = w = \frac{1}{\sqrt{mn}}$ . Cuando modificamos el peso para restringirlo a cada grafo que compone este cluster, se tiene que  $\sigma_0 = w\sqrt{m}$  y  $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{m}}$  y, para toda  $i = 1, \dots, m$ ,  $\sigma_i = w\sqrt{n}$  y  $\omega_i = \frac{1}{\sqrt{n}}$ .

El índice de Kirchhoff viene dado por la siguiente igualdad:

$$k(\omega) = k_1(\omega_1) + nk_0(\omega_0) + \frac{m-1}{n} \sum_{x \in V_1} R_{\omega_1}(x, x_1) \quad (2)$$

En [13] los autores han calculado el Índice clásico de Kirchhoff para este caso particular de cluster. Queremos comparar los resultados que acabamos de obtener con los de este artículo para mostrar con ello que las generalizaciones de este trabajo son correctas y adecuadas. Para ello, debemos comparar primero las resistencias efectivas y el índice de Kirchhoff generalizado cuando el peso es constante con su noción clásica.

Sea  $G$  un grafo y  $\omega \in \Omega(G)$ . Si  $\omega = w$  constante y  $n = |V(G)|$ , entonces  $w = \frac{1}{\sqrt{n}}$ . Recordemos que si  $u \in \mathcal{C}(V)$  es la solución de la ecuación  $\mathcal{L}_{q\omega}u = \frac{\varepsilon_x}{w} - \frac{\varepsilon_y}{w} = \sqrt{n}(\varepsilon_x - \varepsilon_y)$ , con las notaciones de este trabajo sobre  $\Gamma$ , entonces se ha definido la resistencia efectiva respecto de  $w$  como

$$R_w(x, y) = \langle \mathcal{L}_{q\omega}u, u \rangle = \sqrt{n}(u(x) - u(y)).$$

Por otro lado, si  $v \in \mathcal{C}(V)$  es la solución de la ecuación  $\mathcal{L}_qv = \varepsilon_x - \varepsilon_y$  sobre  $\Gamma$ , entonces la resistencia efectiva clásica viene dada por (ver [13])

$$R(x, y) = \langle \mathcal{L}_qv, v \rangle = v(x) - v(y).$$

Denotaremos por  $k$  al índice de Kirchhoff clásico del grafo. Observando que la función  $\sqrt{n}v$  es solución de la ecuación que da la resistencia efectiva generalizada, esto es,  $\mathcal{L}_{q\omega}(\sqrt{n}v) = \frac{\varepsilon_x}{w} - \frac{\varepsilon_y}{w} = \sqrt{n}(\varepsilon_x - \varepsilon_y)$ , se deduce por unicidad de solución de la ecuación que  $\sqrt{n}v = u$  y, en consecuencia,

$$R_w = nR \quad \text{y} \quad k(w) = \frac{k}{n}.$$

Aplicando estas correspondencias al índice de Kirchhoff (2) calculado en el ejemplo que estábamos tratando, si  $k_i$  es el índice de Kirchhoff clásico del grafo  $\Gamma_i$ , con  $i = 0, 1$ , se tiene

$$k = n^2k_0 + mk_1 + nm(m-1) \sum_{x \in V_1} R(x, x_1),$$

que es exactamente la fórmula que se da en [13].

## Referencias

- [1] E. Bendito, A. Carmona and A. M. Encinas, Potential theory for Schrödinger operators on finite networks, *Rev. Mat. Iberoamericana* 21: 771–818, 2005.
- [2] 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.
- [3] E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas y J.M. Gesto. El Índice de Kirchhoff y la Capacidad de Wiener de una Red. *Libro de actas de las VI JMDA*, (J. Conde, J. Gimbert, J. M. Miret, R. Moreno, M. Valls, ed.), Lleida: 155–162, 2008.
- [4] E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas and J.M. Gesto. Characterization of symmetric  $M$ -matrices as resistive inverses. *Linear Algebra Appl.*, 430: 1336–1349, 2009.
- [5] E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas, J.M. Gesto and M. Mitjana. Kirchhoff Indexes of a network. *Linear Algebra Appl.*, 432: 2278–2292, 2010.
- [6] E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas. The Kirchhoff Indexes of Join Networks. *sometido a revisión*.
- [7] R.B. Bapat and S. Gupta, Resistance distance on wheels and fans, preprint (2009) (accessible at <http://www.isid.ac.in/rbb/>).
- [8] A. Ghosh, S. Boyd and A. Saberi, Minimizing Effective Resistance of a graph, *SIAM Rev.*, 50: 37–66, 2008.
- [9] T. Biyikoğlu, Leydold, J., P.F. Stadler, *Laplacian Eigenvectors of Graphs*, LNM 1915, Springer, Berlin, 2007.
- [10] D.J. Klein and M. Randić. Resistance distance. *J. Math. Chem.*, 12: 81–95, 1993.
- [11] Y. Yang and H. Zhang. Resistance distance and Kirchhoff index in circulant graphs. *Int. J. Quantum Chem.*, 107: 330–339, 2007.
- [12] Y. Yang and H. Zhang. Kirchhoff index of linear hexagonal chains. *Int. J. Quantum Chem.*, 108: 503–512, 2008.
- [13] C. Li, Y. Yang and H. Zhang. Kirchhoff index of composite graphs. *Discrete Appl. Math.*, 157: 2918–2927, 2009.