Caracterização de grafos extremais para os índices topológicos ABC e ABCgg

Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro - UENF

Maio, 2024

Introdução

Introdução

- A **Teoria dos Grafos (TG)** é um ramo da matemática que estuda sobre grafos.

Introdução

- A **Teoria dos Grafos (TG)** é um ramo da matemática que estuda sobre grafos.
- Um **grafo** é uma estrutura G= G(V,E), constituída por um conjunto finito e não vazio V de **vértices** e E de **arestas**.

Introdução

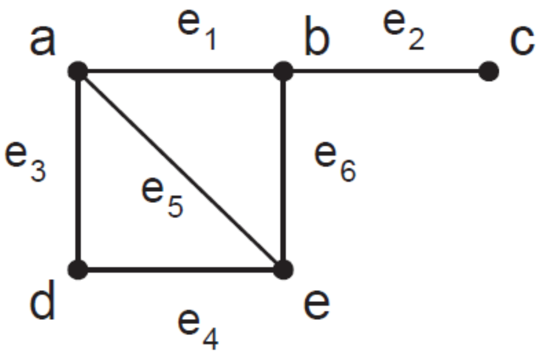


Figura 1: Grafo com 5 vértices e 6 aresas.

Introdução

- **Teoria dos Grafos Químicos (TGQ):** é um ramo da química matemática que se preocupa com todos os aspectos da aplicação da **Teoria dos Grafos (TG)** à química.

Introdução

- **Teoria dos Grafos Químicos (TGQ):** é um ramo da química matemática que se preocupa com todos os aspectos da aplicação da **Teoria dos Grafos (TG)** à química.
- **Descritor molecular:** é uma grandeza matemática que descreve a estrutura ou a forma das moléculas químicas.

Introdução

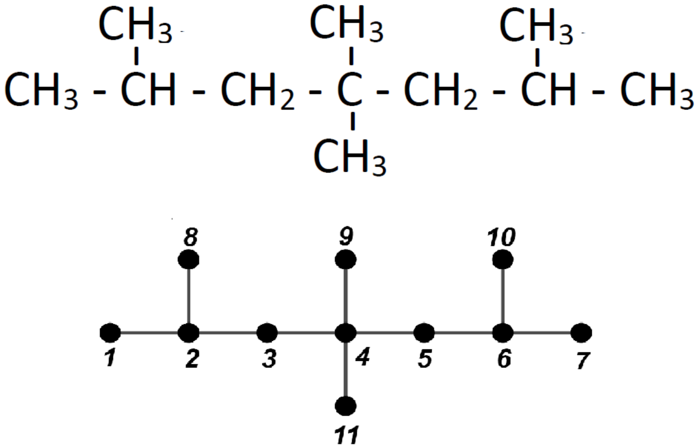


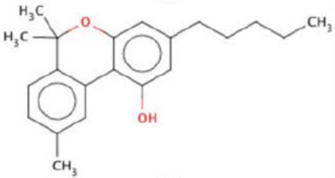
Figura 2: Grafo molecular e formula estrutural 2,4,4,6-tetrametilheptano.

Introdução

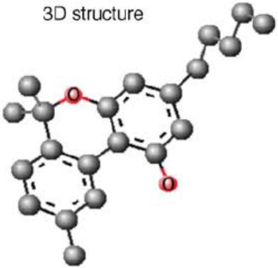
Molecular formula

$C_{21}H_{26}O_2$

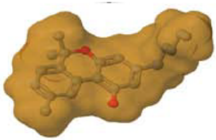
Labeled graph



3D structure



Surface



Introdução

- **Índice Topológico:** é um valor numérico associado à constituição química para correlação da estrutura química com várias propriedades físicas, reatividade química ou atividade biológica.

Introdução

- **Índice Topológico:** é um valor numérico associado à constituição química para correlação da estrutura química com várias propriedades físicas, reatividade química ou atividade biológica.
- **Classes de índices topológicos**: baseados nos graus dos vértices, baseados na distância, índices relacionados à contagem, entre outros.

Índices Topológicos baseados nos graus dos vértices

Name of index	Definition
Randiċ	$R = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{d(u).d(v)}}$
First Zagreb	$M_1 = \sum_{uv \in E(G)} (d(u) + d(v))$
Second Zagreb	$M_2 = \sum_{uv \in E(G)} (d(u).d(v))$
Sum-connectivity	$SC = \sum_{uv \in E(G)} \frac{1}{\sqrt{(d(u)+d(v)}}$
First geometric-arithmetic	$GA_1 = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2\sqrt{d(u).d(v)}}{d(u)+d(v)}$
Augmented Zagreb	$AZ = \sum_{uv \in E(G)} (\frac{d(u).d(v)}{d(u)+d(v)-2})^3$
Harmonic	$H = \sum_{uv \in E(G)} \frac{2}{(d(u)+d(v))}$

Introdução

- O **índice topológico** surgiu a partir do trabalho realizado por **Wiener**: *path number*.

Introdução

- O **índice topológico** surgiu a partir do trabalho realizado por **Wiener**: *path number*.
- **Estrada (1998):** propôs um índice topológico baseado nos graus dos vértices do grafo: **índice de conectividade atômica** ou **índice ABC** (*atom-bond connectivity*).

Introdução

- O **índice topológico** surgiu a partir do trabalho realizado por **Wiener**: *path number*.
- **Estrada (1998):** propôs um índice topológico baseado nos graus dos vértices do grafo: **índice de conectividade atômica** ou **índice ABC** (*atom-bond connectivity*).

Introdução

$$\mathrm{ABC(G)} = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{d(u)+d(v)-2}{d(u)d(v)}}$$

Onde $d(u)$ representa o número de arestas incidentes no vértice u.

Introdução: Índice ABC_{GG}

Graovac e Ghorbani (2010), propuseram uma nova versão do índice ABC: índice de *Graovac-Ghorbani* (ABC_{GG}).

Introdução: Índice ABC_{GG}

Graovac e Ghorbani (2010), propuseram uma nova versão do índice ABC: índice de *Graovac-Ghorbani* (ABC_{GG}).

$$\mathrm{ABC}_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}}$$

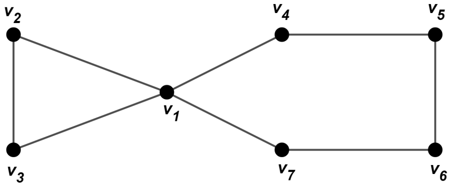
onde $n(u)$ é o número de vértices mais próximos do vértice u do que ao vértice v e $n(v)$ é definido de forma similar.

Um exemplo

Considere o seguinte grafo:

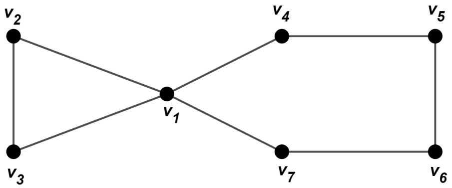
Um exemplo

Considere o seguinte grafo:



Um exemplo

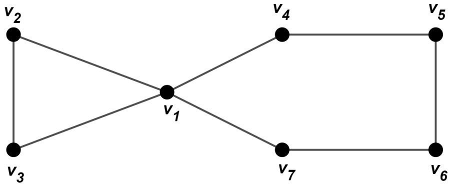
Considere o seguinte grafo:



$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} =$$

Um exemplo

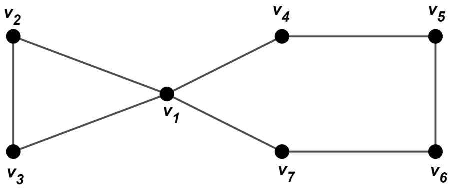
Considere o seguinte grafo:



$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}}$$

Um exemplo

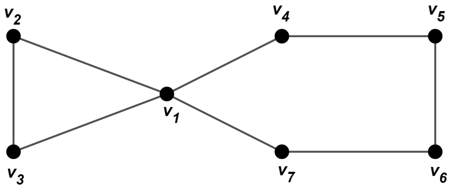
Considere o seguinte grafo:



$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}} +$$

Um exemplo

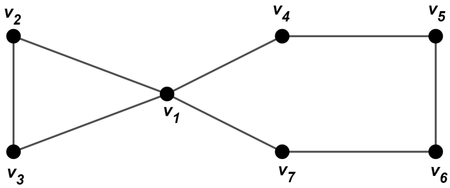
Considere o seguinte grafo:



$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}} + 2\sqrt{\frac{1+5-2}{1.5}}$$

Um exemplo

Considere o seguinte grafo:

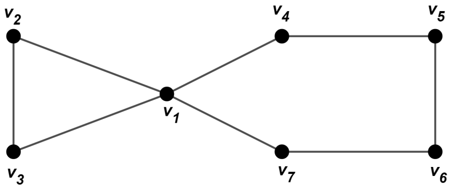


$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}} +$$

$$2\sqrt{\frac{1+5-2}{1.5}} + 4\sqrt{\frac{2+4-2}{2.4}} +$$

Um exemplo

Considere o seguinte grafo:

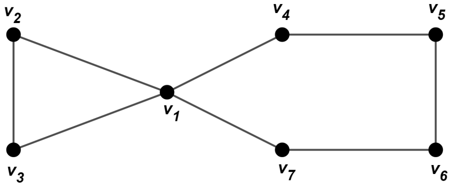


$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}} +$$

$$2\sqrt{\frac{1+5-2}{1.5}} + 4\sqrt{\frac{2+4-2}{2.4}} + \sqrt{\frac{2+2-2}{2.2}} =$$

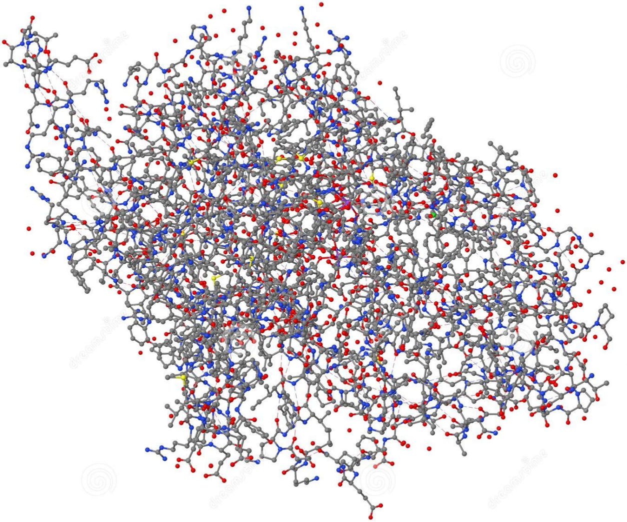
Um exemplo

Considere o seguinte grafo:



$$ABC_{GG}(G) = \sum_{uv \in E(G)} \sqrt{\frac{n(u)+n(v)-2}{n(u)n(v)}} = \sqrt{\frac{1+1-2}{1.1}} + 2\sqrt{\frac{1+5-2}{1.5}} + 4\sqrt{\frac{2+4-2}{2.4}} + \sqrt{\frac{2+2-2}{2.2}} = \frac{4}{\sqrt{5}} + \frac{5\sqrt{2}}{2}$$

Um exemplo



Justificativa

O **índice ABC** provou ser um bom modelo para a estabilidade dos alcanos lineares e ramificados, bem como para a energia de deformação dos cicloalcanos.

Justificativa

O **índice ABC** provou ser um bom modelo para a estabilidade dos alcanos lineares e ramificados, bem como para a energia de deformação dos cicloalcanos.

MATCH
Communications in Mathematical and in Computer Chemistry

MATCH Commun. Math. Comput. Chem. **75** (2016) 233-242

ISSN 0340 - 6253

Atom–Bond Connectivity Index Versus Graovac–Ghorbani Analog

Boris Furtula

Justificativa

- O potencial de predição do índice ABC_{GG} é comparado com ABC, a partir de um conjunto de dados de todos os octanos para propriedades físico-químicas *Entropia* (S) e *Fator Acentrico*.

Justificativa

- O potencial de predição do índice ABC_{GG} é comparado com ABC, a partir de um conjunto de dados de todos os octanos para propriedades físico-químicas *Entropia* (S) e *Fator Acentrico*.
- As correlações entre o índice ABC_{GG} e esses dois parâmetros físico-químicos são melhores do que em relação ao índice ABC.

Justificativa

- O potencial de predição do índice ABC_{GG} é comparado com ABC, a partir de um conjunto de dados de todos os octanos para propriedades físico-químicas *Entropia* (S) e *Fator Acentrico*.
- As correlações entre o índice ABC_{GG} e esses dois parâmetros físico-químicos são melhores do que em relação ao índice ABC.

	ABC	ABC_{GG}
S	-0.807	-0.905
Acentric Factor	-0.788	-0.977

Justificativa

- O potencial de predição de ABC_{GG} é comparado com os índices *Wiener* (W), *Balaban*(J) e *Harary* (H), a partir de um conjunto de dados de todos os octanos para propriedades físico-químicas como *Entropia* (S), *Fator Acentrico*, e *Calor de Vaporização*.

Justificativa

- O potencial de predição de ABC_{GG} é comparado com os índices *Wiener* (W), *Balaban*(J) e *Harary* (H), a partir de um conjunto de dados de todos os octanos para propriedades físico-químicas como *Entropia* (S), *Fator Acentrico*, e *Calor de Vaporização*.

	J	H	W	ABC_{GG}
S	-0.906	-0.929	0.878	-0.905
AcentFac	-0.979	-0.992	0.966	-0.977
ΔH_{VAP}	-0.707	-0.779	0.738	-0.810

Objetivos do Trabalho

Das (2016), relata vários problemas em aberto.

Applied Mathematics and Computation 275 (2016) 353–360

Contents lists available at ScienceDirect

Applied Mathematics and Computation

journal homepage: www.elsevier.com/locate/amc

ELSEVIER

On the Graovac–Ghorbani index of graphs

CrossMark

Kinkar Ch. Das*

Objetivos do Trabalho

Objetivos do Trabalho

- Para $n \in \mathbb{N}$, qual grafo possui valor mínimo para o índice ABC_{GG} dentre todos os **grafos bicíclicos** com n vértices?

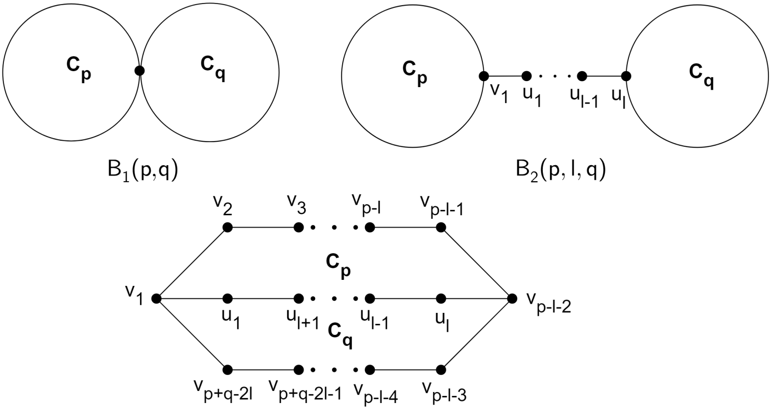
Objetivos do Trabalho

- Para $n \in \mathbb{N}$, qual grafo possui valor mínimo para o índice ABC_{GG} dentre todos os **grafos bicíclicos** com n vértices?
- qual grafo possui valor extremal para o índice ABC_{GG} dentre todos os grafos de estruturas químicas como **fulerenos?**

Objetivos do Trabalho

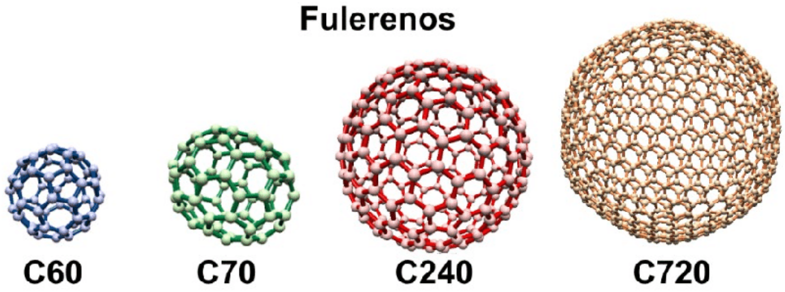
- Para $n \in \mathbb{N}$, qual grafo possui valor mínimo para o índice ABC_{GG} dentre todos os **grafos bicíclicos** com n vértices?
- qual grafo possui valor extremal para o índice ABC_{GG} dentre todos os grafos de estruturas químicas como **fulerenos?**
- qual grafo possui valor extremal para o índice ABC_{GG} dentre todos os grafos de estruturas químicas como **sistemas hexagonais**?

Um exemplo: Grafos Bicíclicos

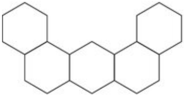


$B_1(p,q)$ $B_2(p,l,q)$ $B_3(p,l,q)$

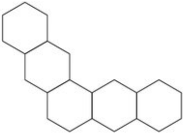
Um exemplo: Fulerenos



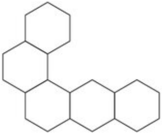
Um exemplo: Sistemas Hexagonais



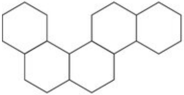
(a)



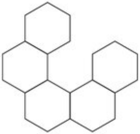
(b)



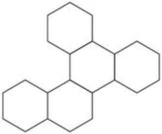
(c)



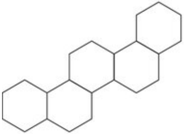
(d)



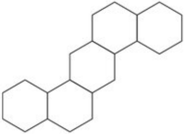
(e)



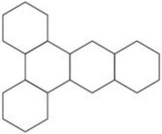
(f)



(g)



(h)



(i)

Metodologia

- Seja $\mathcal{O}(n)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices, que possui apenas um vértice com grau maior ou igual a três.

Metodologia

- Seja $\mathcal{O}(n)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices, que possui apenas um vértice com grau maior ou igual a três.
- Utilizamos o pacote *Nauty-Traces* para gerar todos grafos;

Metodologia

- Seja $\mathcal{O}(n)$ o conjunto de todos os grafos conexos com n vértices, que possui apenas um vértice com grau maior ou igual a três.
- Utilizamos o pacote *Nauty-Traces* para gerar todos grafos;
- Implementamos rotinas para os cálculos dos invariantes em Java e Python utilizando os softwares BlueJ e Cocalc, respectivamente;

Justificativa

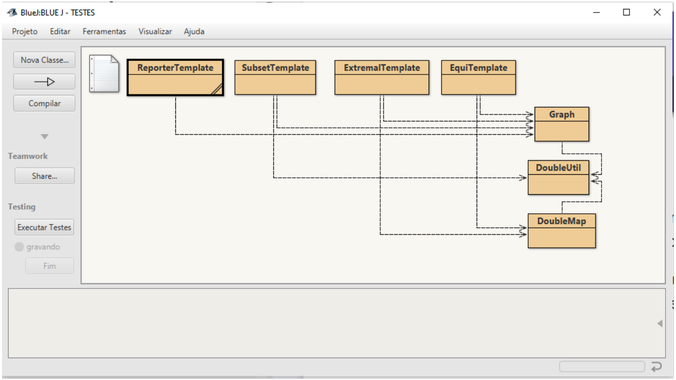


Figura 4: Software BlueJ

Justificativa

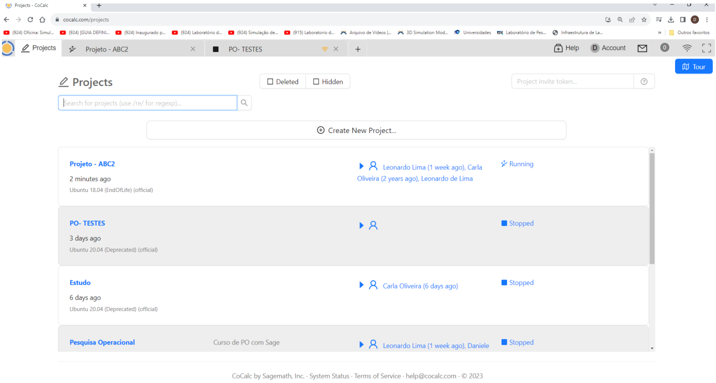


Figura 5: www.Cocalc.com

Justificativa

Simple graphs

2 vertices: all (2) connected (1)
3 vertices: all (4) connected (2)
4 vertices: all (11) connected (6)
5 vertices: all (34) connected (21)
6 vertices: all (156) connected (112)
7 vertices: all (1044) connected (853)
8 vertices: all (12346) connected (11117)
9 vertices: all (274668) connected (261080)
10 vertices: all (31MB gzipped) (12005168) connected (30MB gzipped) (11716571)
11 vertices: all (2514MB gzipped) (1018997864)

Figura 6: Grafos Gerais

Metodologia

Conjectura 1

Seja o grafo $G \in \mathcal{O}(n)$, com $n \geq 11$ par, então, temos

$$ABC_{GG}(G) \geq 2\,(n-2)\sqrt{\frac{n-3}{(n-2)n}} + \sqrt{\frac{n-2}{n-1}} + \frac{2\sqrt{n-4}}{n-2}. \qquad (1)$$

Se $n \geq 11$ ímpar, então temos que

$$ABC_{GG}(G) \geq 2\,(n-1)\sqrt{\frac{n-2}{(n+1)(n-1)}} + \sqrt{\frac{n-2}{n-1}}. \qquad (2)$$

A igualdade é válida se e somente se G for isomórfico a H.

Metodologia

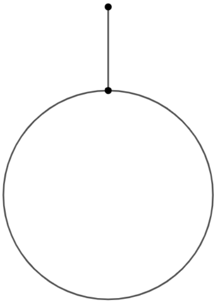


Figura 7: Grafo T.

Metodologia

Seja p e q os graus dos vértices centrais do grafo S, conforme a Figura abaixo. A partir disto, define-se a conjectura abaixo.

Metodologia

Seja p e q os graus dos vértices centrais do grafo S, conforme a Figura abaixo. A partir disto, define-se a conjectura abaixo.

Conjectura 2

Seja $G \in \mathbb{Q}$ de ordem $n \geq 10$. Então,

$$\frac{(n-2)\sqrt{2}}{2} + \sqrt{\frac{p+q-2}{pq}} \leq ABC(G) \leq \frac{\sqrt{2(n-2)}}{n-1} + (n-2)\sqrt{2}.$$

A igualdade é válida se e somente se G é o grafo isomorfo a T ou G for isomorfo a S, respectivamente.

Metodologia

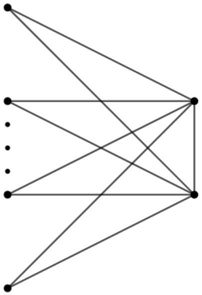


Figura 8: Grafo T.

Metodologia

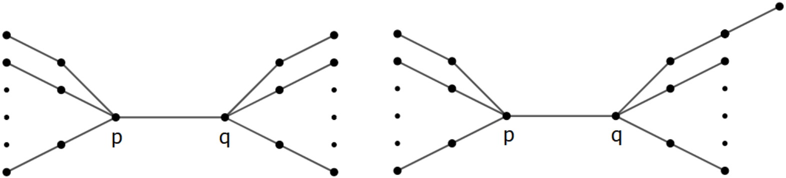
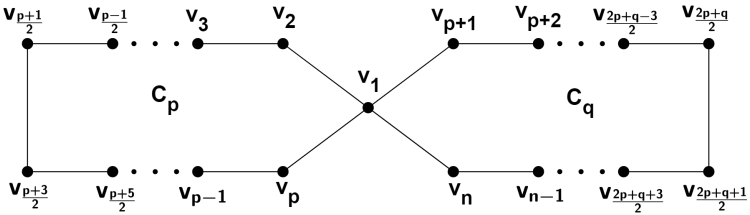


Figura 9: Grafo S para n par e ímpar, respectivamente.

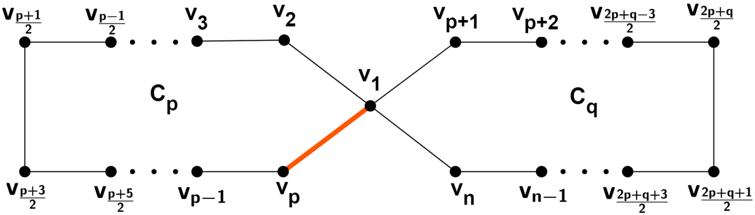
Índice ABC_{GG} para os grafos



Rotulação dos vértices do grafo $G \in B_1(n)$, onde C_p e C_q são ciclos ímpares.

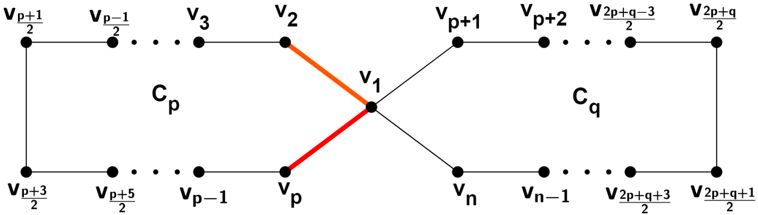
Índice ABC_{GG} para os grafos

Caso 1: C_p e C_q são ciclos ímpares.



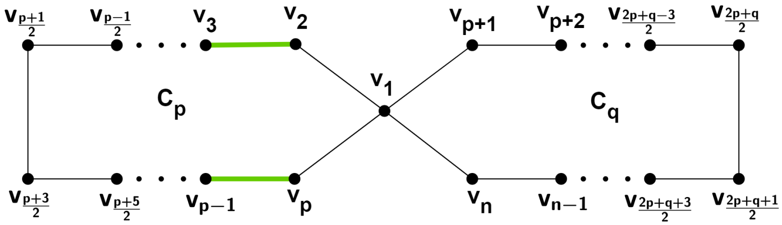
Índice ABC_{GG} para os grafos

Caso 1: C_p e C_q são ciclos ímpares.



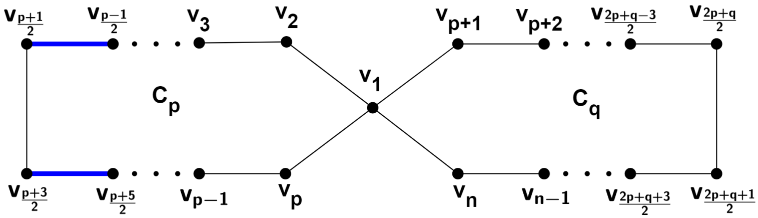
Índice ABC_{GG} para os grafos

Caso 1: C_p e C_q são ciclos ímpares.



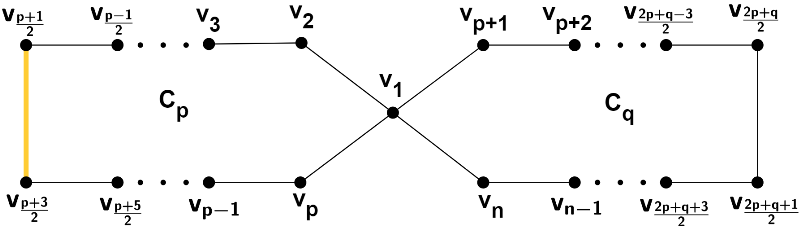
Índice ABC_{GG} para os grafos

Caso 1: C_p e C_q são ciclos ímpares.



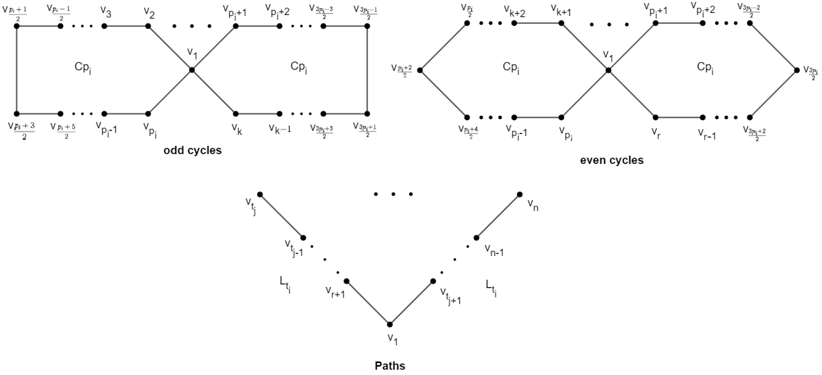
Índice ABC_{GG} para os grafos

Caso 1: C_p e C_q são ciclios ímpares.



Índice ABC_{GG} para $G \in \mathcal{O}(n)$

Graphs of odd cycles, even cycles and paths, respectively.



Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Theorem 1

Let $v_1 \in V(G)$ be the unique vertex of graph $G \in \mathcal{O}(n)$, with $d(v_1) \geq 3$, being $n = \sum_{i=1}^{w} Q_{p_i}(p_i - 1) + \sum_{j=1}^{s} Q_{t_j} t_j + 1$ the number of vertices. Then,

$$
\begin{aligned}
ABC_{GG}(G) &= \sum_{i=1}^{w} Q_{p_i} \Bigg[2(p_i - 1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_i-1)(2n-p_i-1)}} \\
&+ \frac{2\sqrt{p_i - 3}}{p_i - 1} + 2p_i\sqrt{\frac{n-2}{(p_i)(2n-p_i)}} \Bigg] \\
&+ \sum_{j=1}^{s} \sum_{i=0}^{t_j - 1} Q_{t_j} \sqrt{\frac{n-2}{(i+1)(n-i-1)}}.
\end{aligned}
$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Corollary 1.1

Let $n \geq 9$ odd, where the largest cycle is denoted by Cp_w (with odd size), the second smallest cycle, denoted by Cp_1' and the remaining cycles to be added at the vertex w denoted by Cp_1''. Then, we have

$$
\begin{aligned}
ABC_{GG}(G) &= 2(p_w-1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_w-1)(2n-p_w-1)}}+\frac{2\sqrt{p_w-3}}{p_w-1} \\
&+ 2(p_1'-1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_1'-1)(2n-p_1'-1)}}+\frac{2\sqrt{p_1'-3}}{p_1'-1}
\end{aligned}
$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

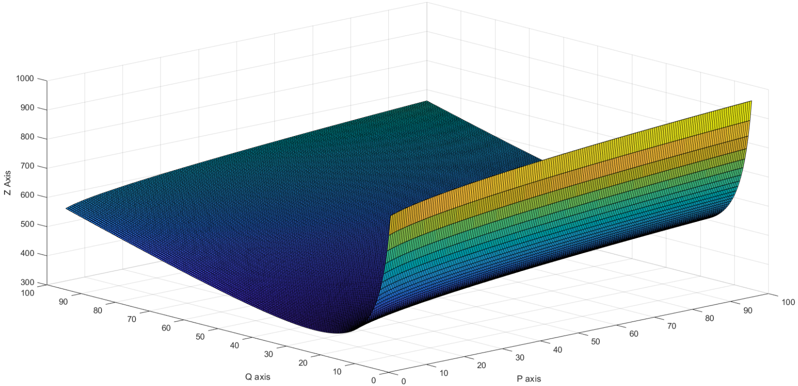


Figura 10: Function $f(p, q)$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Lemma 1.1

Let $n \geq 8$ even and $0 \leq x \leq n-6$ even. Then, the function is defined as

$$f_1(x) = 2(n-2-x)\sqrt{\frac{n-2}{(n-2-x)(n+x+2)}} + \left(\frac{x}{2}+1\right) 2\sqrt{\frac{n-3}{n-2}}.$$

Let $n \geq 9$ and $0 \leq x \leq n-5$ even. The function is defined as

$$\begin{aligned} g_1(x) &= 2(n-x-3)\sqrt{\frac{n-3}{(n-x-3)(n+x+1)}} + \frac{2\sqrt{n-x-5}}{n-x-3} \\ &+ \left(\frac{x}{2}+1\right) 2\sqrt{\frac{n-3}{n-2}}. \end{aligned}$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

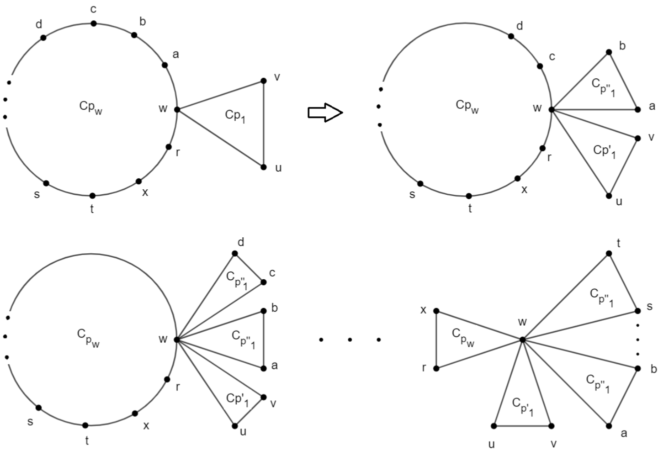


Figura 11: Vertices shift transformation of graph $B_1(3, n-2)$.

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Corollary 1.2

Let $n \geq 9$ odd, where the largest cycle is denoted by Cp_w (with odd size) and the second smallest cycle, is denoted by Cp_1. Then, we have

$$
\begin{aligned}
ABC_{GG}(G) &= 2(p_w-1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_w-1)(2n-p_w-1)}} + \frac{2\sqrt{p_w-3}}{p_w-1} \\
&+ 2(p_1-1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_1-1)(2n-p_1-1)}} + \frac{2\sqrt{p_1-3}}{p_1-1}.
\end{aligned}
$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

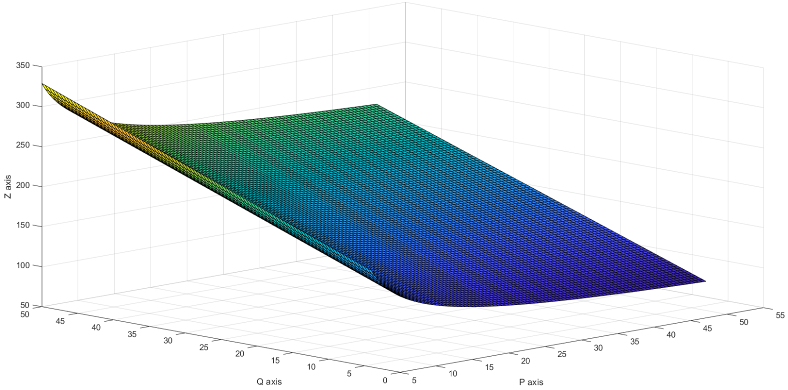


Figura 12: Function $f(p, q)$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Lemma 1.2

Let $x \geq 9$ odd and the function $f_2(x)$ and $g_2(x)$ defined as

$$f_2(x) = 2\,(n-x-3)\sqrt{\frac{n-3}{(n+x+1)(n-x-3)}} + \frac{2\,\sqrt{n-x-5}}{n-x-3}$$

and

$$\begin{aligned} g_2(x) &= 2\,(n-x-2)\sqrt{\frac{n-2}{(n+x+2)(n-x-2)}} \\ &+ 2\sqrt{\frac{n-3}{n-2}} + \sqrt{\frac{n-2}{n-1}}. \end{aligned}$$

We have that $f_2(x) < g_2(x)$.

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

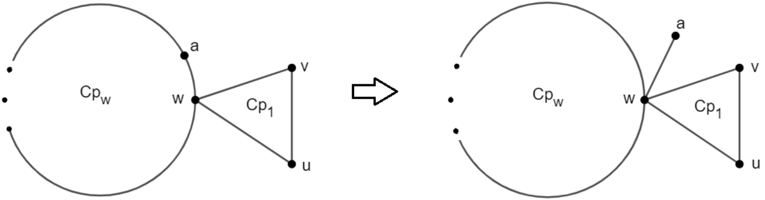


Figura 13: Edge shift transformation of graph $B_1(3, n-2)$.

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Corollary 1.3

Let $n \geq 9$. Denote the largest cycle by Cp_w (odd size) and the second smallest cycle by Cp_1. Then, we have

$$\begin{aligned} ABC_{GG}(G) &= 2p_w\sqrt{\frac{n-2}{(p_w)(2n-p_w)}} + \sqrt{\frac{n-2}{n-1}} \\ &+ 2(p_1-1)\sqrt{\frac{n-3}{(p_1-1)(2n-p_1-1)}} + \frac{2\sqrt{p_1-3}}{p_1-1}. \end{aligned}$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Corollary 1.4

Let $n \geq 8$ even, $3 \leq p \leq n-1$ for the cycle odd, $1 \leq q \leq n-3$ pendent vertices (or $n \geq 9$ odd, $3 \leq p \leq n-2$ cycle odd, $2 \leq q \leq n-3$ pendent vertices) and $n = p + q$. Then, we have,

$$\begin{aligned} ABC_{GG}(G) &= 2\,(p-1)\sqrt{\frac{p+q-3}{(p+2\,q-1)(p-1)}} + \frac{2\,\sqrt{p-3}}{p-1} \\ &+ q\sqrt{\frac{p+q-2}{p+q-1}}. \end{aligned}$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

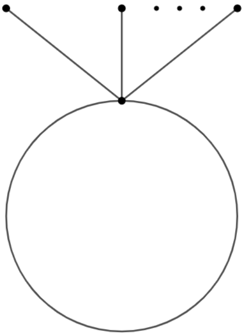


Figura 14: Graph with one cycle and pendent vertices.

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

Corollary 1.5

Let $n \geq 12$ even, $3 \leq p \leq n-1$ cycle odd, $1 \leq l \leq n-3$ odd path (or $n \geq 9$ odd, $3 \leq p \leq n-2$ cycle odd, $2 \leq l \leq n-3$ even path) and $n = p + l$. Then, we have,

$$\begin{aligned} ABC_{GG}(G) &= 2\,(p-1)\sqrt{\frac{p+l-3}{(p+2l-1)(p-1)}} + \frac{2\,\sqrt{p-3}}{p-1} \\ &+ \sqrt{n-2}\sum_{i=0}^{l-1}\frac{1}{\sqrt{(p+i)\,(l-i)}}. \end{aligned}$$

Resultado: Família $\mathcal{O}(n)$

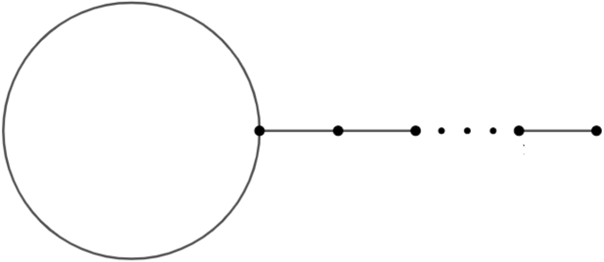


Figura 15: Graph with one cycle and one path.

Contribuições

D. Pacheco, J. Arica, G. Guillermina, L. Guillerm, Graovac-Ghorbani index for a family of graphs, *Discrete Mathematics Letters* (Submitted).

Discrete Mathematics Letters
www.dmlett.com

Discrete Math. Lett. **X** (202X) XX–XX

Graovac-Ghorbani index for a family of graphs.

Diego Pacheco, José Arica, Gudelia Guillermina, Luis Guillerm

Universidade Estadual do Norte Fluminense, Av. Alberto Lamego, 2000 - Parque California,

Contribuições

- Diego Pacheco, Carla Oliveira, Anderson Novanta *A Survey on Graovac–Ghorbani Index*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, **90 (1)** (2023) 301–312.
- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, Carla Oliveira, *On the Graovac-Ghorbani Index for Bicyclic Graphs with No Pendent Vertices*, MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, **86 (2)** (2021) 429–448.
- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, Carla Oliveira, *Graovac-Ghorbani index for bicyclic graphs with no pendant vertices*, Apresentado no International Linear Algebra Society - ILAS, 2019.

Contribuições

- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, *Novos resultados para o índice de conectividade atômica (ABC) em grafos que modelam dendrímeros*, 50º SBPO, 2018.
- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, Novos resultados para o índice de conectividade atômica (ABC) em grafos que modelam dendrímeros, 50º SBPO, 2018.

Contribuições

- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, índice de Conectividade atômica (ABC) em grafos, Apresentado no III Simpósio em Métodos Numéricos em Engenharia, Universidade Federal do Paraná, 2018.
- Diego Pacheco, Leonardo de Lima, Indice de conectividade de Atômica (ABC) para definidas Classes de Grafos a partir da Matriz S(G). Apresentado na XXII Escuela Latinoamericana de Verano en Investigacion de Operaciones, ELAVIO, Chile, 2018.

Referências Bibliográficas

E. Estrada, Atom—bond connectivity and the energetic of branched alkanes, *Chem. Phys. Lett.* **463** (2008) 422—425.

E. Estrada, L. Torres, L. Rodriguez, I. Gutman, An atom-bond connectivity index: Modelling the enthalpy of formation of alkanes, *Indian J. Chem.* **37** (1998) 849—855.

B. Furtula, Atom–Bond Connectivity Index Versus Graovac—Ghorbani Analog, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **75** (2016) 233-242.

Referências Bibliográficas

K. Das, On the Graovac–Ghorbani index of graphs, *App. Math. Comp.* **275** (2016) 353–360.

K. Das, M. Mohammed, I. Gutman, K. Atan, Comparison between Atom—Bond Connectivity Indices of Graphs, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **76** (2016) 159–170.

D. Dimitrov, B. Ikica, R. Skrekovski. Remarks on the Graovac–Ghorbani index of bipartite graphs, *Appl. Math. Comp.* **293** (2017) 370-–376.

Referências Bibliográficas

A. Graovac, M. Ghorbani, A new version of atom-bond connectivity index, *Acta Chim. Slov* **57** (2010) 609-612.

M. Rostami, M. Sohrab-Haghifhat, M. Ghorbani, On Second Atom-Bond Connectivity Index, *Iranian J. Math. Chem.* **4** (2013) 265–270.

M. Rostami, M. Sohrabi-Haghighat, Further Results on New Version of Atom – Bond Connectivity Index, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **71** (2014) 21–32.