



UNIVERSIDAD  
DE LOS ANDES  
MERIDA VENEZUELA

Universidad de los Andes

Facultad de Ciencias

Departamento de Matemática

Grupo de Álgebra

Mérida - Venezuela

---

## ESPECTRO DE UN GRAFO

---

Requisito Especial de Grado Para Optar al Título de  
Licenciado en Matemáticas

**Br. Francy Carina Niño.**

**Tutor: Prof. Leonel Mendoza.**

Julio, 2008

# ÍNDICE GENERAL

<b>Agradecimientos</b>	<b>3</b>
<b>Introducción</b>	<b>4</b>
<b>1. Espectro de un Grafo</b>	<b>6</b>
1.1. Grafos y Matriz de Adyacencia . . . . .	6
1.2. Polinomio Característico y Espectro de un Grafo . . . . .	13
1.3. Caminos Cerrados en un Grafo . . . . .	22
<b>2. Teorema de Harary y Sachs</b>	<b>32</b>
<b>3. Aplicaciones a la Química</b>	<b>45</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>61</b>

## AGRADECIMIENTOS

Expreso mi más sincero agradecimiento al profesor Leonel Mendoza por su orientación paciencia y dedicación durante el desarrollo de este trabajo, igualmente agradezco a la profesora María Gonzales y al profesor José Chacón por sus oportunas correcciones.

# INTRODUCCIÓN

Leonhard Euler fue un gran matemático suizo en el siglo *XVIII* que introdujo las ideas básicas que sirvieron para crear la teoría de grafos, posteriormente lo siguieron una gran variedad de científicos que crearon y estudiaron diversas ramas relacionadas al tema, hoy en día es una disciplina muy amplia, con múltiples aplicaciones.

En ésta monografía partiremos de grafos simples y definiremos su matriz de adyacencia, su polinomio característico y su espectro, que nos servirá para obtener interesantes resultados.

Para desarrollar el contenido de este trabajo estudiaremos la sección 2 del capítulo 1 del Biggs [1] donde encontramos la relación que existe entre  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^l$ , (con  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , autovalores de la matriz de adyacencia del grafo) y la estructura del grafo, resolveremos algunos ejercicios propuestos en esta sección, y en particular nos concentraremos en hallar fórmulas para  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^l$  cuando  $l = 4, 5$ . También estudiaremos la sección 7 del capítulo 1 del Biggs [1] que nos dará las ideas para desarrollar el ***Teorema de Harary*** que relaciona el determinante de la matriz de adyacencia de un grafo con la estructura del grafo, luego probaremos la relación que hay entre los coeficientes del polinomio característico del grafo y estos determinantes mediante el ***Teorema de Sachs***. Finalmente estudiaremos

algunas aplicaciones a la química del capítulo 8 del Cvetkovic [2], consideraremos grafos relacionados a ciertos compuestos químicos llamados *grafos moleculares* y estudiaremos la presencia del cero en el espectro del grafo molecular que indicará si la molécula es inestable químicamente..

Este trabajo intenta ser un material de apoyo para aquellas personas interesadas en la teoría espectral de grafos, presentaremos ejemplos a lo largo del contenido para lograr que el tema sea comprendido de una manera autodidáctica; lo único indispensable sería tener conocimientos de Álgebra Lineal.

# CAPÍTULO 1

---

## ESPECTRO DE UN GRAFO

### 1.1. Grafos y Matriz de Adyacencia

En esta parte recordaremos algunos conceptos de la teoría de grafos que utilizaremos a lo largo de este trabajo. Las definiciones y los resultados de esta sección son tomados de [1] y [4].

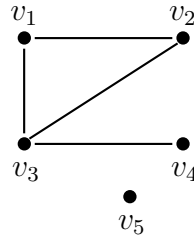
**Definición 1.1** *Un grafo  $G$  consta de un conjunto no vacío  $V$  de elementos llamados vértices, y un conjunto  $E$  de pares no ordenados de elementos de  $V$  llamados aristas, lo denotaremos por  $G(V, E)$ .*

Si  $V = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$  decimos que el grafo es *finito*; una arista de  $G$  la denotaremos como  $\{v_i, v_j\}$  y diremos que  $v_i$  y  $v_j$  son vértices *adyacentes* si existe una arista entre ellos. También diremos que la arista  $\{v_i, v_j\}$  *incide* en los vértices  $v_i$  y  $v_j$ . La arista  $\{v_i, v_i\}$  se llama *lazo*.

Un grafo se dice *simple* si  $E$  es el conjunto de pares no ordenados de elementos distintos de  $V$ . A lo largo de este trabajo consideramos grafos simples finitos.

Una forma de representar los grafos en el plano es la siguiente: los vértices se representan por puntos y las aristas como líneas entre ellos.

**Ejemplo 1.1** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple que consta de  $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$ , y  $E = \{\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_1\}, \{v_3, v_4\}\}$ , entonces una de sus representaciones en el plano es:



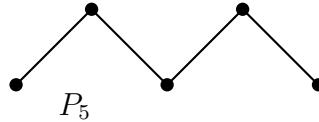
**Definición 1.2** El grado de un vértice  $v$  de un grafo  $G(V, E)$  es el número de aristas que inciden en él, y lo denotamos por  $\delta(v)$ .

En el ejemplo 1.1 tenemos:  $\delta(v_1) = \delta(v_2) = 2$ ,  $\delta(v_3) = 3$ ,  $\delta(v_4) = 1$ ,  $\delta(v_5) = 0$ , en el caso de  $v_5$  decimos que es un *vértice aislado*.

Veamos algunas familias de grafos:

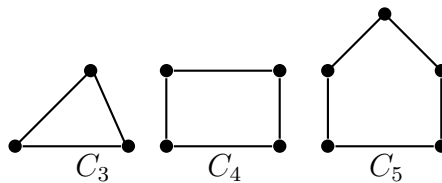
**Trayectorias:** Una trayectoria  $P_n$  consta de  $n$  vértices,  $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$ , y aristas  $\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_4\}, \dots, \{v_{n-1}, v_n\}$ .

El siguiente grafo es un ejemplo de trayectoria.



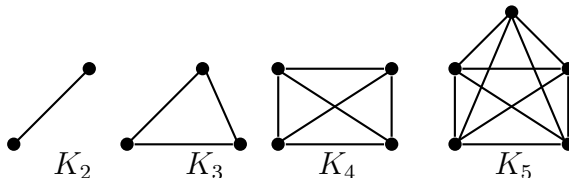
**Ciclos:** El ciclo  $C_n$ , ó  $n$ -ciclo, con  $n \geq 3$ , consta de  $n$  vértices,  $v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$ , y aristas  $\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_4\}, \dots, \{v_{n-1}, v_n\}, \{v_n, v_1\}$ .

Los siguientes grafos son ejemplos de ciclos.



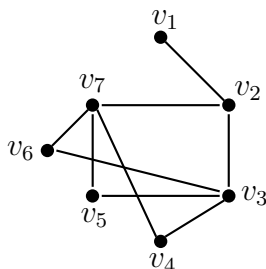
**Grafos Completos:** El grafo completo de  $n$ -vértices que se denota por  $K_n$ , es el grafo simple que contiene exactamente una arista entre cada par de vértices, es decir hay  $\binom{n}{2}$  aristas en  $K_n$ .

Los siguientes grafos son ejemplos de grafos completos.



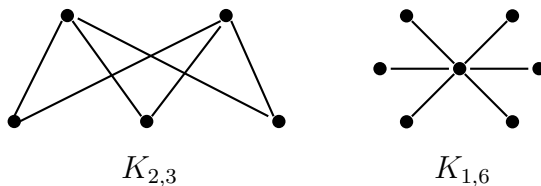
**Grafos Bipartitos:** Se dice que un grafo simple es bipartito si su conjunto de vértices  $V$  se puede dividir en dos subconjuntos disjuntos  $V_1$  y  $V_2$ , tales que cada arista del grafo conecta un vértice de  $V_1$  con uno de  $V_2$ .

El siguiente grafo es un ejemplo de grafo bipartito, donde su conjunto de vértices se puede biparticionar en:  $V_1 = \{v_1, v_3, v_7\}$  y  $V_2 = \{v_2, v_4, v_5, v_6\}$ .



**Grafos Bipartitos Completos:** El grafo bipartito completo  $K_{m,n}$  es el grafo cuyo conjunto de vértices está formado por dos conjuntos con  $m$  y  $n$  vértices respectivamente, y hay una arista entre dos vértices si y sólo si, un vértice está en el primer subconjunto y el otro vértice está en el segundo subconjunto.

Los siguientes grafos son bipartitos completos.



El grafo bipartito completo  $K_{1,n}$  se llama *estrella*.



**Definición 1.3** *Un grafo  $G$  es regular de grado  $k$  si todos sus vértices tienen el mismo grado  $k$ .*

Como ejemplos de grafos regulares están los ciclos  $C_n$  que son regulares de grado 2, y los grafos completos  $K_n$  que son regulares de grado  $n - 1$ .

**Definición 1.4** *Un subgrafo  $H$  de un grafo  $G(V, E)$ , es un grafo  $H(W, F)$ , tal que  $W \subseteq V$  y  $F \subseteq E$ .*

Si  $W = V$  decimos que  $H$  es un *subgrafo generador* de  $G$ .

Si cada arista de  $G$  está en  $H$  para cada par de vértices de  $H$ , entonces decimos que  $H$  es un *subgrafo inducido* de  $G$ .

**Definición 1.5** *Un camino desde un vértice  $v_i$  hasta un vértice  $v_j$ , o un  $v_i - v_j$  camino de longitud  $l$  ( $l \in \mathbb{N}$ ) de un grafo  $G$ , es una secuencia de  $l + 1$  vértices, comenzando en  $v_i$  y terminando en  $v_j$ , tal que vértices consecutivos son adyacentes.*

Un camino donde no se repite vértices es una *trayectoria*.

Si  $v_i = v_j$ , decimos que es un *camino cerrado* de longitud  $l$ . Un camino cerrado donde no se repite vértices es un *ciclo*.

**Definición 1.6** *Un grafo  $G(V, E)$  es conexo, si para cada  $v_i, v_j \in V$  existe un  $v_i - v_j$  camino.*

Si  $G(V, E)$  es un grafo simple, a los subgrafos inducidos con el mayor número de vértices de  $G$  que son conexos, se les llaman *componentes conexas*.

**Definición 1.7** *Un árbol es un grafo conexo que no contiene ciclos.*

Como ejemplos de árboles están las trayectorias y las estrellas.

Un *bosque* es un grafo donde las componentes conexas son árboles.

**Teorema 1.1** *Un grafo es bipartito si y sólo si, todos sus ciclos son de longitud par.*

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito, y sean  $V_1$  y  $V_2$  la bipartición de los vértices de  $G$ , sea  $u = u_1, u_2, u_3, \dots, u_l = u$ , un ciclo de longitud  $l$ , supongamos que el vértice  $u_1$  pertenece al conjunto  $V_1$ , por ser el grafo bipartito los vértices de la forma  $u_{2i}$  pertenecerán a  $V_2$ , y los de la forma  $u_{2i+1}$  pertenecerán a  $V_1$ , para  $i = 0, \dots, \frac{l-1}{2}$ , así el vértice final de un camino de longitud impar pertenecerá a  $V_2$  y el vértice final de un camino de longitud par pertenecerá a  $V_1$ , como  $u_l$  está en  $V_1$  el ciclo debe ser de longitud par.

Recíprocamente supongamos ahora que cada ciclo de  $G(V, E)$  es de longitud par, podemos suponer que el grafo es conexo, porque si no lo es, podemos trabajar por separado cada una de las componentes. Elijamos un vértice  $u_1$  en  $V$ , luego todos los vértices adyacentes a  $u_1$  los llamaremos  $u_2$ , luego los vértices adyacentes a los  $u_{2's}$  los etiquetamos con  $u_1$ , y así sucesivamente, notemos que no existen  $u_i$  adyacente a  $u_i$  para  $i = 1, 2$ , ya que los ciclos que existen en  $G(V, E)$  son de longitud par.

Luego tomamos los  $u_{1's}$  y los colocamos en un conjunto  $V_1$ , y los vértices  $u_{2's}$  y los colocamos en un conjunto  $V_2$ , y esta será la bipartición del grafo  $G(V, E)$ .

■

En particular tenemos que los árboles y los ciclos de longitud par,  $C_{2k}$ , son grafos bipartitos.

**Definición 1.8** *Dos grafos  $G_1(V_1, E_1)$  y  $G_2(V_2, E_2)$  son isomorfos si hay una función biyectiva  $f : V_1 \rightarrow V_2$ , tal que  $u$  y  $v$  son adyacentes en  $G_1$  si, y sólo si,  $f(u)$  y  $f(v)$  son adyacentes en  $G_2$ .*

**Definición 1.9** *Un invariante de un grafo  $G$  es un parámetro (número) asociado a  $G$  que toma el mismo valor en todos los grafos isomorfos a  $G$ .*

Algunos invariantes de un grafo  $G$  son: El número de vértices, el número de aristas, el números de  $n$ -ciclos.

**Definición 1.10** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple y finito, con  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . La matriz de adyacencia de  $G$ , denotada por  $A_G$ , es la matriz  $n \times n$ , donde los coeficientes  $a_{ij}$  están dados por:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \{v_i, v_j\} \in E \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

**Ejemplo 1.2** La matriz de adyacencia de un  $K_4$  es:

$$A_{K_4} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

**Ejemplo 1.3** En un grafo bipartito  $G$ , podemos etiquetar los vértices de manera que su matriz de adyacencia tenga la forma:

$$A_G = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix},$$

donde a  $B$  se le llama la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $V$ , y  $B^t$  es el transpuesta de  $B$ .

Como las filas y columnas de  $A_G$  corresponden a un etiquetamiento arbitrario de los vértices de  $G$ , nos interesa estudiar las propiedades de la matriz de adyacencia, que son invariantes bajo permutación de las filas y de las columnas.

De la definición de  $A_G$  se sigue que  $A_G$  es una matriz real y simétrica, por lo tanto los autovalores de  $A_G$  son números reales; también se sabe que  $A_G$  es diagonalizable, así para cualquier autovalor  $\lambda$  de  $A_G$  se tiene que  $m_a(\lambda) = m_g(\lambda)$ . Donde:

$m_a(\lambda)$  es la multiplicidad de  $\lambda$  como raíz del polinomio  $\det(\lambda I - A_G) = 0$ ,

$m_g(\lambda)$  es la dimensión del autoespacio correspondiente a  $\lambda$ , es decir,

$$m_g(\lambda) = \dim[\ker(\lambda I - A)],$$

donde  $\ker(\lambda I - A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (\lambda I - A)x = 0\}$ .

Como los grafos que estamos considerando son simples tenemos que la  $Tr(A_G)$  es cero, donde  $Tr(A_G)$  es la traza de la matriz  $A_G$ .

El siguiente resultado relaciona la matriz de adyacencia de un grafo  $G$  con los caminos que hay entre dos vértices de  $G$ :

**Teorema 1.2** *El número de caminos de longitud  $l$  en  $G$ , desde  $v_i$  a  $v_j$  es el coeficiente en la posición  $(i, j)$  de la matriz  $A_G^l$ .*

**Demostración:** (Por inducción.) El número de caminos de longitud 1 de  $v_i$  a  $v_j$  es el coeficiente en la posición  $(i, j)$  de la matriz  $A_G$ . Ahora supongamos que el coeficiente en la posición  $(i, j)$  de la matriz  $A_G^l$  es el número de caminos de longitud  $l$  de  $v_i$  a  $v_j$ , esta es la hipótesis de inducción.

Como  $A_G^{l+1} = A_G^l A_G$ , el coeficiente en la posición  $(i, j)$  de  $A_G^{l+1}$  es igual a:

$$b_{i1}a_{1j} + b_{i2}a_{2j} + \cdots + b_{in}a_{nj},$$

donde  $b_{ik}$  es el coeficiente en la posición  $(i, k)$  de  $A_G^l$ . Por la hipótesis de inducción  $b_{ik}$  es el número de caminos de longitud  $l$  de  $v_i$  a  $v_k$ , para  $k = 1 \cdots n$ .

Un camino de longitud  $l + 1$  de  $v_i$  a  $v_j$  está formado por un camino de longitud  $l$  de  $v_i$  a un vértice intermedio  $v_k$  y por una arista de  $v_k$  a  $v_j$ . Por la regla del producto, el número de caminos de ese tipo es el producto del número de caminos de longitud  $l$  de  $v_i$  a  $v_k$ , que es  $b_{ik}$ , por el número de aristas de  $v_k$  a  $v_j$ , que es  $a_{kj}$ . Al sumar todos esos productos para todos los posibles vértices intermedios  $v_k$  se obtiene el resultado buscado. ■

Luego tenemos que la traza de  $A_G^l$  es el total de caminos cerrados de longitud  $l$  que hay en  $G$ .

## 1.2. Polinomio Característico y Espectro de un Grafo

**Definición 1.11** *El polinomio característico de un grafo  $G$ , es el polinomio característico de la matriz de adyacencia,  $A_G$ , es decir,  $P_G(\lambda) = \det(A_G - \lambda I)$ .*

Así el polinomio característico de un grafo  $G$ , con  $n$  vértices, tiene la forma:

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + c_2\lambda^{n-2} + c_3\lambda^{n-3} + \dots + c_{n-1}\lambda + c_n.$$

Veamos que los coeficientes, de acuerdo con la teoría de matrices, pueden ser expresados en términos de menores principales de  $A_G$ , esta teoría es tomada de [5].

**Teorema 1.3** *Sea  $P_G(\lambda) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + c_2\lambda^{n-2} + c_3\lambda^{n-3} + \dots + c_{n-1}\lambda + c_n$  el polinomio característico de  $G$ , entonces*

$$c_k = (-1)^k \sum (\text{todos los menores principales de orden } k).$$

Para hacer la demostración de este teorema, recordemos lo siguiente:

*Una matriz principal de orden  $r$  de una matriz  $A_{n \times n}$ , es una submatriz de  $A$  que se obtiene al eliminar el mismo conjunto de  $n - r$  filas y columnas de  $A$ .*

*Un menor principal de orden  $r$  de  $A$ , es el determinante de una submatriz principal de orden  $r$  de  $A$ .*

Existen  $\binom{n}{r}$  menores principales de orden  $r$  para  $r = 1, 2, \dots, n$ .

### Ejemplo 1.4

$$\text{Si } A = \begin{pmatrix} -3 & 1 & -3 \\ 20 & 3 & 10 \\ 2 & -2 & 4 \end{pmatrix}, \text{ entonces :}$$

*Existen 3 menores principales de orden 1, que son:*

- 3, que se obtiene eliminando las columnas y las filas 2 y 3,  
 3, que se obtiene eliminando las columnas y las filas 1 y 3,  
 4, que se obtiene eliminando las columnas y las filas 1 y 2.

Existen 3 menores principales de orden 2, que son.:

$$\begin{vmatrix} -3 & 1 \\ 20 & 3 \end{vmatrix} = -29, \quad \begin{vmatrix} 3 & 10 \\ -2 & 4 \end{vmatrix} = 32, \quad \begin{vmatrix} -3 & -3 \\ 2 & 4 \end{vmatrix} = -6$$

Y el único menor principal de orden 3 es  $\det(A) = -18$ .

**Notemos que:**

1. La diagonal de las submatrices principales de una matriz  $A$  es parte de la diagonal de la matriz  $A$ .
2. Las submatrices principales de orden  $r$  de una matriz de adyacencia de un grafo  $G$ ,  $A_G$ , son las matrices de adyacencia de los subgrafos inducidos que se obtiene al quitarle  $n - r$  vértices al grafo  $G$ .

**Definición 1.12** Sea  $A$  una matriz cuyos coeficientes de una matriz  $A = [a_{ij}(x)]$  son funciones diferenciables de  $x$ , definimos la derivada de la matriz  $A$  como:

$$\frac{dA}{dx} = \left[ \frac{da_{ij}(x)}{dx} \right].$$

**Proposición 1.1** Sea  $A$  una matriz cuadrada  $n \times n$ , y sean los coeficientes de  $A = [a_{ij}(x)]$  funciones diferenciables de  $x$ , entonces

$$\frac{d(\det(A))}{dx} = \det(D_1) + \det(D_2) + \cdots + \det(D_n),$$

donde  $D_i$  es la matriz idéntica a  $A$  salvo que los coeficientes de la fila  $i$  son reemplazadas por sus derivadas, es decir,

$$[D_i]_k = \begin{cases} A_k & \text{si } i \neq k \\ \frac{d(A_k)}{dx} & \text{si } i = k \end{cases},$$

donde  $A_k$  denota la fila  $k$  de  $A$ .

**Demostración:** Sea  $A$  una matriz cuadrada  $n \times n$ . De la definición de determinante de una matriz tenemos:

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)},$$

donde  $S_n$  es el grupo de permutaciones de  $\{1, 2, \dots, n\}$ .

Luego

$$\begin{aligned} \frac{d(\det(A))}{dx} &= \frac{d}{dx} \left( \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} \right) \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \frac{d(a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)})}{dx} \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \left( (a'_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}) + (a_{1\sigma(1)} a'_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}) \right. \\ &\quad \left. + \cdots + (a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a'_{n\sigma(n)}) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) (a'_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}) + \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) (a_{1\sigma(1)} a'_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}) \\ &\quad + \cdots + \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) (a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a'_{n\sigma(n)}) \\ &= \det(D_1) + \det(D_2) + \cdots + \det(D_n). \end{aligned}$$

■

A continuación se presenta la prueba del Teorema 1.3.

**Demostración:** (Del Teorema 1.3) Sabemos que el polinomio característico de  $G$  es:

$$P_G(\lambda) = \det(A_G - \lambda I) = \det((-1)(\lambda I - A_G)) = (-1)^n \det(\lambda I - A_G)$$

$$P_G(\lambda) = (-1)^n (\lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + c_2 \lambda^{n-2} + c_3 \lambda^{n-3} + \dots + c_{n-1} \lambda + c_n).$$

Tomando la  $r$ -ésima derivada de  $P_G(\lambda)$  y evaluando en  $\lambda = 0$  tenemos  $P_G^{(r)}(0) = r! c_{n-r}$ , y así

$$c_{n-r} = \frac{(-1)^n}{r!} P_G^{(r)}(0).$$

Por otro lado aplicando la proposición anterior  $r$  veces a  $P_G(\lambda) = \det(A_G - \lambda I)$  obtenemos:

$$P_G^{(r)}(\lambda) = \sum_{i_j \neq i_k} D_{i_1 \dots i_r}(\lambda),$$

donde  $D_{i_1 \dots i_r}(\lambda)$  es el determinante de la matriz idéntica a  $A_G - \lambda I$  excepto que las filas  $i_1, i_2, \dots, i_r$  son reemplazadas por  $-e_{i_1}^T, -e_{i_2}^T, \dots, -e_{i_r}^T$ , respectivamente, donde  $e_{i_j}^T$  es el vector canónico con 1 en la posición  $i_j$ .

Se sigue que

$$D_{i_1 \dots i_r}(0) = (-1)^n \det(A_{i_1 \dots i_r}),$$

donde  $A_{i_1 \dots i_r}$  es idéntica a la matriz  $A_G$  excepto que las filas  $i_1, i_2, \dots, i_r$  son reemplazadas por  $e_{i_1}^T, e_{i_2}^T, \dots, e_{i_r}^T$ , respectivamente, y  $\det(A_{i_1 \dots i_r})$  es el menor principal de orden  $n - r$  obtenido por eliminar las filas y columnas  $i_1, i_2, \dots, i_r$  de  $A_G$ . En consecuencia

$$P_G^{(r)}(0) = \sum_{i_j \neq i_k} D_{i_1 \dots i_r}(0) = (-1)^r \sum_{i_j \neq i_k} \det(A_{i_1 \dots i_r})$$

$$P_G^{(r)}(0) = r!(-1)^r \sum (\text{Todos los menores principales de orden } n - r).$$

El factor  $r!$  aparece porque cada una de las  $r!$  permutaciones de los subcritos en  $A_{i_1 \dots i_r}$ , describe la misma matriz.

Así obtenemos

$$c_{n-r} = \frac{(-1)^n}{r!} P_G^{(r)}(0)$$

$$c_{n-r} = (-1)^{n-r} \sum (\text{Todos los menores principales de orden } n - r).$$

■

El siguiente resultado asocia los primeros tres coeficientes del polinomio característico del grafo  $G$ , con su estructura, este resultado es tomado de [1].

**Proposición 1.2** *Sea  $G(V, E)$  un grafo simple y finito, con polinomio característico*

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + c_2 \lambda^{n-2} + c_3 \lambda^{n-3} + \dots + c_{n-1} \lambda + c_n,$$



Los coeficientes  $c_1, c_2, c_3$  del polinomio característico del grafo  $G$  satisfacen:

1.  $c_1 = 0$ .
2.  $-c_2$  es el número de aristas de  $G$ .
3.  $-c_3$  es dos veces el número de 3-ciclos que hay en  $G$ .

**Demostración:** Para cada  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$  el número  $(-1)^i c_i$  es la suma de los menores principales de orden  $i$ , luego:

1. La suma de los menores principales de orden 1 es la suma de los elementos de la diagonal de  $A_G$ , que ya sabemos que es cero, por lo tanto  $c_1 = 0$ .
2. Los menores principales de orden 2 son de la forma:

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad y \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1$$

Esto nos indica que hay un menor principal de orden 2 para cada par de vértices adyacentes en  $G$ , el cual tiene valor  $-1$ , así  $(-1)^2 c_2 = -|E|$ .

3. Los menores principales de orden 3 son:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2$$

Luego, este último menor principal representa un 3-ciclo en el grafo  $G$ , de aquí se tiene que  $-c_3$  es dos veces el número de 3-ciclos en  $G$ .

■

Los siguientes resultados son un complemento de este trabajo, estos resultados son ejercicios propuestos de [1],

**Proposición 1.3** *Si  $G$  es un grafo con un vértice  $v_1$  de grado 1, y sea  $v_2$  el vértice adyacente a  $v_1$ . Sea  $G_1$  el subgrafo inducido de  $G$  obtenido al eliminar  $v_1$ , y  $G_{12}$  el subgrafo inducido de  $G$  obtenido al eliminar los vértices  $v_1$  y  $v_2$ , entonces*

$$P_G(\lambda) = \lambda P_{G_1}(\lambda) - P_{G_{12}}(\lambda).$$

**Demostración:**

$$\begin{aligned} P_G(\lambda) = \det(\lambda I_n - A_G) &= \begin{vmatrix} \lambda & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & \lambda & & & b \\ 0 & & & & \\ \vdots & b^t & & \lambda I_{n-2} - A_{G_{12}} & \\ 0 & & & & \end{vmatrix} = \lambda P_{G_1}(\lambda) + \begin{vmatrix} -1 & & & & b \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & \lambda I_{n-2} - A_{G_{12}} & \\ 0 & & & & \end{vmatrix} \\ &= \lambda P_{G_1}(\lambda) - P_{G_{12}}(\lambda). \end{aligned}$$

■

Esta proposición es útil para hallar el polinomio característico de un árbol, ya que siempre va a tener vértices de grado 1.

**Proposición 1.4** *La derivada del polinomio característico es igual a :*

$$P'_G(\lambda) = \sum_{i=1}^n P_{G_i}(\lambda),$$

donde los  $G_i$  son los subgrafos inducidos de  $G$ , que resultan de eliminar el vértice  $v_i$ .

**Demostración:** Sabemos que:

$$P_G(\lambda) = \det(I\lambda - A_G) = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sgn}(\sigma) b_{1\sigma(1)} \cdots b_{n\sigma(n)}.$$

Como  $b_{ii} = \lambda$  para  $i = 1, \dots, n$ , tenemos que

$$P_G(\lambda) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \lambda^{f(\sigma)} \prod_{\sigma(i) \neq i} b_{i\sigma(i)},$$

donde  $f(\sigma)$  es el número de puntos fijos de  $\sigma$ , o sea la cardinalidad del conjunto  $\{i \mid \sigma(i) = i\}$ .

Así,

$$P'_G(\lambda) = \sum_{\sigma \in S_n, f(\sigma) \geq 1} \operatorname{sgn}(\sigma) f(\sigma) \lambda^{f(\sigma)-1} \prod_{\sigma(i) \neq i} b_{i\sigma(i)}.$$

Si  $\sigma \in S_n$  y  $\sigma(i) = i$ , podemos definir  $\sigma_i$  como una permutación de los vértices de  $G_i$ , simplemente restringiendo la acción de  $\sigma$ . Luego

$$\begin{aligned} P'_G(\lambda) &= \sum_{\substack{i=1..n, \\ \sigma \in S_n}} \sum_{\sigma(i)=i} \operatorname{sgn}(\sigma_i) \prod_{j \neq i} b_{j\sigma_i(j)} \\ P'_G(\lambda) &= \sum_{i=1}^n \left( \sum_{\substack{\sigma \in S_n, \\ \sigma(i)=i}} \operatorname{sgn}(\sigma_i) \prod_{j \neq i} b_{j\sigma_i(j)} \right) \\ P'_G(\lambda) &= \sum_{i=1}^n \det(A_{G_i} - \lambda I_{n-1}) = \sum_{i=1}^n P_{G_i}(\lambda). \end{aligned}$$

■

**Definición 1.13** *El espectro de un grafo  $G$  es el conjunto de los autovalores de  $A_G$  junto con su multiplicidad.*

Si los autovalores distintos de  $A_G$  son  $\lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_{s-1}$  y sus multiplicidades son  $m_{\lambda_0}, m_{\lambda_1}, m_{\lambda_2}, \dots, m_{\lambda_{s-1}}$  entonces

$$\operatorname{spec}(G) = \begin{pmatrix} \lambda_0 & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_{s-1} \\ m_{\lambda_0} & m_{\lambda_1} & m_{\lambda_2} & \dots & m_{\lambda_{s-1}} \end{pmatrix}$$

**Ejemplo 1.5** *El espectro de  $K_4$  es:*

$$\operatorname{spec}(K_4) = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

**Teorema 1.4** Sea  $G$  un grafo bipartito. Si  $\lambda \in \text{spec}(G)$  entonces  $-\lambda \in \text{spec}(G)$ .

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito con  $n$  vértices, y sea  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de bipartición de  $V$ , supongamos que  $|V_1| = m$  entonces  $|V_2| = n - m$ , así la matriz de adyacencia de  $G$ ,  $A_G = [a_{ij}]$ , es:

$$A_G = \begin{pmatrix} 0_{m \times m} & B_{m \times (n-m)} \\ B_{(n-m) \times m}^t & 0_{(n-m) \times (n-m)} \end{pmatrix},$$

donde:

$$B = \begin{pmatrix} a_{1(m+1)} & a_{1(m+2)} & \cdots & a_{1n} \\ a_{2(m+1)} & a_{2(m+2)} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m(m+1)} & a_{m(m+2)} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \quad B^t = \begin{pmatrix} a_{(m+1)1} & a_{(m+1)2} & \cdots & a_{(m+1)m} \\ a_{(m+2)1} & a_{(m+2)2} & \cdots & a_{(m+2)m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

Sea  $\lambda$  un autovalor de  $A_G$ , es decir existe  $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$  tal que  $A_G x = \lambda x$ , es decir,

$$\begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \\ x_{m+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda x_1 \\ \lambda x_2 \\ \vdots \\ \lambda x_m \\ \lambda x_{m+1} \\ \vdots \\ \lambda x_n \end{pmatrix}.$$

Así,

$$\lambda x_i = \begin{cases} a_{i(m+1)}x_{m+1} + a_{i(m+2)}x_{m+2} + \cdots + a_{in}x_n & \text{si } 1 \leq i \leq m \\ a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{im}x_m & \text{si } m+1 \leq i \leq n \end{cases}$$

Definamos el vector:

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \vdots \\ \tilde{x}_m \\ \tilde{x}_{m+1} \\ \vdots \\ \tilde{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \\ -x_{m+1} \\ \vdots \\ -x_n \end{pmatrix}$$

Observemos que:

$$\begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \vdots \\ \tilde{x}_m \\ \tilde{x}_{m+1} \\ \vdots \\ \tilde{x}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \\ y_{m+1} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},$$

entonces,

$$y_i = \begin{cases} a_{i(m+1)}\tilde{x}_{m+1} + a_{i(m+2)}\tilde{x}_{m+2} + \cdots + a_{in}\tilde{x}_n & \text{si } 1 \leq i \leq m \\ a_{i1}\tilde{x}_1 + a_{i2}\tilde{x}_2 + \cdots + a_{im}\tilde{x}_m & \text{si } m+1 \leq i \leq n \end{cases},$$

esto es,

$$y_i = \begin{cases} -a_{i(m+1)}x_{m+1} - a_{i(m+2)}x_{m+2} - \cdots - a_{in}x_n & \text{si } 1 \leq i \leq m \\ a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{im}x_m & \text{si } m+1 \leq i \leq n \end{cases},$$

luego,

$$y_i = \begin{cases} -\lambda x_i & \text{si } 1 \leq i \leq m \\ -\lambda(-x_i) & \text{si } m+1 \leq i \leq n \end{cases}.$$

Así,  $A_G \tilde{x} = -\lambda \tilde{x}$ , por lo tanto  $-\lambda$  también es autovalor de  $A_G$ .

■

### 1.3. Caminos Cerrados en un Grafo

En esta sección vamos a estudiar una invariante de un grafo  $G$ , como lo es el número de caminos cerrados de longitud  $l$  en  $G$ , que sabemos por el Teorema 1.2 que es igual a la traza de la  $l$ -ésima potencia de la matriz de adyacencia de  $G$ .

Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$ . Como la matriz de adyacencia de  $G$  es semejante a una matriz diagonal  $D$ , cuyos coeficientes son los autovalores  $\lambda_i$  de  $A_G$ , existe una matriz invertible  $P$  tal que:

$$A_G = PDP^{-1}$$

En general se tiene que:

$$A_G^l = PD^lP^{-1}, \quad \text{para } l \geq 2,$$

donde los coeficientes de la matriz  $D^l$  son  $\lambda_i^l$ . Por la tanto,

$$\text{Tr}(A_G^l) = \text{Tr}(D^l) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^l.$$

Así,  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^l$  es el total de caminos cerrados de longitud  $l$  que hay en  $G$ , esto muestra una relación entre el espectro de un grafo y la estructura del mismo.

Como  $\text{Tr}(A_G) = 0$ , se tiene que  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$ .

Como aplicación de este resultado a grafos bipartitos, tenemos que  $\sum \lambda_i^{2l+1} = 0$ , ya que no hay ciclos de longitud impar.

A continuación, hallaremos fórmulas para:

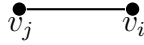
$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2, \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^3, \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^4, \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^5,$$

en función de subgrafos de  $G$  que tienen caminos cerrados de las respectivas potencias. Las primeras dos fórmulas pueden ser encontradas en [1] y las siguientes dos fueron desarrolladas para este trabajo.

**Proposición 1.5** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$ , se tiene que el número de caminos cerrados de longitud 2 es:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2m,$$

donde  $m$  es la cardinalidad del conjunto de aristas de  $G$ , es decir,  $m = |E|$ .



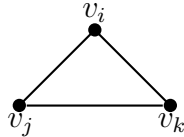
**Demostración:** El subgrafo donde conseguimos caminos cerrados de longitud 2 es la arista. Como cada arista del grafo  $G$  tiene dos vértices, entonces contribuye con dos caminos cerrados de longitud 2: el  $v_j - v_i - v_j$  y el  $v_i - v_j - v_i$ , por lo tanto se sigue que hay dos caminos cerrados por cada arista, es decir, en el grafo hay  $2m$  caminos cerrados de longitud 2. ■

**Proposición 1.6** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$ , se tiene que el número de caminos cerrados de longitud 3 es :

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = 6N_{C_3},$$

donde  $N_{C_3}$  es el número de 3-ciclos en  $G$ .

**Demostración:** El subgrafo que genera caminos cerrados de longitud 3 es el 3-ciclo.



Para cada  $v_i$  se tienen dos caminos cerrados de longitud 3: el  $v_i - v_j - v_k - v_i$  y el  $v_i - v_k - v_j - v_i$ . Así hay seis caminos cerrados de longitud 3 por cada 3-ciclo. Por lo tanto,

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^3 = 6N_{C_3}.$$

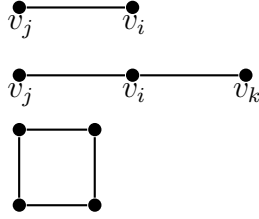
■

**Proposición 1.7** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$ , se tiene que el número de caminos cerrados de longitud 4 es:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^4 = 2m + 8N_{C_4} + 4N_{P_3},$$

donde:  $m$  es el número de aristas de  $G$ ,  $N_{C_4}$  es el número de 4-ciclos en  $G$  y  $N_{P_3}$  es el número de trayectorias con tres vértices en  $G$ .

**Demostración:** Los subgrafos que tienen caminos cerrados de longitud 4 son:



Para la arista tenemos un camino cerrado de longitud 4 por cada vértice, es decir, dos caminos cerrados de longitud 4 por cada arista, de aquí el  $2m$ .

Para la trayectoria  $P_3$ , debemos contar los caminos cerrados que involucren todas las aristas, porque los que involucren una sola arista ya los contamos en el primer caso, así para los vértices de los extremos contamos un camino cerrado de longitud 4 y para el vértice del centro contamos dos caminos cerrados de longitud 4, por lo tanto en  $P_3$  encontramos cuatro caminos cerrados de longitud 4 que involucren todas las aristas. De aquí el número  $4N_{P_3}$ .

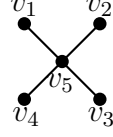
Para el 4-ciclo tenemos que para cada vértice existen dos caminos cerrados de longitud 4 que involucren todas las aristas, por lo tanto hay ocho caminos cerrados por cada  $C_4$ , de aquí el número  $8N_{C_4}$ . ■

A continuación desarrollaremos una fórmula que permite hallar el número de trayectorias  $P_3$  en cualquier grafo, ésta fórmula está en función de los grados de los vértices del grafo.

Analicemos el siguiente ejemplo:



**Ejemplo 1.6** Sea la estrella  $K_{1,4}$



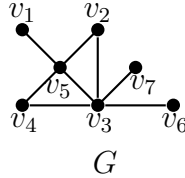
Observemos que el único vértice que puede ser central en una trayectoria  $P_3$  es  $v_5$ .

Para saber cuantas trayectorias de tres vértices hay en  $K_{1,4}$  procedemos a contar las que tiene a  $v_1$  como extremo, que son tres subgrafos; luego las que tienen a  $v_2$  como extremo pero que no tienen a  $v_1$ , que son dos subgrafos, luego los que tienen a  $v_3$  como extremo, pero no a  $v_1$  ni a  $v_2$ , que es sólo una. Por lo tanto hay seis trayectorias de tres vértices en el grafo dado.

De este ejemplo podemos concluir que si  $v_i$  es un vértice cualquiera de un grafo  $G$ , con  $\delta(v_i) = j$  para  $j \geq 2$ , denotado por  $v_{i_j}$ , entonces la cantidad de  $P_3$  que se pueden formar teniendo como vértice central a  $v_{i_j}$  es:

$$N_{P_3}(v_{i_j}) = (j-1) + (j-2) + \dots + (j-(j-1)) = \sum_{k=1}^{j-1} k = \frac{(j-1)j}{2}.$$

**Ejemplo 1.7** Hallar la cantidad de trayectorias  $P_3$  que existen en el siguiente grafo  $G$ .



Como  $\delta(v_2) = 2$  hay  $\frac{1 \cdot 2}{2} = 1$   $P_3$  que tiene como vértice central a  $v_2$ .

Como  $\delta(v_3) = 5$  hay  $\frac{4 \cdot 5}{2} = 10$   $P_3$  que tiene como vértice central a  $v_3$ .

Como  $\delta(v_4) = 2$  hay  $\frac{1 \cdot 2}{2} = 1$   $P_3$  que tiene como vértice central a  $v_4$ .

Como  $\delta(v_5) = 4$  hay  $\frac{3 \cdot 4}{2} = 6$   $P_3$  que tiene como vértice central a  $v_5$ .

Como  $v_1, v_6, v_7$  tienen grado uno no son vértices centrales de ninguna trayectoria  $P_3$ .

Así,  $N_{P_3} = 1 + 10 + 1 + 6 = 18$ .

Generalizamos los ejemplos anteriores en el siguiente resultado que es importante al momento de saber el  $N_{P_3}$  en un grafo cualquiera sin tener que contarlos.

**Proposición 1.8** *Sea  $G(V, E)$  un grafo simple y finito, se tiene que:*

$$N_{P_3} = \sum_{\substack{j \in \{\delta(v) | v \in V\}, \\ j \geq 2}} \frac{(j-1)j}{2} n_j,$$

donde  $n_j$  es el número de vértices de grado  $j$ ,

**Demostración:** Denotemos por:

$$\Delta(G) = \max\{\delta(v_i) \mid v_i \in V\},$$

$v_{i_j}$  los vértices que tienen grado  $j$ ,

$n_j$  el número de vértices de grado  $j$ ,

$N_{P_3}(v_i)$  el número de trayectorias  $P_3$  que tienen a  $v_i$  como vértice central.

Entonces el número de trayectorias de tres vértices en un grafo  $G$  es:

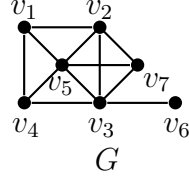
$$\begin{aligned} N_{P_3} &= n_2 N_{P_3}(v_{i_2}) + n_3 N_{P_3}(v_{i_3}) + \cdots + n_{\Delta(G)} N_{P_3}(v_{i_{\Delta(G)}}) \\ &= n_2 \sum_{k=1}^2 k + n_3 \sum_{k=1}^3 k + \cdots + n_{\Delta(G)} \sum_{k=1}^{\Delta(G)} k \\ &= n_2 \cdot 1 + n_3 \cdot 3 + \cdots + n_{\Delta(G)} \frac{(\Delta(G)-1) \cdot \Delta(G)}{2} \\ &= \sum_{\substack{j \in \{\delta(v) | v \in V\}, \\ j \geq 2}} \frac{(j-1)j}{2} n_j. \end{aligned}$$

■

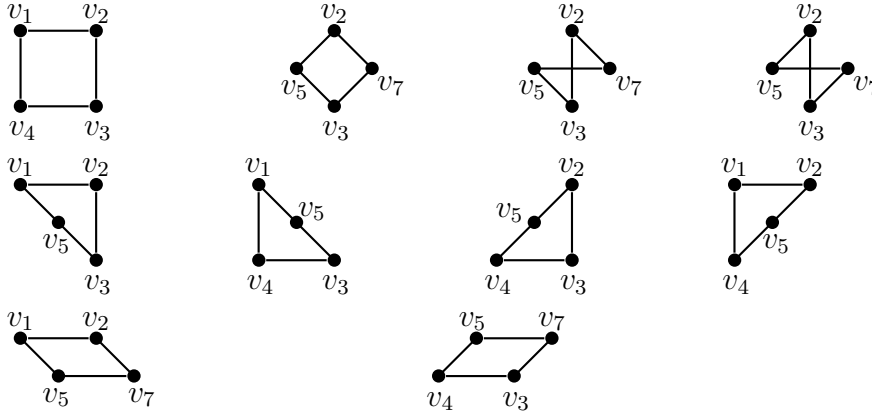
Así la fórmula de la Proposición 1.7 queda:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^4 = 2m + 8N_{C_4} + 4 \left( \sum_{\substack{j \in \{\delta(v) | v \in V\}, \\ j \geq 2}} \frac{(j-1)j}{2} n_j \right).$$

**Ejemplo 1.8** Hallar el número de caminos cerrados de longitud 4 del siguiente grafo:



Tenemos que  $m = 12$ , por lo tanto,  $2m = 24$ . Es importante tener cuidado al contar los  $C_4$  en  $G$ , tenemos los siguientes:



Por lo tanto,  $8N_{C_4} = 8 \cdot 10 = 80$ .

Observemos  $\{\delta(v_1), \delta(v_2), \delta(v_3), \delta(v_4), \delta(v_5), \delta(v_6), \delta(v_7)\} = \{3, 4, 5, 3, 5, 1, 3\}$ , por lo tanto,  $n_2 = 0$ ,  $n_3 = 3$ ,  $n_4 = 1$ ,  $n_5 = 2$ .

Entonces:

$$4N_{P_3} = 4 \cdot \sum_{j \in \{3,4,5\}} \frac{(j-1)j}{2} n_j = 4 \cdot [3 \cdot 3 + 6 \cdot 1 + 10 \cdot 2] = 4 \cdot 35 = 140.$$

Así,

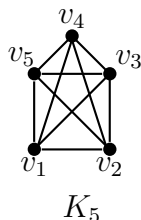
$$\sum \lambda_i^4 = 24 + 80 + 140 = 244.$$

Es decir, en el grafo  $G$  existen 244 caminos cerrados de longitud 4.

En efecto si hallamos la matriz  $A_G^4$  del ejemplo anterior, y calculamos  $Tr(A_G^4)$ , por medio de Maple, obtenemos:

$$A_G^4 = \begin{bmatrix} 28 & 26 & 37 & 20 & 34 & 6 & 26 \\ 26 & 44 & 37 & 35 & 46 & 13 & 33 \\ 37 & 37 & 52 & 27 & 48 & 8 & 34 \\ 20 & 35 & 27 & 29 & 35 & 11 & 27 \\ 34 & 46 & 48 & 35 & 56 & 13 & 37 \\ 6 & 13 & 8 & 11 & 13 & 5 & 10 \\ 26 & 33 & 34 & 27 & 37 & 10 & 30 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \text{Tr}(A_G^4) = 244.$$

**Ejemplo 1.9** Hallar el número de caminos cerrados de longitud 4 en un  $K_5$ ; es decir en,



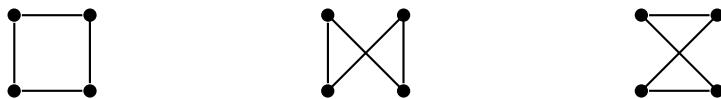
Como  $m = 10$  entonces  $2 \cdot m = 20$ . Como  $K_5$  es regular de grado 4 tenemos que  $\Delta(G) = 4$  y  $n_2 = n_3 = 0$ ,  $n_4 = 5$ ; así:

$$4 N_{P_3} = 4 \sum_{j \in \{4\}} \frac{(j-1)j}{2} n_j = 4[6 \cdot n_4] = 4 \cdot 30 = 120.$$

Luego, para contar los 4-ciclos procedemos a contar los subgrafos inducidos de 4 vértices, como  $K_5$  tiene 5 vértices entonces hay

$$\binom{5}{4} = 5 \quad \text{subgrafos inducidos de 4 vértices.}$$

Observemos que los subgrafos inducidos con 4 vértices de  $K_5$  son los  $K_4$ , y en un  $K_4$  podemos encontrar tres 4-ciclos que son los que mostramos a continuación:



Así que hay un total de  $5 \cdot 3 = 15$  4-ciclos en un  $K_5$ . Entonces  $8N_{C_4} = 8 \cdot 15 = 120$ , por lo tanto,

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^4 = 2m + 8N_{C_4} + 4N_{P_3} = 20 + 120 + 120 = 260.$$

En general podemos deducir que en un grafo completo con  $n$  vértices  $K_n$ , encontramos:

$$\binom{n}{4} \text{ subgrafos inducidos de 4 vértices.}$$

Además como estos subgrafos son completos tenemos que hay tres 4-ciclos en cada uno, por lo tanto, en  $K_n$  hay  $3 \cdot \frac{n!}{4!(n-4)!}$  4-ciclos.

El siguiente resultado lo usaremos más adelante para hallar los números de caminos cerrados de longitud 5 en  $K_5$ , y en el siguiente capítulo para hallar el determinante de  $A_{K_5}$ .

**Proposición 1.9** *Sea un grafo completo  $K_n$ , entonces existen*

$$\frac{n!}{2 \cdot n} \text{ } n\text{-ciclos en } K_n.$$

**Demostración:** Observemos que podemos escribir cada  $n$ -ciclo como un camino:  $v_{m_1} - v_{m_2} - v_{m_3} - v_{m_4} - \dots - v_{m_{n-2}} - v_{m_{n-1}} - v_{m_n} - v_{m_1}$ , con  $m_i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ . Por el principio de la multiplicación hay  $n(n-1)(n-2) \dots 1 = n!$  permutaciones de los vértices de  $K_n$ . Observemos que hay  $n$  permutaciones con la misma secuencia de vértices, es decir,

$$\begin{aligned} &v_{m_1} - v_{m_2} - v_{m_3} - v_{m_4} - \dots - v_{m_{n-2}} - v_{m_{n-1}} - v_{m_n} - v_{m_1}, \\ &v_{m_n} - v_{m_1} - v_{m_2} - v_{m_3} - \dots - v_{m_3} - v_{m_{n-2}} - v_{m_{n-1}} - v_{m_n}, \\ &\quad \vdots \\ &v_{m_3} - v_{m_4} - v_{m_5} - v_{m_6} - \dots - v_{m_n} - v_{m_1} - v_{m_2} - v_{m_3}, \\ &v_{m_2} - v_{m_3} - v_{m_4} - v_{m_5} - \dots - v_{m_{n-1}} - v_{m_n} - v_{m_1} - v_{m_2}, \end{aligned}$$

y además si leemos en sentido contrario estos caminos, tenemos que hay otros  $n$  caminos que generan el mismo  $n$ -ciclo. Por lo tanto hay

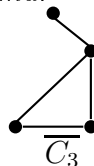
$$\frac{n!}{2 \cdot n} \quad n\text{-ciclos en } K_n. \quad (1.1)$$

■

**Proposición 1.10** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$ , se tiene que el número de caminos cerrados de longitud 5 es:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^5 = 30N_{C_3} + 10N_{C_5} + 10N_{\overline{C_3}},$$

donde:  $N_{C_3}$  es el número de 3-ciclos,  $N_{C_5}$  es el número de 5-ciclos,  $N_{\overline{C_3}}$  es el número de  $\overline{C_3}$ , donde  $\overline{C_3}$  tiene la forma:



**Demostración:** Observemos que los subgrafos tipo árboles no generan caminos cerrados de longitud impar, porque son bipartitos.

Luego el ciclo con menos aristas que tiene caminos cerrados de longitud 5, es el 3-ciclo, hallando  $Tr(A_{C_3}^5)$  encontramos el número de caminos cerrados de longitud 5 que hay en un 3-ciclo, y esto es 30.

Luego el próximo ciclo que tiene caminos cerrados de longitud 5 es el 5-ciclo, cada vértice de  $C_5$  genera dos caminos cerrados de longitud cinco que utiliza todas las aristas, por lo tanto cada 5-ciclo genera diez caminos cerrados de longitud cinco.

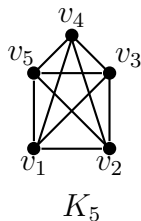
Otro subgrafo que tiene caminos cerrados de longitud 5 es  $\overline{C_3}$ , como contiene un 3-ciclo, entonces el número de caminos cerrados de longitud 5 que usan todas las aristas en  $\overline{C_3}$  es:

$$Tr(A_{\overline{C_3}}^5) - Tr(A_{C_3}^5) = 40 - 30 = 10. \text{ Así,}$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^5 = 30N_{C_3} + 10N_{C_5} + 10N_{\overline{C_3}}.$$

■

**Ejemplo 1.10** Hallar  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^5$  en  $K_5$ .



Como todos los vértices están conectados por una arista entonces el número de 3-ciclos es de 5 vértices elegir 3, y esto es  $\binom{5}{3} = 10$ .

El número de 5-ciclos, utilizando la fórmula (1.1), es  $\frac{5!}{10} = 12$ .

Por último contamos los subgrafos de la forma  $\overline{C_3}$ , como cada vértice tiene grado 4, y dos de estos ya se usan en un 3-ciclo entonces por cada vértice del 3-ciclo hay dos aristas que no se usan en el 3-ciclo, por lo tanto hay 6 subgrafos de la forma de  $\overline{C_3}$  por cada 3-ciclo, es decir, hay en total 60 (porque ya sabemos que hay 10 3-ciclos.)

Por lo tanto,  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^5 = 30 \cdot 10 + 10 \cdot 12 + 10 \cdot 60 = 300 + 120 + 600 = 1020$ .

En efecto si calculamos  $A_{K_5}^5$  y luego la traza de esta matriz, por medio de Maple, obtenemos:

$$A_{K_5}^5 = \begin{bmatrix} 204 & 205 & 205 & 205 & 205 \\ 205 & 204 & 205 & 205 & 205 \\ 205 & 205 & 204 & 205 & 205 \\ 205 & 205 & 205 & 204 & 205 \\ 205 & 205 & 205 & 205 & 204 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \text{Tr}(A_{K_5}^5) = 1020.$$

## CAPÍTULO 2

### TEOREMA DE HARARY Y SACHS

Este capítulo lo dedicaremos a buscar una forma de escribir el determinante de la matriz de adyacencia de un grafo  $G$  simple y finito,  $A_G$ , en función de la estructura del grafo  $G$ , para ello estudiaremos el Teorema de Harary, luego haremos una conexión entre este Teorema y los coeficientes del polinomio característico de un grafo  $G$ , mediante el Teorema de Sachs. Desarrollamos estos Teoremas con ideas planteadas en [1].

Sea  $A_G$  la matriz de adyacencia de un grafo  $G$ , dada por  $A_G = [a_{ij}]$ , sabemos que el determinante de  $A_G$  está definido por:

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}.$$

Con el propósito de expresar las cantidades que aparecen en dicha expansión, es útil introducir las siguientes definiciones.

En lo que sigue  $G = G(V, E)$  es un grafo simple y finito.

**Definición 2.1** *Un grafo elemental, es un grafo simple, donde cada componente es regular y tiene grado 1 ó 2. En otras palabras cada componente es una arista ( $K_2$ ) o un  $r$ -ciclo ( $C_r$ ), con  $r \geq 3$ .*



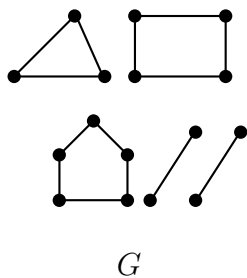
Un subgrafo *elemental generador* de  $G$  es un subgrafo elemental de  $G$  que contiene todos los vértices de  $G$ .

**Definición 2.2** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $|V| = n$  y  $|E| = m$ . Sea  $c$  el número de componentes conexas de  $G$ , entonces el rango y el co-rango de  $G$  son respectivamente

$$r(G) = n - c,$$

$$s(G) = m - n + c.$$

**Ejemplo 2.1** Hallar el rango y el co-rango del siguiente grafo elemental  $G$ .



$$n = 16, \quad m = 14, \quad c = 5$$

Por lo tanto,

$$r(G) = n - c = 11$$

$$s(G) = m - n + c = 3$$

**Lema 2.1** El co-rango de un grafo elemental es igual al número de componentes que son ciclos.

**Demostración:** Sea  $G = G(V, E)$  un grafo elemental, con  $|E| = m$  y  $|V| = n$ . Sean:

$N_{K_2}$  = número de componentes de  $G$  las cuales son aristas,

$N_C$  = número de componentes de  $G$  las cuales son ciclos.

Se tiene que  $c = N_{K_2} + N_C$ .

Sabemos que para cualquier ciclo se tiene que el número de aristas es igual al número de vértices, por lo tanto  $m - n = N_{K_2} - 2N_{K_2} = -N_{K_2}$ . Así,

$$s(G) = m - n + c = -N_{K_2} + N_{K_2} + N_C = N_C.$$

■

**Teorema 2.1 (Teorema de Harary)** Sea  $A_G$  la matriz de adyacencia de un grafo  $G$ .

Sea  $\Omega = \{\Lambda \mid \Lambda \text{ es subgrafo elemental generador de } G\}$ , entonces

$$\det(A_G) = \sum_{\Lambda \in \Omega} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)},$$

donde  $r(\Lambda)$  y  $s(\Lambda)$  son respectivamente el rango y el co-rango de  $\Lambda$ .

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple, con  $n$  vértices, y  $A_G$  la matriz de adyacencia de  $G$ . Estudiaremos el determinante de  $A_G$  por expansión, es decir,

$$\det(A_G) = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \dots a_{n\sigma(n)}.$$

Sea  $\sigma \in S_n$  tal que  $a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \dots a_{n\sigma(n)} \neq 0$ . Notemos que  $\sigma$ , debe ser tal que  $a_{i\sigma(i)} \neq 0$ ,  $i \in \{1, \dots, n\}$ , esto es  $a_{i\sigma(i)} = 1$ , y esto se traduce para el grafo en que  $\{v_i, v_{\sigma(i)}\} \in E$ . En particular  $\sigma$  no deja fijo ningún  $i$ , de lo contrario  $a_{i\sigma(i)} = a_{ii} = 0$ , lo cual anularía el término  $a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \dots a_{n\sigma(n)}$ . Sabemos que  $\sigma$  se puede expresar como composición única de ciclos disjuntos, y como  $\sigma$  no deja fijo ningún  $i$ , entonces cada ciclo es de orden mayor o igual que 2, es decir,

$$\sigma = \rho_1 \rho_2 \dots \rho_m, \text{ donde } \rho_j \text{ son ciclos de orden } k, \text{ con } k \geq 2.$$

Supongamos que  $\rho_j$  tiene orden 2, es decir es una transposición  $(i j)$ , entonces  $(i j)$  se refiere a los factores  $a_{ij} = a_{ji} = 1$ , y éstos a su vez corresponden a una arista  $\{v_i, v_j\} \in E$ .

Si  $\rho_i$  tiene orden  $m > 2$ , es de la forma  $(i_1 i_2 i_3 \dots i_m)$ , esto es que los factores  $a_{i_1 i_2} = a_{i_2 i_3} = a_{i_3 i_4} = \dots = a_{i_m i_1} = 1$ , y esto se traduce a las aristas  $\{v_{i_1}, v_{i_2}\}, \{v_{i_2}, v_{i_3}\}, \dots, \{v_{i_m}, v_{i_1}\} \in E$ . Luego estas aristas forman un  $m$ -ciclo de  $G$ .

Así, tenemos que  $\rho_i$  corresponden a una arista o a un  $m$ -ciclos de  $G$ , es decir que  $\sigma$  da origen a un subgrafo elemental generador  $\Lambda$  de  $G$ , este subgrafo es único por la unicidad de  $\rho_i$ .

En consecuencia, podemos definir una función:

$$\Psi : \{\sigma \in S_n : a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} \neq 0\} \longrightarrow \Omega,$$

$$\sigma = \rho_1 \rho_2 \cdots \rho_m \longrightarrow \Lambda_\sigma$$

Por la unicidad de  $\rho_i$  se tiene que  $\Psi$  está bien definida. Sea  $\sigma = \rho_1 \rho_2 \cdots \rho_m \in \{\sigma \in S_n : a_{1\sigma(1)} \cdots a_{n\sigma(n)} \neq 0\}$ . Estudiemos ahora el signo de la permutación  $\sigma$ , sabemos que  $\text{sgn}(\sigma) = (-1)^T$ , donde  $T$  es el número de transposiciones de  $\sigma$ , y también sabemos que cada  $\rho_i$  es composición de transposiciones que aunque no es única, cualquiera de ellas tiene la misma paridad de transposiciones. Denotemos por:

$$A_\sigma = \{\rho_i : \rho_i \text{ tiene un número par de elementos}\}, \quad N_{A_\sigma} = |A_\sigma|,$$

$$B_\sigma = \{\rho_i : \rho_i \text{ tiene un número impar de elementos}\}, \quad N_{B_\sigma} = |B_\sigma|.$$

Es claro que: Si  $\rho_i \in A_\sigma$  entonces  $\text{sgn}(\rho_i) = -1$ ,

Si  $\rho_i \in B_\sigma$  entonces  $\text{sgn}(\rho_i) = 1$

De manera que el signo de  $\sigma$  dependerá solo de la  $\rho_i$  pertenecientes a  $A_\sigma$ , es decir,

$$\text{sgn}(\sigma) = \text{sgn}(\rho_1 \rho_2 \cdots \rho_m) = \text{sgn}(\rho_1) \text{sgn}(\rho_2) \cdots \text{sgn}(\rho_m) = \text{sgn}(\rho_{k_1}) \text{sgn}(\rho_{k_2}) \cdots \text{sgn}(\rho_{k_t}),$$

donde  $\rho_{k_1}, \rho_{k_2}, \dots, \rho_{k_t} \in A_\sigma$ .

Por lo tanto,

$$\text{sgn}(\sigma) = (-1)^{N_{A_\sigma}}.$$

Veamos ahora que  $\text{sgn}(\sigma) = (-1)^{r(\Lambda_\sigma)}$ .

Supongamos que hay  $N_{C_l}$  ciclos de longitud  $l$ , (en  $\Lambda_\sigma$ ), donde  $N_{C_2}$  es el número de componentes conexas de  $G$  que son aristas, entonces

$$n = 2N_{C_2} + 3N_{C_3} + 4N_{C_4} + \cdots = \sum_{l \geq 2} lN_{C_l}.$$

Si  $\rho_i \in B_\sigma$ ,  $\rho_i$  corresponde a un ciclo de longitud impar, así,

$$N_{B_\sigma} = N_{C_3} + N_{C_5} + N_{C_7} + \cdots,$$

por lo tanto,

$$n - N_{B_\sigma} = 2N_{C_2} + 2N_{C_3} + 4N_{C_4} + 4N_{C_5} + 6N_{C_6} + 6N_{C_7} + \cdots ,$$

Luego,  $2 \mid n - N_{B_\sigma}$  y como  $2 \mid 2N_{A_\sigma}$ , entonces  $2 \mid n - N_{B_\sigma} - N_{A_\sigma} - N_{A_\sigma}$ , y esto es:

$$n - N_{B_\sigma} - N_{A_\sigma} \equiv N_{A_\sigma} \pmod{2}$$

Se sigue que:

$$r(\Lambda_\sigma) = n - c = n - N_{B_\sigma} - N_{A_\sigma} \equiv N_{A_\sigma} \pmod{2}$$

Por lo tanto,  $r(\Lambda_\sigma) \equiv N_{A_\sigma}$ , es decir,  $2 \mid r(\Lambda_\sigma) - N_{A_\sigma}$ , así:

$$r(\Lambda_\sigma) - N_{A_\sigma} = 2q \quad \text{para algún } q \in \mathbb{Z},$$

$$(-1)^{r(\Lambda_\sigma) - N_{A_\sigma}} = (-1)^{2q},$$

$$(-1)^{r(\Lambda_\sigma)} (-1)^{-N_{A_\sigma}} = 1,$$

$$(-1)^{r(\Lambda_\sigma)} = (-1)^{N_{A_\sigma}}.$$

Como  $\text{sgn}(\sigma) = (-1)^{N_{A_\sigma}}$  entonces:

$$\text{sgn}(\sigma) = (-1)^{r(\Lambda_\sigma)}.$$

Estudiemos  $\Psi^{-1}(\Lambda)$ , para  $\Lambda \in \Omega$ .

Sea  $\Lambda_j \in \Omega$ , si a cada componente de  $\Lambda_j$  la cual es arista le asociamos una transposición  $\tau_i$ , y a cada componente de  $\Lambda_j$  la cual es un  $k$ -ciclo le asociamos un ciclo de orden  $k$   $\rho_i$ , obtenemos:  $\Psi^{-1}(\Lambda_j) = \tau_1 \tau_2 \cdots \tau_{n_j} \rho_1 \rho_2 \cdots \rho_{m_j} = \sigma_j$ , notemos que si conmutamos los ciclos y transposiciones obtenemos la misma permutación  $\sigma_j$  porque son disjuntos. Como  $m_j$  es el número de ciclos de  $\Lambda_j$ , por el lema 2.1 tenemos que  $s(\Lambda_j) = m_j$ .

Observemos que  $\rho_i = (i_1 \ i_2 \ i_3 \ \cdots \ i_k)$  y  $\rho'_i = (i_k \ i_{k-1} \ i_{k-2} \ \cdots \ i_1)$  generan el mismo  $k$ -ciclo en  $\Lambda_j$ , luego hay  $2^{s(\Lambda_j)}$  permutaciones en  $\{\sigma \in S_n : a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} \neq 0\}$ , tal que tiene a  $\Lambda_j$  como imagen de  $\Psi$ , es decir  $|\Psi^{-1}(\Lambda_j)| = 2^{s(\Lambda_j)}$ . Particionemos el conjunto

$\{\sigma \in S_n : a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} \neq 0\}$ , por subconjuntos disjuntos  $\Psi^{-1}(\Lambda_j) = \{\sigma_{j1}, \sigma_{j2}, \sigma_{j3}, \dots, \sigma_{j2^{m_j}}\}$ , luego,

$$\det(A_G) = \sum_{\sigma} \operatorname{sgn}(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)},$$

con  $\sigma \in \{\sigma \in S_n : a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} \neq 0\} = \bigcup_{\Lambda_j \in \Omega} \Psi^{-1}(\Lambda_j)$ , pero  $a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)} = 1$ , entonces,

$$\det(A_G) = \sum_{\sigma_j} \sum_{k=1}^{2^{m_j}} \operatorname{sgn}(\sigma_{jk}).$$

$\det(A_G)$  = Así que,

$$\begin{aligned} \det(A_G) &= (\operatorname{sgn}(\sigma_{11}) + \operatorname{sgn}(\sigma_{12}) + \cdots + \operatorname{sgn}(\sigma_{12^{m_1}})) + (\operatorname{sgn}(\sigma_{21}) + \operatorname{sgn}(\sigma_{22}) + \cdots + \operatorname{sgn}(\sigma_{22^{m_2}})) \\ &\quad \cdots + (\operatorname{sgn}(\sigma_{j1}) + \operatorname{sgn}(\sigma_{j2}) + \cdots + \operatorname{sgn}(\sigma_{j2^{m_j}})). \\ &= \operatorname{sgn}(\sigma_{11})2^{s(\Lambda_1)} + \operatorname{sgn}(\sigma_{21})2^{s(\Lambda_2)} + \cdots + \operatorname{sgn}(\sigma_{j1})2^{s(\Lambda_j)} \end{aligned}$$

Así,

$$\det(A_G) = \sum_{\Lambda \in \Omega} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}.$$

■

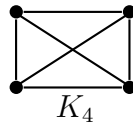
Ahora podemos hallar el determinante de la matriz de adyacencia de un grafo  $G$  en función del rango y el co-rango de los subgrafos elementales generadores de  $G$ . Es importante destacar que para un grafo  $G$  con polinomio característico:

$$P_G(\lambda) = \det(A_G - \lambda I) = \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + c_2 \lambda^{n-2} + \cdots + c_{n-1} \lambda + c_n$$

se tiene:

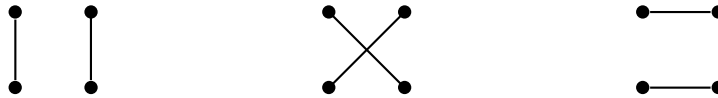
$$P_G(0) = \det(A_G) = c_n.$$

**Ejemplo 2.2** Hallar el determinante de la matriz de adyacencia de  $K_4$ .



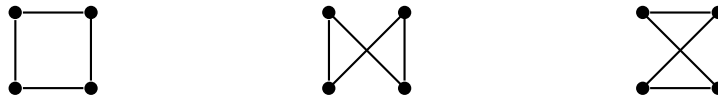
Existen dos tipos de subgrafos elementales con 4 vértices:

1. Los formados por dos pares de aristas disjuntas, que son:



Para los cuales se tiene:  $r = n - c = 2$ ,  $s = \text{número de ciclos} = 0$ .

2. Los 4-ciclos, que son:

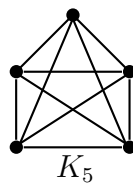


Para los cuales se tiene:  $r = n - c = 3$ , y  $s = \text{número de ciclos} = 1$ .

Así,

$$\det(A_{K_4}) = 3(-1)^2(2)^0 + 3(-1)^3(2)^1 = -3.$$

**Ejemplo 2.3** Hallar el determinante de la matriz de adyacencia de  $K_5$ .



Existen dos tipos de subgrafos elementales con 5 vértices que son:

1. Los formados por un 3-ciclos y una arista, donde:

$$r = n - c = 5 - 2 = 3, \quad s = \text{número de ciclos} = 1.$$

2. Los 5-ciclos, donde:

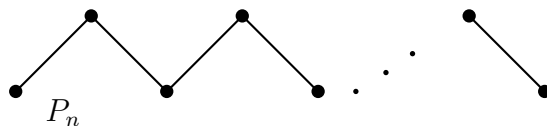
$$r = n - c = 5 - 1 = 4, \quad s = \text{número ciclos} = 1.$$

La forma de saber cuántos subgrafos del primer tipo hay en un  $K_5$  es contar las formas que hay de elegir tres vértices de cinco para formar el 3 ciclo y los dos vértices restantes formarán la arista, esto es,  $\binom{5}{3} = 10$ .

Para contar los 5-ciclos que hay en  $K_5$  utilizamos la fórmula (1.1), esto es  $\frac{5!}{2 \cdot 5} = 12$ , por lo tanto,

$$\det(A_{K_5}) = 10(-1)^3(2)^1 + 12(-1)^4(2)^1 = -20 + 24 = 4.$$

**Ejemplo 2.4** Hallar el determinante de la matriz de adyacencia de una trayectoria  $P_n$ .



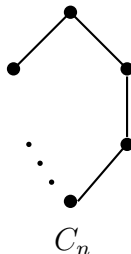
Observemos que para que  $P_n$  tenga un único subgrafo elemental generador,  $n$  debe ser de la forma  $2q$ . Así podremos encontrar el subgrafo elemental generador formado por  $q$  aristas disjuntas, luego:

$$r = n - c = 2q - q = q, \quad s = \text{número de ciclos} = 0.$$

Por lo tanto:

$$\det(A_{P_n}) = \begin{cases} (-1)^q & \text{si } n = 2q \\ 0 & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases}$$

**Ejemplo 2.5** Hallar el determinante de la matriz de adyacencia de un ciclo  $C_n$ .



Si  $n$  es impar tenemos que el único subgrafo elemental generador de  $C_n$  es él mismo, así tenemos que:

$$r = n - c = n - 1, \quad s = \text{número de ciclos} = 1.$$

Por lo tanto:

$$\det(A_{C_n}) = (-1)^{n-1} 2^1 = 2, \quad \text{para } n \text{ impar}$$

Si  $n$  es par, podemos escribirlo de la forma  $n = 2q$ , así tenemos dos tipos de subgrafos elementales generadores de  $C_n$  que son:

1. Los que tienen  $q$  aristas disjuntas, los cuales son dos, y para ellos tenemos:

$$r = n - c = q, \quad s = \text{número de ciclos} = 0.$$

2. El mismo ciclo para el cual tenemos:

$$r = n - c = n - 1, \quad s = \text{número de ciclos} = 1.$$

Por lo tanto para  $n = 2q$ ,

$$\det(A_{C_{2q}}) = 2(-1)^q 2^0 + (-1)^{n-1} 2^1 = \begin{cases} 0 & \text{si } q \text{ es par} \\ -4 & \text{si } q \text{ es impar} \end{cases}$$

**Teorema 2.2 (Teorema de Sachs)** Sea  $G$  un grafo simple y finito, y sea  $P_G(\lambda)$  su polinomio característico,

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + c_2 \lambda^{n-2} + c_3 \lambda^{n-3} + \cdots + c_{n-1} \lambda + c_n,$$

entonces los coeficientes del polinomio característico están dados por:

$$(-1)^i c_i = \sum (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)},$$

donde la sumatoria está tomada sobre todos los subgrafos elementales,  $\Lambda$  de  $G$ , con  $i$  vértices.



**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo simple con  $|V| = n$ . Notemos que existen  $\binom{n}{i}$  subgrafos inducidos de  $G$  con  $i$  vértices. Sea  $\{G_{i_1}, G_{i_2}, \dots, G_{i_{\binom{n}{i}}}\}$  el conjunto de los subgrafos inducidos de  $G$  con  $i$  vértices.

Sabemos que los coeficientes del polinomio característico de un grafo  $G$  están dados por:

$$(-1)^i c_i = \sum (\text{todos los menores principales de orden } i),$$

donde cada menor principal es el determinante de la matriz de adyacencia de un grafo inducido  $G_{i_k}$ ,  $A_{G_{i_k}}$  es decir,

$$(-1)^i c_i = \det(A_{G_{i_1}}) + \det(A_{G_{i_2}}) + \dots + \det(A_{G_{i_{\binom{n}{i}}}}) = \sum_{k=1}^{\binom{n}{i}} \det(A_{i_k}),$$

Denotemos por:

$$M_{i_k} = \{\text{subgrafos elementales generadores de } G_{i_k}\}.$$

$$M_i = \{\text{subgrafos elementales con } i \text{ vértices de } G\} = \bigcup M_{i_k}.$$

por el Teorema de Harary,

$$\det(A_{i_k}) = \sum_{\Lambda \in M_{i_k}} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}.$$

Por lo tanto,

$$(-1)^i c_i = \sum_{\Lambda \in M_{i_1}} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)} + \sum_{\Lambda \in M_{i_2}} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)} + \dots + \sum_{\Lambda \in M_{i_{\binom{n}{i}}}} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}.$$

$$(-1)^i c_i = \sum_{\Lambda \in M_i} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)}$$

■

Corroboramos la Proposición 1.2,  $c_1 = 0$ , ya que no hay grafos elementales con un vértice. El único subgrafo elemental con dos vértices es el que está formado por una arista y a éste le corresponde  $r = n - c = 1$  y  $s = \text{número de ciclos} = 0$ , por lo tanto,

$$(-1)^2 c_2 = \sum_{\Lambda \in M_2} (-1)^1 2^0 = -1|M_2|,$$

donde  $M_2 = \{\text{subgrafos elementales de } G \text{ con 2 vértices}\}$ , luego,

$$-c_2 = \text{número de aristas de } G.$$

Los únicos subgrafos elementales con tres vértices son los 3-ciclos para los cuales se tiene que  $r = n - c = 2$  y  $s = \text{número de ciclos} = 1$ , por lo tanto,

$$(-1)^3 c_3 = \sum_{\Lambda \in M_3} (-1)^2 2^1,$$

donde  $M_3 = \{\text{subgrafos elementales de } G \text{ con 3 vértices de}\}$ , así,

$$-c_3 = 2 \text{ veces el número de 3-ciclos de } G.$$

Entre los subgrafos elementales con cuatro vértices tenemos dos tipos:

1. Los formados por dos aristas disjuntas, donde se cumple:

$$r = n - c = 2 \quad s = \text{número de ciclos} = 0$$

2. Los 4-ciclos, donde se cumple:

$$r = n - c = 3, \quad s = \text{número de ciclos} = 1.$$

Sea  $M_4 = \{\text{subgrafos elementales de } G \text{ con 4 vértices}\}$ , entonces  $|M_4| = N_{2k_2} + N_{C_4}$  donde  $N_{2k_2}$  es el número de subgrafos formados por dos aristas disjuntas y  $N_{C_4}$  es el número de 4-ciclos que hay en  $G$ .

Así,

$$(-1)^4 c_4 = \sum_{\Lambda \in M_4} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)} = N_{2k_2} (-1)^2 2^0 + N_{C_4} (-1)^3 2^1$$

$$c_4 = N_{2k_2} - 2N_{C_4}.$$

Entre los subgrafos elementales con cinco vértices tenemos dos tipos:

1. Los formados por una arista y un 3-ciclos, donde se cumple:

$$r = n - c = 3, \quad s = \text{número de ciclos} = 1$$

2. Los 5-ciclos, donde se tiene que:

$$r = n - c = 4 \quad s = \text{número de ciclos} = 1.$$

Sea  $M_5 = \{\text{subgrafos elementales de } G \text{ con 5 vértices}\}$ , entonces  $|M_5| = N_{K_2 \cup C_3} + N_{C_5}$  donde  $N_{K_2 \cup C_3}$  es el número de subgrafos formados por una arista y un 3-ciclo y  $N_{C_5}$  es el número de 5-ciclos que hay en  $G$ .

Así,

$$(-1)^5 c_5 = \sum_{\Lambda \in M_5} (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)} = N_{K_2 \cup C_3} (-1)^3 2^1 + N_{C_5} (-1)^4 2^1$$

Por lo tanto

$$-c_5 = -2N_{K_2 \cup C_3} + 2N_{C_5}.$$

**Ejemplo 2.6** Hallar el polinomio característico de una trayectoria  $P_n$  y de un ciclo  $C_n$ .

Por el Teorema de Sachs, los coeficientes del polinomio característico están dados por:

$$(-1)^i c_i = \sum (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)},$$

donde la sumatoria es tomada sobre todos los subgrafos elementales,  $\Lambda$  de  $G$ , con  $i$  vértices.

Para los subgrafos elementales con  $i$  vértices de una trayectoria  $P_n$  y de un ciclo  $C_n$  se tiene:

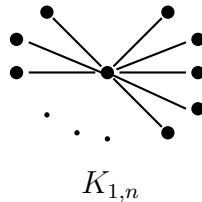
- Si  $i$  es impar no hay subgrafos elementales, por lo tanto  $c_i = 0$ .

Así,

$$P_G(\lambda) = \lambda^n - m\lambda^{n-2} + c_4\lambda^{n-4} + c_6\lambda^{n-6} + c_8\lambda^{n-8} + \cdots + c_n,$$

donde  $G$  es una trayectoria o un ciclo y  $m$  es el número de aristas de  $G$ .

**Ejemplo 2.7** Hallar el polinomio característico de una estrella  $K_{1,n}$



$c_1 = 0$ ,  $-c_2 = \text{número de aristas} = n$ , y para  $i > 3$  se tiene que  $c_i = 0$ , ya que no hay subgrafos elementales con más de tres vértices. Así:

$$P_{1,n}(\lambda) = \lambda^{n+1} - n\lambda^{n-1} = \lambda^{n-1}(\lambda^2 - n).$$

De este ejemplo podemos deducir que el espectro de una estrella  $K_{1,n}$  está dado por:

$$\text{spec}(K_{1,n}) = \begin{pmatrix} -\sqrt{n} & 0 & \sqrt{n} \\ 1 & n-1 & 1 \end{pmatrix}.$$

# CAPÍTULO 3

---

## APLICACIONES A LA QUÍMICA

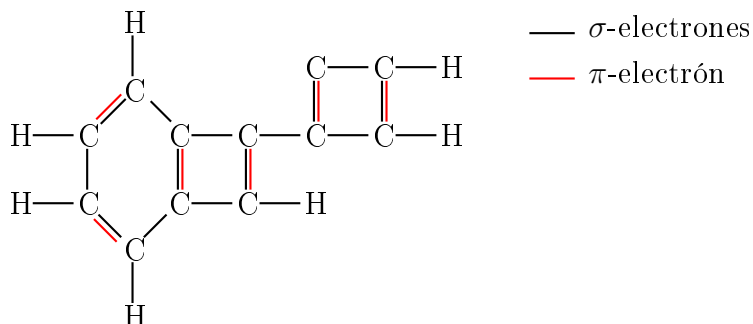
En este capítulo veremos algunas aplicaciones de la teoría espectral de grafos en problema de la química. Estos resultados están planteados en [2].

Consideremos ciertos compuestos químicos formados por carbonos (C) e hidrógenos (H), los llamados *hidrocarburos conjugados*.

La valencia del carbono es 4, o sea, un átomo de carbono forma enlaces con átomos vecinos para constituir moléculas al compartir 4 de sus electrones.

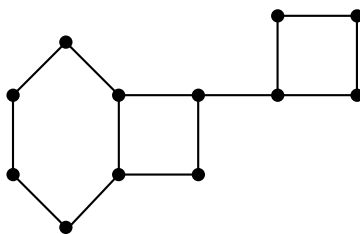
En los compuestos que nos interesan,  $\sigma$  de estos enlaces se efectúan compartiendo electrones, ( $\sigma$ -electrones), con tres átomos diferentes de carbono o de hidrógeno, y el cuarto enlace se efectúa por medio de un electrón, ( $\pi$ -electrón), que comparte con cualquier carbono, para éste segundo átomo, el electrón compartido es también un  $\pi$ -electrón.

En particular, dos átomos de carbono pueden compartir dos electrones: un  $\sigma$ -electrón y un  $\pi$ -electrón, dando lugar a los conocidos enlaces dobles. La siguiente figura muestra un hidrocarburo conjugado.



El *esqueleto* de una molécula puede representarse por medio de un grafo llamado *grafo molecular* que se obtiene de la siguiente manera: se toma un vértice por cada átomo de carbono, dos vértices son adyacentes, si y sólo si, hay un  $\sigma$ -electrón que define un enlace entre los átomos de carbono correspondiente.

El grafo asociado a la molécula anterior es:



Estos grafos moleculares son grafos simples, conexos, y el máximo grado de un vértice es 3.

Se conoce que si el grafo molecular  $G$  de un hidrocarburo conjugado es bipartito entonces la molécula es *alternante*. En este caso se sabe que si  $0 \in \text{spec}(A_G)$  entonces la molécula es *inestable químicamente*.

Sea  $G$  un grafo bipartito, el objetivo de este capítulo es saber si  $0 \in \text{spec}(A_G)$ . Sea  $\eta(G)$  la multiplicidad algebraica del cero en el espectro de  $A_G$ .

Utilizando los resultados del Teorema de Harary y el Teorema de Sachs, podemos encontrar rápidamente  $\eta(P_n)$ ,  $\eta(C_n)$  y  $\eta(G)$ , donde  $P_n$  es una trayectoria,  $C_n$  es un ciclo de longitud par (ya que los de longitud impar no son grafos bipartitos), y  $G$  es un árbol.

**Proposición 3.1** *Sea  $P_n$  una trayectoria de longitud  $n$ , entonces*

$$\eta(P_n) = \frac{1}{2} \left( 1 - (-1)^n \right).$$

**Demostración:** Del Ejemplo 2.6 sabemos que el polinomio característico de  $P_n$  es:

$$P_{P_n}(\lambda) = \lambda^n - m\lambda^{n-2} + c_4\lambda^{n-4} + c_6\lambda^{n-6} + c_8\lambda^{n-8} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n,$$

donde  $m$  es el número de aristas de  $P_n$ . Como  $\det(A_{P_n}) = c_n$  entonces, del Ejemplo 2.4, se tiene que:

$$c_n = \begin{cases} (-1)^q & \text{si } n = 2q \\ 0 & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases}.$$

Por lo tanto,

- Si  $n$  par,  $c_n \neq 0$ , entonces  $\eta(P_n) = 0$ .
- Si  $n$  es impar,  $c_n = 0$ , veamos que  $c_{n-1} \neq 0$ . Por el Teorema de Sachs se tiene que:

$$(-1)^{n-1}c_{n-1} = \sum (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)},$$

donde la sumatoria es tomada sobre el conjunto de los subgrafos elementales de  $P_n$  con  $n - 1$  vértices. Como  $n - 1$  es par, es decir,  $n - 1 = 2q$ , hay un sólo tipo de sugrafo elemental con  $2q$  vértices en  $P_n$ , que es el que está formado por  $q$  aristas disjuntas dos a dos, para este tipo de subgrafo elemental tenemos:

$$(-1)^{r(\Lambda)} = (-1)^q \quad \text{y} \quad 2^{s(\Lambda)} = 2^0 = 1,$$

entonces, si  $N_{qK_2}$  es el número de subgrafos elementales que está formado por  $q$  aristas disjuntas, se tiene:

$$c_{n-1} = (-1)^q N_{qK_2} \neq 0.$$

Así,

$$P_{P_n}(\lambda) = \lambda(\lambda^{n-1} - m\lambda^{n-3} + c_4\lambda^{n-5} + c_6\lambda^{n-7} + c_8\lambda^{n-9} + \cdots + c_{n-1}).$$

Así,  $\eta(P_n) = 1$  si  $n$  es impar.

Luego podemos reescribir  $\eta(P_n)$  en función de  $n$  como sigue:

$$\eta(P_n) = \frac{1}{2}(1 - (-1)^n).$$

■

**Proposición 3.2** *Sea  $C_n$  un  $n$ -ciclo, con  $n = 2q$ , entonces*

$$\eta(C_n) = 1 + (-1)^q$$

**Demostración:** Del Ejemplo 2.6 sabemos que el polinomio característico de  $C_n$  es:

$$P_{C_n}(\lambda) = \lambda^n - m\lambda^{n-2} + c_4\lambda^{n-4} + c_6\lambda^{n-6} + c_8\lambda^{n-8} + \cdots + c_n,$$

donde  $m$  es el número de aristas de  $C_n$ . Como  $\det(A_{C_n}) = c_n$  entonces del Ejemplo 2.5 se tiene que:

$$c_n = \begin{cases} 0, & \text{si } n = 2q \text{ y } q \text{ es par} \\ -4, & \text{si } n = 2q \text{ y } q \text{ es impar} \end{cases}$$

Por lo tanto

- Si  $q$  impar se tiene que  $c_n \neq 0$ , luego  $\eta(C_n) = 0$
- Si  $q$  par se tiene que  $c_n = 0$ , luego  $\eta(C_n) > 0$ .

Para hallar la multiplicidad algebraica del cero en  $C_{2q}$ , cuando  $q$  es par, veamos que el coeficiente  $c_{2q-2} \neq 0$ , por el Teorema de Sachs se tiene que:

$$(-1)^{2q-2}c_{2q-2} = \sum (-1)^{r(\Lambda)}2^{s(\Lambda)},$$

donde la sumatoria es tomada sobre el conjunto de los subgrafos elementales de  $C_n$  con  $2q - 2$  vértices. Como  $2q - 2$  es par, hay un sólo tipo de subgrafo elemental con  $2q - 2$  vértices en  $C_n$ , que es el que está formado por  $q - 1$  aristas disjuntas dos a dos, para este tipo de subgrafo elemental tenemos que:

$$(-1)^{r(\Lambda)} = (-1)^{q-1} \quad \text{y} \quad 2^{s(\Lambda)} = 2^0 = 1,$$



entonces, si  $N_{(q-1)K_2}$  es el número de subgrafos elementales de  $C_n$  que está formado por  $q - 1$  aristas disjuntas, se tiene:

$$c_{2q-2} = (-1)^{q-1} N_{(q-1)K_2} \neq 0.$$

Así, el polinomio característico de  $C_{2q}$ , para  $q$  par es:

$$\begin{aligned} P_{C_n}(\lambda) &= \lambda^n - m\lambda^{n-2} + c_4\lambda^{n-4} + c_6\lambda^{n-6} + c_8\lambda^{n-8} + \cdots + c_{2q-2}\lambda^2. \\ &= \lambda^2(\lambda^{n-2} - m\lambda^{n-4} + c_4\lambda^{n-6} + c_6\lambda^{n-8} + c_8\lambda^{n-10} + \cdots + c_{2q-2}). \end{aligned}$$

Así  $\eta(C_{2q}) = 2$ , para  $q$  par. Luego, si  $n = 2q$  podemos reescribir  $\eta(C_n)$  en función de  $q$  de la siguiente manera:

$$\eta(C_{2q}) = 1 + (-1)^q.$$

■

**Proposición 3.3** *Sea  $G$  un árbol con  $n$  vértices y  $q$  es el máximo número de aristas no adyacentes dos a dos de  $G$ , entonces*

$$\eta(G) = n - 2q.$$

**Demostración:** El polinomio característico de un árbol  $G$  es:

$$P_G(\lambda) = \lambda^n + c_2\lambda^{n-2} + c_3\lambda^{n-3} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n.$$

Por el Teorema de Sachs sabemos que

$$(-1)^i c_i = \sum (-1)^{r(\Lambda)} 2^{s(\Lambda)},$$

donde la sumatoria está tomada sobre todos los subgrafos elementales,  $\Lambda$  de  $P_n$ , con  $i$  vértices. El único tipo de subgrafos elementales con  $i$  vértices de un árbol es el que está formado por aristas disjuntas dos a dos, y para ello  $i$  debe ser par, así :

$$c_i = 0 \text{ para } i \text{ impar.}$$

Supongamos que  $q \leq n$  es el número máximo de aristas disjuntas dos a dos que hay en  $G$ , entonces es claro que  $c_{2q} = (-1)^q N_{qK_2} \neq 0$ , donde  $N_{qK_2}$  es el número de subgrafos elementales que está formado por  $q$  aristas disjuntas, y que  $c_i = 0$  para  $i > 2q$ . Luego el polinomio característico de un árbol  $G$  es:

$$\begin{aligned} P_G(\lambda) &= \lambda^n + c_2\lambda^{n-2} + c_4\lambda^{n-4} + \cdots + c_{2q}\lambda^{n-2q} \\ &= \lambda^{n-2q}(\lambda^{2q} + c_2\lambda^{2q-2} + c_4\lambda^{2q-4} + \cdots + c_{2q}). \end{aligned}$$

Por lo tanto  $\eta(G) = n - 2q$

■

A continuación estudiaremos la multiplicidad algebraica del cero en grafos simples, luego podremos hallar la multiplicidad algebraica del cero en grafos bipartitos, además estudiaremos una cota inferior para este valor en grafos bipartitos.

**Proposición 3.4** *Sea  $G(V, E)$  un grafo simple con  $n$  vértices, entonces*

$$\eta(G) = n - rgA_G.$$

**Demostración:** Sabemos que si  $\lambda \in \text{spec}(A_G)$  entonces

$$m_a(\lambda) = m_g(\lambda) = \dim(\ker(A_G - \lambda I)).$$

Aplicando el Teorema de la Dimensión a la siguiente transformación lineal:

$$\begin{aligned} A_G - \lambda I : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^n \\ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_4 \end{pmatrix} &\longrightarrow (A_G - \lambda I) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

se tiene que:

$$\dim(\mathbb{R}^n) = \dim(\ker(A_G - \lambda I)) + \dim(\text{Im}(A_G - \lambda I))$$

Por lo tanto

$$\dim(\ker(A_G - \lambda I)) = n - \dim(\text{Im}(A_G - \lambda I))$$

Luego, si  $\lambda = 0$ , entonces,

$$\dim(\ker(A_G)) = n - \text{rg}(A_G)$$

$$\eta(G) = n - \text{rg}A_G.$$

■

Recordemos que la matriz de adyacencia de un grafo bipartito  $G(V, E)$ , es de la forma:

$$A_G = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^t & 0 \end{pmatrix},$$

donde a  $B$  es la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $V$ , y  $B^t$  es la matriz transpuesta de  $B$ .

**Proposición 3.5** *Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito con  $n$  vértices y con una matriz de incidencia  $B$ , entonces*

$$\eta(G) = n - 2\text{rg}B,$$

donde  $\text{rg}B$  es el rango de la matriz  $B$ .

**Demostración:** De la Proposición 3.4 se tiene que

$$\eta(G) = n - \text{rg}A_G,$$

pero  $\text{rg}A_G = 2\text{rg}B$ , así

$$\eta(G) = n - 2\text{rg}B$$

■

**Corolario 3.1** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito con  $n$  vértices y sean  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de bipartición de  $V$ , supongamos que  $|V_1| = n_1$  y  $|V_2| = n_2$ , entonces

$$\eta(G) \geq \max\{n_1, n_2\} - \min\{n_1, n_2\}.$$

**Demostración:** Sea  $B$  la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $V$ , es claro que:

$$rgB \leq \min\{n_1, n_2\}$$

$$-2rgB \geq -2 \min\{n_1, n_2\}$$

$$n - 2rgB \geq n - 2 \min\{n_1, n_2\}$$

Sin pérdida de generalidad supongamos que  $n_1 = \min\{n_1, n_2\}$ , así

$$n - 2rgB \geq n_1 + n_2 - 2n_1 = n_2 - n_1.$$

Luego de la Proposición 3.5 se tiene que:

$$\eta(G) \geq \max\{n_1, n_2\} - \min\{n_1, n_2\}.$$

■

**Observación:** Si el número de vértices  $n$  es impar, es claro que  $n_1 \neq n_2$ , (ya que  $n_1 + n_2 = n$ ), como  $\eta(G) \geq \max\{n_1, n_2\} - \min\{n_1, n_2\}$ , entonces  $\eta(G) > 0$ . Por lo tanto, si  $\eta(G) = 0$  entonces  $n$  es par. Así una condición necesaria para que la molécula sea estable es que debe tener un número par de átomos de carbono.

Si se tiene un grafo bipartito complicado, el siguiente resultado podría ayudar a hallar la multiplicidad del cero en dicho grafo.

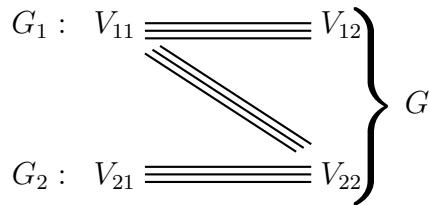
**Proposición 3.6** Sean  $G_1 = (V_1, E_1)$  y  $G_2 = (V_2, E_2)$  grafos bipartitos, con  $V_{11}, V_{12}$  los conjuntos de bipartición de  $V_1$ , y  $V_{21}, V_{22}$  los conjuntos de bipartición de  $V_2$ . Supongamos que:  $|V_{11}| = n_1$ ,  $|V_{12}| = n_2$ ,  $n_1 \leq n_2$  y  $\eta(G_1) = n_2 - n_1$ . Si el grafo  $G$  es obtenido a partir de  $G_1$  y de  $G_2$ , por la unión arbitraria de vértices de  $V_{11}$  (ó de  $V_{12}$ ) a vértices de  $V_{21}$  (ó de  $V_{22}$ ), entonces,

$$\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(G_2).$$

**Demostración:** Sean  $|V_1| = n$ ,  $B_1$  y  $B_2$  las respectivas matrices de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $V_1$  y de  $V_2$ . Por el Teorema 3.5 se tiene que  $\eta(G_1) = n - 2rgB_1$ , como  $\eta(G_1) = n_2 - n_1$  entonces

$$rgB_1 = n_1.$$

Supongamos que  $G(V, E)$  es un grafo que se obtiene al unir vértices de  $V_{11}$  con vértices de  $V_{22}$ , gráficamente podemos representarlo así:



Donde el grafo  $G_1$  conecta vértices de  $V_{11}$  con vértices de  $V_{12}$ , el grafo  $G_2$  que conecta vértices de  $V_{21}$  con vértices de  $V_{22}$ , luego  $G$  son todas las aristas anteriores más las que conecta vértices de  $V_{11}$  con vértices de  $V_{22}$ .

Entonces  $G$  es un grafo bipartito con los conjuntos de bipartición:  $V_{11} \cup V_{21}$  y  $V_{12} \cup V_{22}$ .

La matriz de adyacencia de  $G$  es:

$$A_G = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_{11} & v_{21} & v_{12} & v_{22} \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_{11} \\ v_{21} \\ v_{12} \\ v_{22} \end{matrix} & \left( \begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & B_1 & M \\ 0 & 0 & 0 & B_2 \\ \hline B_1^t & 0 & 0 & 0 \\ M^t & B_2^t & 0 & 0 \end{array} \right), \end{matrix}$$

donde  $M$  es la matriz que corresponde a las nuevas aristas entre  $V_{11}$  y  $V_{22}$ .

Luego,  $B$  está dada por:

$$B = \begin{pmatrix} B_1 & M \\ 0 & B_2 \end{pmatrix}$$

Como  $rgB_1 = n_1$  entonces  $B_1$  contiene  $n_1$  columnas linealmente independientes, en consecuencia cada columna de la matriz  $M$  puede ser expresada como combinación lineal de las mencionadas columnas de  $B_1$ .

Así la matriz  $B$  puede ser reducida por operaciones elementales a la forma:

$$B \sim \begin{pmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto  $rgB = rgB_1 + rgB_2$ . Como  $|V| = n + n'$  donde  $n = |V_{11}| + |V_{12}|$  y  $n' = |V_{21}| + |V_{22}|$ , entonces:

$$\eta(G) = n + n' - 2(rgB_1 + rgB_2) = (n - 2rgB_1) + (n' - rgB_2) = \eta(G_1) + \eta(G_2).$$

$$\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(G_2).$$

■

**Proposición 3.7** *Sea  $G$  el grafo bipartito que contiene un vértice de grado 1, y sea  $H$  el subgrafo inducido de  $G$  que se obtiene al eliminar el vértice de grado 1 junto con el vértice adyacente a este, entonces*

$$\eta(G) = \eta(H).$$

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito, sean:  $v_1 \in V$  un vértice de grado 1,  $v_2 \in V$  el vértice adyacente a  $v_1$ . Consideremos  $G_1$  el subgrafo inducido de  $G$  que consta sólo de la arista  $\{v_1, v_2\}$ , y  $H$  el subgrafo inducido de  $G$  que se obtiene al eliminar los vértices  $v_1$  y  $v_2$ , es claro que  $G_1$  y  $H$  son grafos bipartitos. Por la Proposición 3.5 se tiene que  $\eta(G_1) = 0$ . Sean  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de bipartición de los vértice de  $G_1$ , es claro que  $|V_1| = |V_2| = 1$ , así se cumple que  $\eta(G_1) = |V_1| - |V_2|$ .

Como  $G$  se obtiene al unir el vértice  $v_2$  de  $G_1$  con vértices de uno de los conjuntos de bipartición de  $H$ , entonces por la Proposición 3.6 se cumple:

$$\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(H) = \eta(H).$$

$$\eta(G) = \eta(H).$$

■

**Proposición 3.8** Sean  $G_1$  y  $G_2$  grafos bipartitos. Si  $\eta(G_1) = 0$  y si el grafo  $G$  es obtenido por la unión arbitraria de un vértice de  $G_1$ , por una arista, con un vértice de  $G_2$ , entonces

$$\eta(G) = \eta(G_2).$$

**Demostración:** Sea  $B_1$  la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de los vértices de  $G_1$ , como  $\eta(G_1) = 0$  entonces por el Teorema 3.5 se tiene que  $n - 2rgB_1 = 0$ , luego  $rgB_1 = \frac{n}{2}$ , esto quiere decir que los conjuntos de bipartición de los vértices de  $G_1$  tienen la misma cardinalidad.

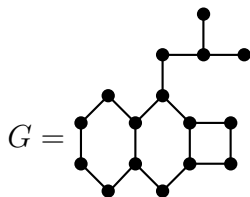
Como  $G$  se obtiene a partir de una arista entre  $G_1$  y  $G_2$  entonces por la Proposición 3.6 se cumple

$$\eta(G) = \eta(G_1) + \eta(G_2) = \eta(G_2)$$

$$\eta(G) = \eta(G_2).$$

■

**Ejemplo 3.1** Utilizando los resultados anteriores, veamos que es posible reducir un grafo a otro mas simple donde será más fácil hallar la multiplicidad algebraica del cero. Sea  $G$  el grafo molecular dado por:



Entonces,

$$\eta(G) = \eta \left( \begin{array}{c} \text{Diagram of } G \\ \bullet \end{array} \right) = \eta \left( \begin{array}{c} \text{Diagram of } G \text{ with pendant chain removed} \\ \bullet \end{array} \right) \quad \text{Aplicando la Proposición 3.7}$$

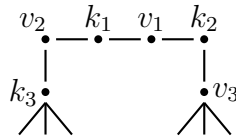
$$= \eta \left( \begin{array}{c} \bullet \\ \square \\ \bullet \end{array} \right) \quad \begin{array}{l} \text{Aplicando la Proposición 3.8,} \\ \text{ya que } \eta(C_6) = 0 \text{ por la Proposición 3.2} \end{array}$$

$$= \eta \left( \begin{array}{c} \bullet \\ \bullet \\ \bullet \end{array} \right) = \eta(\bullet) + \eta(\bullet) = 1 + 1 = 2$$

**Proposición 3.9** Una trayectoria de cuatro vértices de grado dos en un grafo bipartito  $G$  puede ser reemplazado por una arista sin cambiar el valor de  $\eta(G)$ , esto es:

$$\eta \left( \begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right) = \eta \left( \begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right)$$

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito con  $|V| = n$ . Sean  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de bipartición de  $V$ , con  $|V_1| = n_1$ , sin perder generalidad etiquetemos los cuatro vértices de grado dos de la trayectoria perteneciente al grafo  $G$  de la siguiente manera:



Supongamos que  $v_1, v_2, v_3 \in V_1$  y  $k_1, k_2, k_3 \in V_2$ . Sea  $B_1$  la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $G$ , entonces  $A_G$  tiene la siguiente forma:

$$A_G = \begin{array}{c} v_1 \quad v_2 \\ v_1 \quad v_2 \\ v_2 \end{array} \begin{pmatrix} 0 & B_1 \\ B_1^t & 0 \end{pmatrix},$$



donde,

$$B_1 = \begin{array}{c} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \left( \begin{array}{cccc|cccc} & k_1 & k_2 & k_3 & \cdots & & & & & \\ \hline & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & & & \\ & 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & & & \\ \hline & 0 & 1 & 0 & & & b & & & \\ & 0 & 0 & & & & & & & \\ & \vdots & \vdots & c & & & & K & & \\ & 0 & 0 & & & & & & & \end{array} \right),$$

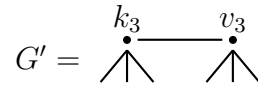
con  $b$  y  $c$  vectores y  $K$  una matriz  $(n_1 - 3) \times (n - n_1 - 3)$  de ceros y unos. Por medio de operaciones elementales de filas y de columnas se tiene que  $B_1$  es semejante a:

$$B_1 \sim \left( \begin{array}{cc|cccc} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & & & b \\ 0 & 0 & & & & \\ \vdots & \vdots & c & & & K \\ 0 & 0 & & & & \end{array} \right),$$

Así:

$$rg B_1 = 2 + rg \begin{pmatrix} 1 & b \\ c & K \end{pmatrix}.$$

Consideremos  $G'$  al grafo bipartito obtenido de  $G$  al quitar los vértices  $v_1, v_2, k_1, k_2$ , y agregando la arista  $\{v_3, k_3\}$  como se muestra en la siguiente figura:



Es claro que la cardinalidad del conjunto de vértices de  $G'$  es  $n - 4$ , y que la matriz de adyacencia  $A_{G'}$  es:

$$A_{G'} = \begin{pmatrix} 0 & B_2 \\ B_2^t & 0 \end{pmatrix},$$

donde  $B_2$  tiene la siguiente forma:

$$B_2 = \begin{matrix} & & k_3 & \dots \\ v_3 & \begin{pmatrix} 1 & b \\ c & K \end{pmatrix} \\ \vdots & & & \end{matrix}$$

Así que  $rgB_1 = 2 + rgB_2$ , por lo tanto,

$$\eta(G) = n - 2rg(B_1) = n - 2(2 + rgB_2) = (n - 4) - 2rgB_2 = \eta(G').$$

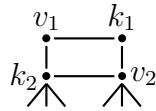
$$\eta(G) = \eta(G').$$

■

**Proposición 3.10** Para un 4-ciclo en un grafo bipartito  $G$ , el cual tiene dos vértices consecutivos de grado 2, se tiene que estos dos vértices y las cuatro aristas del 4-ciclo pueden eliminarse sin cambiar el valor de  $\eta(G)$ , esto es:

$$\eta\left(\begin{array}{cc} \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{array}\right) = \eta\left(\begin{array}{cc} \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots \end{array}\right)$$

**Demostración:** Sea  $G(V, E)$  un grafo bipartito, con  $|V| = n$ . Sean  $V_1$  y  $V_2$  los conjuntos de bipartición de  $V$ , con  $|V_1| = n_1$ , sin perder generalidad etiquetemos los vértices del 4-ciclo perteneciente al grafo  $G$  la siguiente manera:



Supongamos que  $v_1, v_2 \in V_1$  y  $k_1, k_2 \in V_2$ . Sea  $B_1$  la matriz de incidencia de los conjuntos de bipartición de  $G$ , entonces  $A_G$  tiene la siguiente forma:

$$A_G = \begin{matrix} & & v_1 & v_2 \\ v_1 & & 0 & B_1 \\ v_2 & & B_1^t & 0 \end{matrix},$$

donde,

$$B_1 = \begin{matrix} & & k_1 & k_2 & \dots \\ v_1 & & 1 & 0 & \dots & 0 \\ v_2 & & 1 & 1 & & b \\ \vdots & & 0 & & & \\ & & \vdots & c & & K \\ & & 0 & & & \end{matrix},$$

con  $b$  y  $c$  vectores y  $K$  una matriz  $(n_1 - 2) \times (n - n_1 - 2)$ , de ceros y unos. Por medio de operaciones elementales tenemos que:

$$B_1 \sim \left( \begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & & b \\ 0 & & & & \\ \vdots & c & & & K \\ 0 & & & & \end{array} \right)$$

Así:

$$rg B_1 = 1 + rg \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & K \end{pmatrix}.$$

Tomando  $G'$  al subgrafo bipartito de  $G$  dado por:

$$k_2 \begin{array}{c} \bullet \\ \wedge \\ \wedge \end{array} \quad \begin{array}{c} \bullet \\ \wedge \\ \wedge \end{array} v_2$$

Es claro que la cardinalidad del conjunto de vértices de  $G'$  es  $n - 2$ , y que la matriz de adyacencia  $A_{G'}$  es:

$$A_{G'} = \begin{pmatrix} 0 & B_2 \\ B_2^t & 0 \end{pmatrix},$$

donde  $B_2$  tiene la siguiente forma:

$$B_2 = \begin{matrix} & & k_2 & \cdots \\ v_2 & \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & K \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Así que  $rg B_1 = 1 + rg B_2$ , por lo tanto,

$$\eta(G) = n - 2rg(B_1) = n - 2(1 + rg B_2) = (n - 2) - 2rg B_2 = \eta(G').$$

$$\eta(G) = \eta(G').$$

■

**Ejemplo 3.2 .**

$$\begin{aligned} \eta \left( \text{Diagram 1} \right) &= \eta \left( \text{Diagram 2} \right) && \text{Aplicando la Proposición 3.10} \\ &= \eta \left( \text{Diagram 3} \right) && \text{Aplicando la Proposición 3.7} \\ &= \eta \left( \text{Diagram 4} \right) && \text{Aplicando la Proposición 3.9} \\ &= \eta(\bullet) + \eta(\bullet) &= 1 + 1 = 2 \end{aligned}$$

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Biggs Norman. *Algebraic Graph Theory*. Cambridge University Press. (1974).
- [2] Cvetkovic D.M. y Doob M.-Sachs H. *Spectra of graphs-Theory and application*. Academic Press. (1979).
- [3] Harary Frank *Graph Theory*. Addison-Wesley. (1972).
- [4] Rosen Kenneth H. *Matemática Discretas y sus aplicaciones*. McGraw Hill. (2004).
- [5] D. Meyer Carl. *Matrix Analysis and Applied*. Society for Industrial and Applied Mathematics. (2000).
- [6] Rada Juan *Introducción al Álgebra Lineal*. (2005).