Teoria Espectral de Grafos
Caracterização de árvores através do maior autovalor do Laplaciano

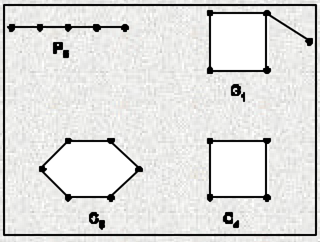
Autores:

Fernanda Lúcia Sá Ferreira
Universidade Federal Fluminense
E-mail: fluciamat@yahoo.com.br

Jaime Velasco C. da Silva
Universidade Federal Fluminense
E-mail:jaimevelasco@globo.com

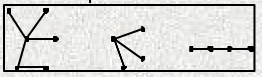
Renata R. Del-Vecchio
Universidade Federal Fluminense
Professora Orientadora
renata@vm.uff.br

Um *grafo* é uma estrutura G=(V,E), onde V é um conjunto não vazio e finito cujos elementos são chamados de *vértices* e E é um conjunto de sub-conjuntos dois a dois de V, onde cada subconjunto é chamado de *aresta.*

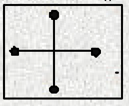


Um *caminho* de v_1 a v_k é uma sequência finita v_1, $v_2,\ldots,v_k$ de vértices distintos de um grafo G quando $\{v_i, v_{i+1}\}$ pertence *a* E para i=1,...,k-1.

Um grafo G é *conexo* quando para cada par de vértices existe um caminho que os liga. Se G é conexo e sem ciclos dizemos que G é uma *árvore.*



Uma árvore com n vértices tal que n-1 vértices são de grau 1 e um é de grau n-1 é dita uma *estrela* e denotada por S_n.



Seja G um grafo com n vértices. A matriz cujas entradas são 0 se v_i e v_j não são adjacentes e 1 se v_i e v_j são adjacentes é chamada de matriz de adjacência de G e denotada A(G). O laplaciano de G é a matriz A(G) – D(G), onde D(G) é a matriz diagonal onde cada entrada é o grau do vértice correspondente.

Resultados Principais

TEOREMA: A estrela é a árvore que possui o maior maior autovalor do Laplaciano.

TEOREMA: O caminho é a árvore com o menor maior autovalor do Laplaciano.

Aplicações na Química

A Teoria Espectral de Grafos tem muita aplicabilidade em Química, por exemplo, conhecendo o maior autovalor do Laplaciano, podemos detectar a presença de carbonos quaternários.