

V. GRÁFICAS Y MATRICES DE ADYACENCIA

EN ESTE capítulo estudiaremos con detenimiento una aplicación importante de la teoría de matrices no negativas.

Dada una gráfica Δ asociaremos con ella una matriz no negativa simétrica A_Δ llamada la *matriz de adyacencia* de Δ . A esta matriz A_Δ podemos aplicarle la teoría desarrollada en los capítulos III y IV; en particular consideraremos los valores propios de A_Δ (que son números reales). Queda de esta manera establecida una relación entre las propiedades combinatorias de la gráfica Δ y las propiedades algebraicas de la matriz A_Δ . Consideraremos esta relación en las dos direcciones, esto es:

- a) ciertas propiedades "gráficas" o combinatorias de la gráfica Δ se reflejan como propiedades de los valores propios de A_Δ ;
- b) ciertas propiedades algebraicas o numéricas de los valores propios de A_Δ se reflejan como propiedades de la gráfica Δ .

Algunas de las ideas que veremos tienen aplicaciones interesantes en otras áreas de las matemáticas: en la sección 2 obtendremos una clasificación de gráficas dependiendo de las propiedades de ciertas formas cuadráticas asociadas a ellas. Esta clasificación tiene un papel importante en el estudio de las álgebras de Lie y en la teoría de representaciones de álgebras. Algunas de las consideraciones realizadas en la sección 3 están asociadas con la determinación del llamado índice de Jones en la teoría de torres de álgebras. Veremos también algunas aplicaciones de esta *teoría espectral de gráficas* a otras disciplinas (física y química).

1. EL POLINOMIO CARACTERÍSTICO DE UNA GRÁFICA

1.1. Una gráfica Δ está formada por una colección finita de vértices, que denotaremos por Δ_0 , y por un conjunto finito de aristas Δ_1 que conectan entre sí algunos de estos vértices. Podemos suponer que $\Delta_0 = \{1, \dots, n\}$.

Definimos la *matriz de adyacencia* $A_\Delta = (a_{ij})$ de tamaño $n \times n$ de la manera siguiente:

$$a_{ij} = \begin{cases} \text{número de aristas entre } i \text{ y } j, & \text{si } i \neq j; \\ 2 \text{ veces el número de lazos en } i, & \text{si } i = j. \end{cases}$$

Observemos que la matriz A_Δ es una matriz simétrica no negativa. El polinomio característico $p_\Delta(t) = \det(tI_n - A_\Delta)$ se conocerá como el *polinomio característico de la gráfica* Δ . Por (III.2.7), las raíces de este polinomio, esto es, los valores propios de A_Δ , son números reales que podemos ordenar como

$$\lambda_1^\Delta \leq \lambda_2^\Delta \leq \dots \leq \lambda_n^\Delta.$$

(En caso de que la gráfica Δ esté claramente especificada escribiremos solamente λ_i en lugar de λ_i^Δ .)

Ejemplos

a) Consideremos la gráfica lineal con n vértices

$$1 \text{ --- } 2 \text{ --- } \dots \text{ --- } n-1 \text{ --- } n$$

que llamaremos una gráfica de tipo A_n .

La matriz de adyacencia A_n de esta gráfica es

$$A_n = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Si $p_n(t)$ es el polinomio característico de esta matriz, desarrollando por menores obtenemos inmediatamente

$$p_n(t) = tp_{n-1}(t) - p_{n-2}(t),$$

que es un caso especial de una fórmula que probaremos más adelante. Deseamos calcular las raíces de $p_n(t)$.

Consideremos la función

$$U_n(x) = \frac{\text{sen} [(n+1)\text{arc cos } x]}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Ejercicio: Demuestre que $U_n(x)$ tiene la expresión polinomial

$$U_n(x) = \sum_{i=0}^{[n/2]} (-1)^i \binom{n-i}{i} x^{n-2i}$$

que se llama el *polinomio de Chebyshev de la segunda clase*. Obtenemos inmediatamente que

$$p_1(t) = t = U_1\left(\frac{t}{2}\right), \quad p_2(t) = t^2 - 1 = U_2\left(\frac{t}{2}\right),$$

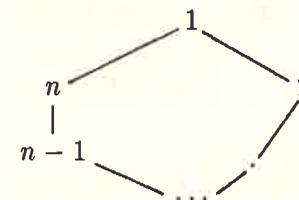
y en general, por inducción

$$p_n(t) = tp_{n-1}(t) - p_{n-2}(t) = tU_{n-1}\left(\frac{t}{2}\right) - U_{n-2}\left(\frac{t}{2}\right) = U_n\left(\frac{t}{2}\right).$$

Entonces el espectro de $p_n(t)$ consta de los números

$$2 \cos\left(\frac{2\pi}{n+1}i\right), \quad i = 1, \dots, n.$$

b) Consideremos ahora el circuito con n vértices



que llamaremos una gráfica de tipo \tilde{A}_n .

La matriz de adyacencia de esta gráfica es

$$\tilde{A}_n = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & 1 & 0 \\ 0 & 0 & & & & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \dots & \dots & & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

excepto en el caso de que $n \leq 2$, en que

$$\tilde{A}_1 = (2) \quad \text{y} \quad \tilde{A}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

El polinomio característico $\tilde{p}_n(t)$ satisface

$$\tilde{p}_n(t) = -2 + \sum_{i=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^i \frac{n}{n-i} \binom{n-i}{i} t^{n-2i}.$$

Como es fácil verificar por inducción. Tenemos entonces que

$$\tilde{p}_n(t) = \frac{nt}{n+1} p_{n-1}(t).$$

De aquí que los valores propios de \tilde{A}_n son los números

$$2 \cos \left(\frac{2\pi}{n} i \right), \quad i = 1, \dots, n.$$

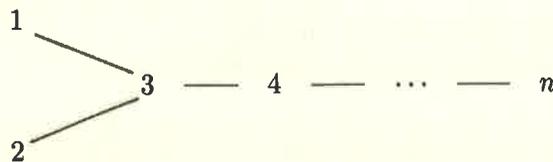
Ejercicios

1. Definimos el *polinomio de Chebyshev del primer tipo* como

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

Entonces $\tilde{p}_n(t) = 2 [T_n(\frac{t}{2}) - 1]$.

2. El espectro de la gráfica de tipo D_n ($n \geq 3$)



está dado por los números

$$0 \text{ y } 2 \cos \left(\frac{2i+1}{2n-2} \pi \right), \quad i = 0, \dots, n-2.$$

3. El espectro de la gráfica de tipo \tilde{D}_n ($n \geq 4$)



es la unión (atención con las multiplicidades) de los espectros de las gráficas de tipo \tilde{A}_4 y A_{n-4} .

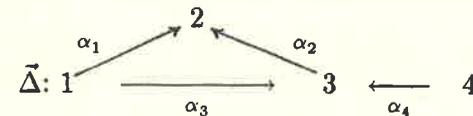
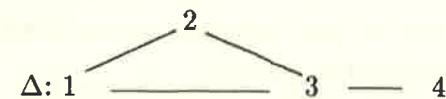
1.2. Sea Δ una gráfica y $A_\Delta = (a_{ij})$ su matriz de adyacencia. Las potencias $A_\Delta^k = (a_{ij}^{(k)})$ tienen también información relevante asociada a la gráfica Δ .

En efecto, fijemos una orientación $\tilde{\Delta}$ para la gráfica Δ . Para cada arista $i \xrightarrow{\alpha} j$ en Δ con orientación $i \xrightarrow{\alpha} j$ en $\tilde{\Delta}$, llamamos $i \xleftarrow{\alpha^{-1}} j$ a la flecha de orientación contraria (también en caso que $i = j$ tenemos α y α^{-1}). Un *camino* en Δ de i a j es una sucesión

$$(i | \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m | j),$$

de forma que β_i es α o α^{-1} para alguna flecha α en $\tilde{\Delta}$ y el final de β_i es el principio de β_{i+1} , con i el principio de β_1 y j el final de β_m . Este camino tiene *longitud* m .

Ejemplo: Sea Δ la gráfica



Fijamos una orientación $\vec{\Delta}$ para Δ . Algunos caminos de 1 a 4 de longitud 6 son:

$$\alpha_1 \alpha_2^{-1} \alpha_3^{-1} \alpha_1 \alpha_2^{-1} \alpha_4^{-1},$$

$$\alpha_1 \alpha_1^{-1} \alpha_3 \alpha_4^{-1} \alpha_4 \alpha_4^{-1},$$

$$\alpha_3 \alpha_4^{-1} \alpha_4 \alpha_3^{-1} \alpha_1 \alpha_2^{-1} \alpha_4^{-1}.$$

Lema. Sea $A = A_\Delta$ la matriz de adyacencia de Δ y $A^k = (a_{ij}^{(k)})$ las potencias de A . Entonces $a_{ij}^{(k)}$ es el número de caminos de longitud k de i a j en Δ .

Demostración: Para $k = 1$ esto es trivial. Supongamos que el resultado es cierto para k . Entonces

$$a_{ij}^{(k+1)} = \sum_{\ell=1}^n a_{i\ell}^{(k)} a_{\ell j}.$$

Claramente, cada camino de i a j de longitud $k + 1$ se escribe

$$(i | \beta_1, \dots, \beta_k, \beta_{k+1} | j),$$

donde β_{k+1} es de la forma α o α^{-1} para una arista $\ell - j$. Fijada ℓ , estos caminos se pueden construir de $a_{i\ell}^{(k)} a_{\ell j}$ maneras diferentes. Luego, $a_{ij}^{(k+1)}$ es el número de caminos de longitud $k + 1$ de i a j en Δ . \square

1.3. El *radio espectral* de una gráfica Δ es por definición el radio espectral de su matriz de adyacencia:

$$\rho(\Delta) := \rho(A_\Delta).$$

Por el Teorema de Perron-Frobenius $\rho(\Delta)$ es un valor propio de Δ .

Observemos que A_Δ es irreducible si y solamente si Δ es una gráfica conexa. Entonces para una gráfica conexa Δ , $\rho(\Delta)$ es un valor propio simple del polinomio característico $p_\Delta(t)$.

Proposición. Sea Δ una gráfica conexa, $i, j \in \Delta_0$. Entonces

$$\rho(\Delta) = \limsup \sqrt[k]{a_{ij}^{(k)}}.$$

Demostración: Sea n el número de vértices de Δ . Sean

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n = \rho(\Delta)$$

los valores propios de A_Δ .

Como A_Δ es simétrica, podemos encontrar una base ortonormal v_1, \dots, v_n con v_i vector propio de A con valor propio λ_i (III.2.5). Entonces

$$A_\Delta = V D V^t, \text{ donde } V = (v_1, \dots, v_n) = (v_{ij}) \text{ y } D = (\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

Obtenemos así,

$$a_{ij}^{(k)} = \sum_{s=1}^n v_{is} v_{js} \lambda_s^k, \text{ para toda } i, j.$$

Como hemos visto en (IV.3.2 (3)), existe una constante $c > 0$ tal que $a_{ij}^{(k)} \leq c \lambda_n^k$. Luego, como el vector v_n tiene entradas positivas,

$$0 < v_{nn}^2 \leq a_{nn}^{(k)} / \lambda_n^k \leq c, \text{ para } k \text{ par.}$$

Entonces, $\limsup \sqrt[k]{a_{nn}^{(k)}} = \lambda_n = \rho(\Delta)$.

Para $1 \leq i \leq n$, usando la conexidad de Δ , obtenemos una $s \geq 1$ tal que $a_{in}^{(s)} > 0$. Entonces

$$a_{in}^{(s)} a_{nn}^{(k-s)} \leq a_{in}^{(k)} \text{ para } k \geq s.$$

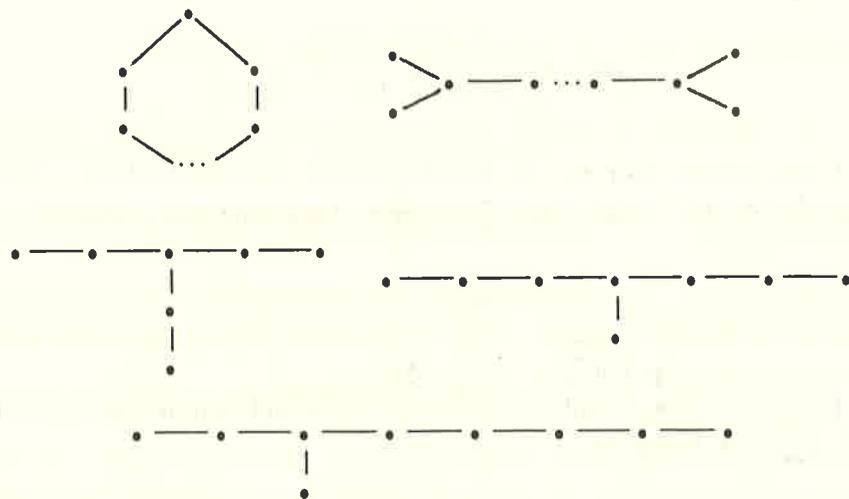
Así, $\limsup \sqrt[k]{a_{in}^{(k)}} \geq \rho(\Delta)$. La otra desigualdad es clara, de donde $\limsup \sqrt[k]{a_{in}^{(k)}} = \rho(\Delta)$. Una vez más, por la conexidad de Δ , se puede obtener el resultado general. \square

Corolario. Sea Δ' una subgráfica de Δ . Entonces $\rho(\Delta') \leq \rho(\Delta)$. \square

Tendremos oportunidad de ver que el radio espectral $\rho(\Delta)$ de una gráfica es un importante invariante de Δ . En cierta forma contiene una gran cantidad de información sobre la estructura combinatoria de Δ .

Ejercicios

1. Complete los detalles de la prueba de la proposición anterior.
2. Sea Δ una gráfica de tipo A_n o de tipo D_n , entonces $\rho(\Delta) < 2$.
3. De entre todas las gráficas conexas con n puntos, la gráfica con menor radio espectral es la gráfica lineal A_n que tiene radio espectral $2 \cos \left(\frac{\pi}{n+1} \right)$.
4. Sea Δ una gráfica de tipo \tilde{A}_n o de tipo \tilde{D}_n , entonces $\rho(\Delta) = 2$.
5. Sea Δ una gráfica con radio espectral ρ . Entonces $\rho \leq 2$ (respectivamente $\rho < 2$) si y solamente si cada componente conexas de Δ es una subgráfica (respectivamente una subgráfica propia) de una de las gráficas de la siguiente colección

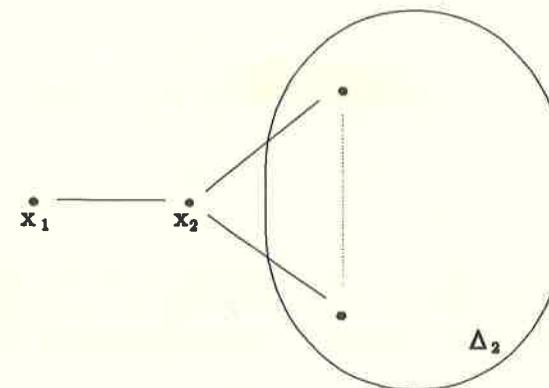


Estas gráficas tienen radio espectral igual a 2 y desempeñan un papel relevante en diferentes áreas de las matemáticas. Se les conoce de varias maneras: *diagramas de Dynkin extendidos*, *diagramas euclidianos* o *gráficas parabólicas*, entre otros.

1.4. Hay varios procedimientos de reducción para calcular el polinomio característico de una gráfica una vez que se conoce el de algunas

subgráficas. Veremos aquí algunos de estos métodos y los aplicaremos en ejemplos importantes.

a) Sea x_1 un vértice de la gráfica Δ con grado 1 y sea x_2 el vecino de x_1 en Δ . Sea Δ_1 la gráfica obtenida Δ quitando el vértice x_1 y Δ_2 la gráfica obtenida quitando tanto x_1 como x_2 (ver el siguiente diagrama).



Proposición. Con la notación anterior tenemos

$$p_{\Delta}(t) = t p_{\Delta_1}(t) - p_{\Delta_2}(t).$$

Demostración: Sea $\Delta_0 = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\}$, entonces la matriz de adyacencia es

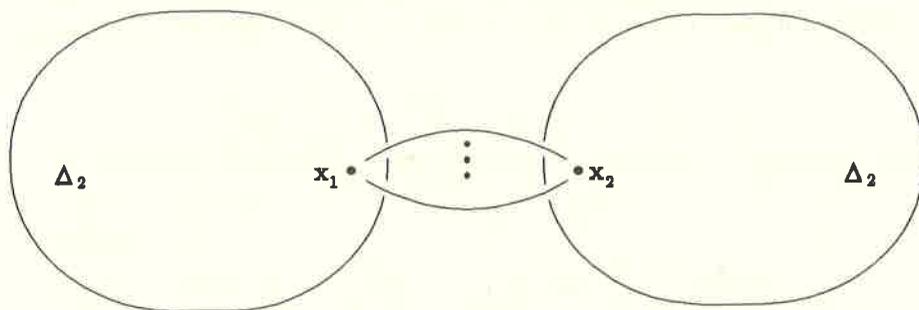
$$A_{\Delta} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & a_{23} & & & \\ \vdots & \vdots & & A_{\Delta_2} & \\ 0 & a_{2n} & & & \end{bmatrix}.$$

Al desarrollar por menores obtenemos

$$p_{\Delta}(t) = \det(t I_n - A_{\Delta}) = t p_{\Delta_1}(t) - p_{\Delta_2}(t). \quad \square$$

Un caso particular de esta fórmula lo encontramos en el ejemplo (1.1.a). Por medio de esta fórmula se puede calcular inductivamente el polinomio característico de cualquier gráfica árbol (o sea, una gráfica sin ciclos).

b) Podemos generalizar el resultado de (a) de la manera siguiente. Sea Δ una gráfica obtenida al unir el vértice x_1 de la gráfica Δ_1 con el vértice x_2 de la gráfica Δ_2 por medio de s aristas, como en el dibujo



Sea Δ'_1 (respectivamente Δ'_2) la subgráfica de Δ_1 (respectivamente Δ_2) obtenida al quitar el vértice x_1 (respectivamente x_2).

Proposición. En la situación descrita se tiene

$$p_\Delta(t) = p_{\Delta_1}(t)p_{\Delta_2}(t) - s^2 p_{\Delta'_1}(t)p_{\Delta'_2}(t).$$

Demostración: Sea n_1 (respectivamente n_2) el número de vértices de la gráfica Δ_1 (respectivamente Δ_2) y $n = n_1 + n_2$. La matriz $tI_n - A_\Delta$ puede escribirse como

$$tI_n - A_\Delta = \begin{bmatrix} & & & 0 & \dots & 0 & -s \\ & & & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \vdots & & & \vdots \\ & & & 0 & \dots & 0 & 0 \\ tI_{n_1} - A_{\Delta_1} & & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & & & \\ \vdots & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \\ -s & 0 & \dots & 0 & & & \\ & & & & & & tI_{n_2} - A_{\Delta_2} \end{bmatrix}.$$

Al desarrollar $\det(tI_n - A_\Delta)$ por menores respecto al primer renglón, obtenemos

$$p_\Delta(t) = p_{\Delta_1}(t)p_{\Delta_2}(t) - (-1)^n s \det B,$$

donde B se obtiene al suprimir el primer renglón y la última columna

de la matriz anterior. Desarrollando según la primera columna de B , tenemos

$$\det B = -(-1)^{n-1} s p_{\Delta'_1}(t)p_{\Delta'_2}(t). \quad \square$$

c) Sea Δ una gráfica sin lazos y con vértices $\Delta_0 = \{1, \dots, n\}$. Para cada i , definimos Δ_i como la subgráfica de Δ obtenida al suprimir el vértice i de Δ .

Proposición. El polinomio derivado $p'_\Delta(t)$ es igual a

$$p'_\Delta(t) = \sum_{i=1}^n p_{\Delta_i}(t).$$

Demostración: Usamos la expansión de $(b_{ij}) = B = tI_n - A_\Delta$ como sigue

$$p_\Delta(t) = \det B = \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^{\text{sgn } \sigma} b_{1\sigma(1)} \dots b_{n\sigma(n)},$$

donde S_n es el grupo de permutaciones de $\{1, \dots, n\}$. Con base en que $b_{ii} = t$, $i = 1, \dots, n$, tenemos

$$p'_\Delta(t) = \sum_{\substack{\sigma \in S_n \\ f(\sigma) \geq 1}} (-1)^{\text{sgn } \sigma} f(\sigma) t^{f(\sigma)-1} \prod_{\sigma(i) \neq i} b_{i\sigma(i)},$$

donde $f(\sigma)$ es el número de puntos fijos de σ , o sea, la cardinalidad del conjunto $\{i: \sigma(i) = i\}$. Si $\sigma \in S_n$ y $\sigma(i) = i$, podemos definir σ_i como una permutación de los vértices de Δ_i simplemente restringiendo la acción de σ . Así,

$$\begin{aligned} p'_\Delta(t) &= \sum_{\substack{\sigma \in S_n \\ f(\sigma) \geq 1}} \sum_{\sigma(i)=i} (-1)^{\text{sgn } \sigma_i} \prod_{j \neq i} b_{j\sigma_i(j)} = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{\substack{\sigma \in S_n \\ \sigma(i)=i}} (-1)^{\text{sgn } \sigma_i} \prod_{j \neq i} b_{j\sigma_i(j)} \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \det(tI_{n-1} - A_{\Delta_i}) = \sum_{i=1}^n p_{\Delta_i}(t). \quad \square \end{aligned}$$

Ejemplo: Si consideramos el ciclo \bar{A}_n con n vértices, todas las gráficas obtenidas al suprimir un vértice resultan de tipo A_{n-1} . Luego, $p'_{\bar{A}_n}(t) = n p_{A_{n-1}}(t)$.

d) Dadas dos gráficas Δ y Δ' sin lazos ni aristas múltiples, con n y n' vértices respectivamente, definiremos la *gráfica suma* $\Delta + \Delta'$ de la siguiente manera:

Los vértices de $\Delta + \Delta'$ son el conjunto $\Delta_0 \times \Delta'_0$; existe una arista entre (x_1, y_1) y (x_2, y_2) si y solamente si $x_1 = x_2$ y hay una arista en Δ_2 entre y_1 y y_2 , o bien, si $y_1 = y_2$ y hay una arista en Δ_1 entre x_1 y x_2 .

Proposición. Sean Δ y Δ' dos gráficas como antes, entonces los valores propios de la matriz de adyacencia de $\Delta + \Delta'$ son de la forma $\lambda + \mu$ para valores $\lambda \in \text{Spec}(A_\Delta)$, $\mu \in \text{Spec}(A_{\Delta'})$.

Demostración: Dadas dos matrices $A = (a_{ij})$ de tamaño $m \times n$ y $B = (b_{ij})$ de tamaño $p \times q$, el *producto de Kronecker* $A \otimes B$ es la matriz de tamaño $mp \times nq$ que se obtiene de A al sustituir la entrada a_{ij} por el bloque $a_{ij}B$. Entonces las entradas de $A \otimes B$ consisten en todos los $mnpq$ productos posibles de entradas de A por entradas de B . Si los productos de matrices AC y BD están bien definidos, es fácil verificar que

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD).$$

Dadas las gráficas Δ y Δ' sin lazos ni aristas múltiples, tenemos

$$A_{\Delta+\Delta'} = (A_\Delta \otimes I_{n'}) + (I_n \otimes A_{\Delta'}).$$

Sea v_1, \dots, v_n una base ortonormal de \mathbf{R}^n tal que $A_\Delta v_i = \lambda_i v_i$, de forma que $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ son los valores propios de A_Δ . Similarmente, sea $w_1, \dots, w_{n'}$ una base ortonormal de $\mathbf{R}^{n'}$ tal que $A_{\Delta'} w_i = \mu_i w_i$. Consideremos el conjunto de vectores $v_i \otimes w_j \in \mathbf{R}^{nn'}$ que satisface:

$$\begin{aligned} A_{\Delta+\Delta'}(v_i \otimes w_j) &= (A_\Delta \otimes I_{n'})v_i \otimes w_j + (I_n \otimes A_{\Delta'})v_i \otimes w_j \\ &= A_\Delta v_i \otimes w_j + v_i \otimes A_{\Delta'} w_j = (\lambda_i + \mu_j)v_i \otimes w_j. \end{aligned}$$

Además es sencillo ver que los vectores $v_i \otimes w_j$ forman una base de $\mathbf{R}^{nn'}$. □

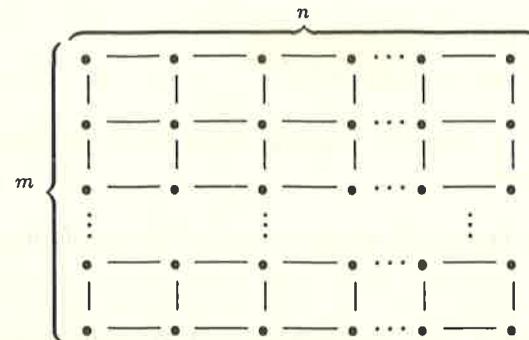
Ejercicios

1. Verifique la fórmula $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$.

2. Muestre la expresión usada para la matriz de adyacencia de $\Delta + \Delta'$ en la demostración anterior.

3. Si $\{v_1, \dots, v_n\}$ (respectivamente $\{w_1, \dots, w_m\}$) es una base de \mathbf{R}^n (respectivamente de \mathbf{R}^m), entonces $\{v_i \otimes w_j; i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m\}$ es una base de \mathbf{R}^{nm} . ¿Cuándo es ésta una base ortonormal de \mathbf{R}^{nm} ?

4. Considere la gráfica con nm vértices



Escriba esta gráfica como suma de otras más simples y calcule los valores propios de su matriz de adyacencia.

2. UNA CLASIFICACIÓN DE GRÁFICAS

En esta sección obtendremos una clasificación de gráficas en tres grupos de acuerdo con las propiedades de ciertas formas cuadráticas. Esta clasificación tiene una relevancia especial en varias ramas de las matemáticas. Aquí la obtendremos para ilustrar el uso de diversos conceptos que hemos encontrado a lo largo del libro.

2.1. Sea Δ una gráfica conexa, finita y sin lazos, con conjunto de vértices $\Delta_0 = \{1, \dots, n\}$. Definimos una matriz B_Δ de la siguiente manera: $B_\Delta = (b_{ij})$ de tamaño $n \times n$, de forma que $b_{ii} = 2$ y $-b_{ij}$ es el número de aristas que unen i a j para $i \neq j$. Observamos entonces que $B_\Delta = 2I_n - A_\Delta$, donde A_Δ es la matriz de adyacencia asociada a Δ . Consideremos $V = \mathbf{R}^n$ y el cono positivo V^+ . Entonces $\partial V^+ = \{v \in V^+ : \text{existe alguna } 1 \leq i \leq n, \text{ con } v(i) = 0\}$. Si un vector u en V^+ no está en ∂V^+ , escribiremos $u \gg 0$.

Por el resto de la sección denotamos $B_\Delta = B$, $B(v) = Bv$.

Lema. $B^{-1}(V^+) \cap \partial V^+ = \{0\}$.

Demostración: Supongamos que $0 \neq y \in B^{-1}(V^+) \cap \partial V^+$. Por la conexidad de Δ , hay una arista $i-j$ con $y(i) > 0$ y $y(j) = 0$. Entonces

$$\begin{aligned} 0 \leq B(y)(j) &= \sum_k b_{jk} y(k) \\ &= b_{jj} y(j) + b_{ji} y(i) + \sum_{k \neq i, j} b_{jk} y(k) \leq b_{ji} y(i) < 0, \end{aligned}$$

lo que constituye una contradicción. \square

2.2. Obtenemos una primera clasificación de las gráficas en familias de la siguiente manera:

Proposición. La matriz B satisface una y sólo una de las propiedades siguientes:

- $B^{-1}(V^+) \subset V^+$.
- $B^{-1}(V^+) = \mathbf{R}u$ para un vector $u \gg 0$. En este caso $B(u) = 0$.
- $B^{-1}(V^+) \cap V^+ = \{0\}$.

Demostración: Claramente B satisface una de las condiciones (a), (b'), (c), donde

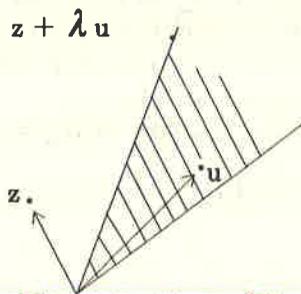
$$(b') B^{-1}(V^+) \not\subset V^+ \text{ y } B^{-1}(V^+) \cap V^+ \neq \{0\}.$$

Además, B no puede satisfacer simultáneamente (a) y (b') o (b') y (c).

Supongamos que B satisface (a) y (c). Entonces $\ker B \subset B^{-1}(V^+) = \{0\}$ y B es isomorfismo. Luego, hay vectores $0 \neq u \in V^+$ con $0 \neq B^{-1}u \in V^+$, por lo que $0 \neq B^{-1}u \in B^{-1}V^+ \cap V^+$, una contradicción.

Así, es suficiente demostrar que B satisface (b) si y sólo si satisface (b').

Supongamos que $B^{-1}(V^+) \not\subset V^+$ y $B^{-1}(V^+) \cap V^+ \neq \{0\}$. Sea $v \in B^{-1}(V^+)$ tal que $v \notin V^+$ y sea $0 \neq u \in B^{-1}(V^+) \cap V^+$. Por (2.1), $u \gg 0$. Probaremos que $B^{-1}(V^+) = \mathbf{R}u$. Sea $z \in B^{-1}(V^+)$. Si $z \notin V^+$, podemos encontrar $\lambda > 0$ de forma que $z + \lambda u \in \partial V^+$.



Entonces $z + \lambda u \in \partial V^+ \cap B^{-1}(V^+) = \{0\}$ y $z \in \mathbf{R}u$ (en particular $-v \in \mathbf{R}^+u$).

Si $0 \neq z \in V^+$, el argumento anterior también implica que $v \in \mathbf{R}z$. Como también $v \in \mathbf{R}u$, entonces $z \in \mathbf{R}u$. En particular $\mathbf{R}u = \mathbf{R}v \subset B^{-1}(V^+)$.

Como $B(u) \geq 0$ y $B(v) \geq 0$ con $-v \in \mathbf{R}^+u$, se sigue que $B(u) = 0$. Esto muestra que (b') implica (b). El converso es claro. \square

2.3. Decimos que la gráfica

Δ es *elíptica* si B satisface la condición (a) en 2.2,

Δ es *parabólica* si B satisface (b) y

Δ es *hiperbólica* si B satisface (c).

Proposición

- Δ es *elíptica* si y sólo si existe $u \gg 0$ con $B(u) \gg 0$;
- Δ es *parabólica* si y sólo si existe $u \gg 0$ con $\ker B = \mathbf{R}u$;
- Δ es *hiperbólica* si y sólo si existe $u \gg 0$ con $B(u) \ll 0$.

Demostración: (i) Supongamos que Δ es elíptica. Entonces

$$\ker B \subset B^{-1}(V^+) \subset V^+,$$

pero como $\ker B$ es un espacio vectorial, $\ker B = \{0\}$. En particular, para cualquier $v \gg 0$, existe $u \in V$ con $B(u) = v$. Entonces $u \in B^{-1}(V^+)$. Por (2.1), $u \gg 0$.

Para el converso, supongamos que $u \gg 0$ satisface $B(u) \gg 0$. Claramente B no satisface ni (b) ni (c). Luego, Δ es elíptico.

(ii) Supongamos que Δ es parabólica. Entonces $\ker B \subset B^{-1}(V^+) = \mathbf{R}u$ y $B(u) = 0$ con $u \gg 0$. Entonces $\ker B = \mathbf{R}u$.

Si $\ker B = \mathbf{R}u$ con $u \gg 0$, claramente B no satisface ni (a) ni (c).

(iii) Supongamos que Δ es hiperbólica, esto es, $B^{-1}(V^+) \cap V^+ = \{0\}$. Consideremos la matriz C de tamaño $2n \times n$

$$C = \begin{bmatrix} I_n \\ B \end{bmatrix}$$

con renglones C_1, \dots, C_{2n} . Sea $K = \sum_{i=1}^{2n} \mathbf{R}^+C_i$ el cono poliédrico generado por los vectores C_1, \dots, C_{2n} . Demostraremos que $K = V$. En efecto, sea $w = (w_1, \dots, w_n) \in K^\perp$, entonces $0 \leq w(C_i) = wC_i^T =$

$w(i)$ ($1 \leq i \leq n$). Además,

$$B(w) = \begin{bmatrix} C_{n+1}w^T \\ \vdots \\ C_{2n}w^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w(C_{n+1}) \\ \vdots \\ w(C_{2n}) \end{bmatrix} \geq 0.$$

Luego, $w \in B^{-1}(V^+) \cap V^+ = \{0\}$ y $w = 0$. Esto es, $K^\perp = \{0\}$. Por (IV.1.5), $K^{\perp\perp} = V$ y $K = V$.

Tomemos cualquier vector $w \ll 0$. Existen números $\lambda_1, \dots, \lambda_{2n} \geq 0$ con $w = \sum_{i=1}^{2n} \lambda_i C_i$. Sea $y = (\lambda_{n+1}, \dots, \lambda_{2n})$. Entonces $w = (\lambda_1, \dots, \lambda_n) + B(y)$, y por tanto $B(y) \ll 0$. Por continuidad, existe $u \gg 0$ con $B(u) \ll 0$. El converso es claro, como en los puntos (i) y (ii). \square

2.4. Sea B como antes y $1 \leq i \leq n$. Por $B^{(i)}$ denotamos la *submatriz principal* de B obtenida de B al eliminar el renglón y la columna i -ésimos. Claramente $B^{(i)} = B_{\Delta^{(i)}}$, donde $\Delta^{(i)}$ es la gráfica obtenida de Δ al eliminar el vértice i y todas las aristas conectadas con este vértice.

En general, si Δ' es una subgráfica plena de Δ , entonces $B_{\Delta'}$ se llama una *submatriz principal* de B .

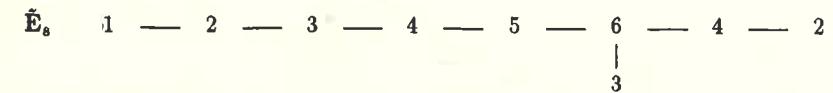
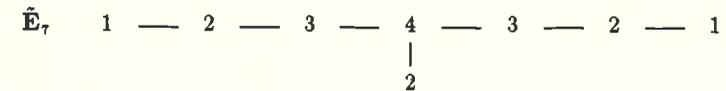
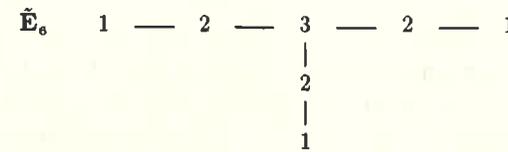
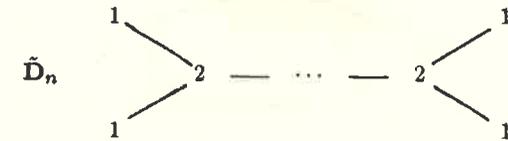
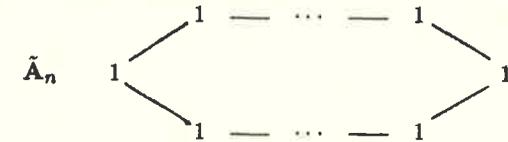
Corolario. Si Δ es elíptica o parabólica, toda subgráfica propia inducida de Δ es elíptica.

Demostración: Si Δ es elíptica, hemos visto que B es invertible y por tanto $B' = B_{\Delta'}$ no satisface (b) para ninguna subgráfica inducida Δ' de Δ . Tampoco (c), puesto que si $B'(u) \ll 0$ con $u \gg 0$, completando $v = (v_1, \dots, v_n)$ con $v_i = u(i)$ si $i \in \Delta'_0$, $v_i = 0$; si no, tenemos $B(v)(i) = B'(u)(i) < 0$ si $i \in \Delta'_0$. Entonces $B(v) \in B^{-1}(V^+) \setminus V^+$, lo que contradice que Δ es elíptica.

Sea Δ parabólica y $B(u) = 0$ para $u \gg 0$. Consideremos Δ' una subgráfica propia de Δ y supongamos que Δ' es parabólica con $v \gg 0$ y $B'(v) = 0$. Completamos $w = (w_1, \dots, w_n)$ con $w_i = v(i)$ si $i \in \Delta'_0$ y $w_i = 0$ si no. Entonces $B(w) \in B^{-1}(V^+)$ pero $B(v)(i) = 0$ si $i \in \Delta'_0$; luego $B(v)$ no puede ser múltiplo de $u \gg 0$. Contradicción. Como en el caso elíptico, Δ' tampoco es hiperbólica. Luego Δ' es elíptica. \square

2.5. Teorema. La gráfica Δ es parabólica si y solamente si Δ es uno de los diagramas de Dynkin extendidos. Para cada diagrama indicamos

sobre los vértices las coordenadas del vector más pequeño $0 \ll u$ con coeficientes enteros tal que $B_\Delta(u) = 0$.

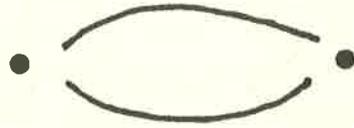


Demostración: Supongamos que Δ es parabólica y sea $0 \ll u$ tal que $B(u) = 0$, donde $B = B_\Delta$. Tenemos entonces un sistema de ecuaciones

$$\sum_{j \neq i} |b_{ij}| \begin{pmatrix} u(j) \\ u(i) \end{pmatrix} = 2 \quad i = 1, \dots, n. \quad (*)$$

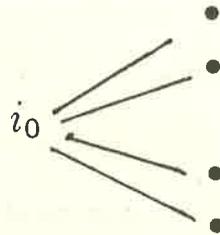
Como los coeficientes b_{ij} son enteros, este sistema tiene soluciones racionales y por lo tanto enteras, y podemos suponer que u es la mínima solución con coeficientes enteros positivos. Como para cada par (i, j) en $b_{ij} \neq 0$, tenemos $\frac{1}{2} \leq \frac{u(j)}{u(i)} \leq 2$; por tanto cuando mucho hay 4 aristas conectadas con cada vértice.

Consideremos primero el caso en que $|b_{i_0 j_0}| \geq 2$ para algún par $i_0 \neq j_0$. Entonces $|b_{i_0 j_0}| = 2$, $u(i_0) = u(j_0)$ y no hay ninguna $j \notin \{i_0, j_0\}$ con $b_{i_0 j} \neq 0$ o $b_{j_0 j} \neq 0$. Como Δ es conexo, entonces Δ es de tipo \tilde{A}_2



Podemos suponer entonces que $|b_{ij}| \leq 1$ para todo $i \neq j$.

Supongamos que i_0 es un vértice con 4 vecinos $\{j_1, j_2, j_3, j_4\}$ en Δ . Entonces $u(i_0) = 2u(j_s)$ para $s = 1, \dots, 4$ y no hay otra $j \notin \{i_0, j_s : s = 1, \dots, 4\}$ con $b_{i_0 j} \neq 0$ o $b_{j_s j} \neq 0$ para alguna $s = 1, \dots, 4$. Luego Δ es de tipo \tilde{D}_4 :



Supongamos que i_0 tiene exactamente 3 vecinos $\{j_1, j_2, j_3\}$ en Δ . Entonces

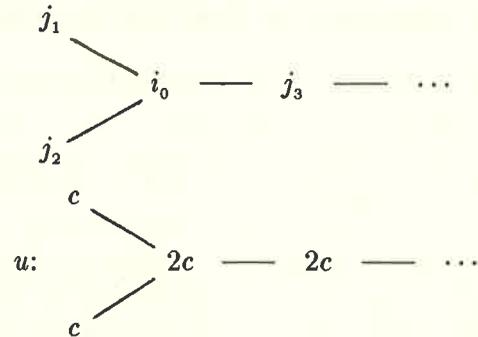
$$\frac{1}{2} \leq u(j_s)/u(i_0) \leq 1 \quad \text{para } s = 1, 2, 3.$$

Es más, si $1/2 < u(j_s)/u(i_0) < 2/3$, entonces la j_s -ésima ecuación del sistema (*) no puede resolverse, lo que es una contradicción. Esto a su vez implica que las desigualdades $2/3 < u(j_s)/u(i_0) < 3/4$ tampoco son posibles (en efecto, supongamos que i_0, i_1, \dots, i_m son los vecinos de

j_s ; se tiene $\sum_{t=0}^m \frac{u(i_t)}{u(j_s)} = 2$. Como $\frac{4}{3} < \frac{u(i_0)}{u(j_s)}$, entonces $m = 1$. Luego $\frac{1}{2} < \frac{u(j_s)}{u(i_1)} < 2/3$, que contradice lo que ya habíamos demostrado). De aquí que tengamos $\frac{1}{2}u(i_0) \leq u(j_s)$ y $(u(i_0) = 2u(j_s)$ o bien $2u(i_0) = 3u(j_s)$ o bien $3u(i_0) \leq 4u(j_s))$ para cada $s = 1, 2, 3$. Las únicas soluciones de la ecuación (*) son entonces:

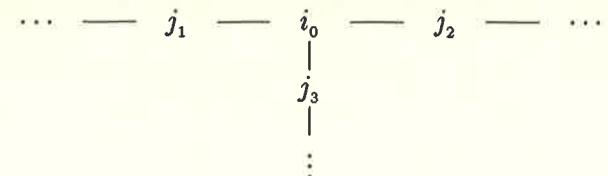
$$\begin{aligned} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 &= 2; & \frac{1}{2} + \frac{2}{3} + \frac{5}{6} &= 2; \\ \frac{1}{2} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} &= 2 & \text{y} & \frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac{2}{3} &= 2. \end{aligned}$$

Consideremos el primer caso, $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 = 2$. Obtenemos



para un escalar c . La gráfica continúa mientras no tengamos otro vértice con 3 vecinos. Es fácil ver que en este caso obtenemos una gráfica de tipo \tilde{D}_n .

Para el caso, $\frac{2}{3} + \frac{2}{3} + \frac{2}{3} = 2$, tenemos



$$u: \dots \text{---} 2c \text{---} 3c \text{---} 2c \text{---} \dots$$

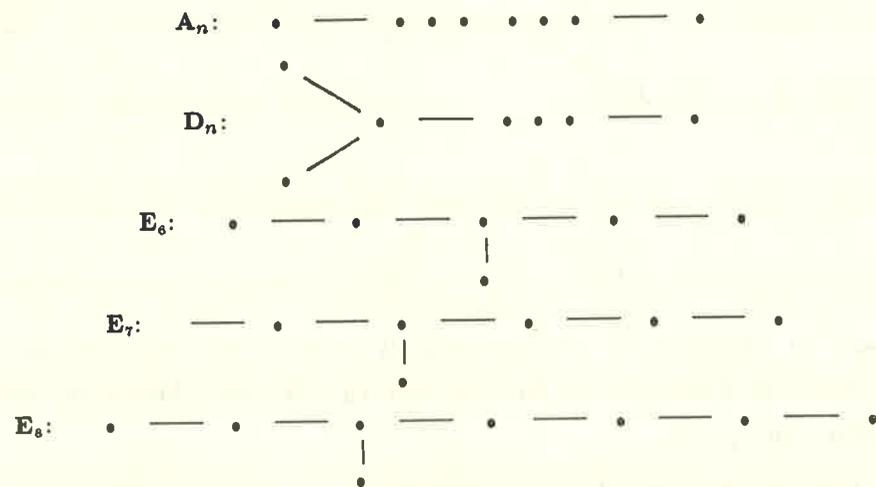
$$\begin{array}{c} | \\ 2c \\ | \\ \vdots \end{array}$$

La única solución posible es cerrar la gráfica para obtener \tilde{E}_6 . Similarmente, $\frac{1}{2} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} = 2$ da lugar a \tilde{E}_7 , y $\frac{1}{2} + \frac{2}{3} + \frac{5}{6} = 2$ da lugar a \tilde{E}_8 .

Por último, en el caso de que cada vértice tiene cuando más 2 vecinos, tenemos que $u(i) = u(j)$ para cada par i, j . Luego debemos obtener \tilde{A}_n .

El converso es claro ya que los vectores $u \gg 0$ contruidos satisfacen $B_\Delta(u) = 0$. \square

Corolario. Sea Δ una gráfica elíptica. Entonces Δ es una de las siguientes gráficas (conocidas como diagramas de Dynkin).



Demostración: Por (2.4), Δ no contiene ninguna subgráfica parabólica (= diagrama de tipo Dynkin extendido). Los diagramas de Dynkin son aquellas gráficas que no contienen ninguna subgráfica parabólica. \square

Ejercicios

1. Indique cuál es la relación entre la clasificación de los diagramas Dynkin extendidos obtenida en esta sección y la obtenida en el Ejercicio 1.3 (4).

2. Sea Δ una gráfica sin lazos y con n vértices. Definamos la forma cuadrática $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}^n$ dada por $q(x) = xB_\Delta x^T$. Demuestre lo siguiente:

- a) Δ es una gráfica Dynkin si y solamente si q es positiva definida.
- b) Δ es de tipo Dynkin extendido si y solamente si la forma q es no negativa.

3. Obtenga las expresiones explícitas de las formas cuadráticas construidas en el ejercicio anterior y muestre que tienen las propiedades indicadas.

3. RELACIONES ENTRE EL ESPECTRO Y LA ESTRUCTURA DE UNA GRÁFICA

Hay muchas propiedades de la estructura de una gráfica Δ que pueden "leerse" a partir de las propiedades del espectro de la matriz de adyacencia A_Δ . Si bien algunas de estas propiedades no están determinadas por el espectro, frecuentemente se puede determinar un rango de variación que deben satisfacer las propiedades.

En los resultados de esta sección supondremos que el espectro de la matriz de adyacencia está dado (o bien que puede determinarse). Nuestro propósito es estudiar lo que esta información nos dice sobre las propiedades estructurales de la gráfica.

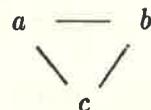
3.1. Comenzaremos por ver algunos ejemplos sencillos. Sean Δ una gráfica y $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ el espectro de la matriz de adyacencia $A_\Delta = (a_{ij})$.

- a) La traza $\text{tr } A_\Delta$ es dos veces el número de lazos en Δ . De manera que Δ no tiene lazos si y solamente si $\text{tr } A_\Delta = 0$.
- b) Supongamos que Δ no tiene lazos. Entonces

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = \text{tr } A_\Delta^2 = \sum_{i=1}^n a_{ii}^{(2)} = 2m,$$

donde m es el número total de aristas en Δ .

c) Una subgráfica Δ' de Δ con vértices $\{a, b, c\}$ se llama un *triángulo* de Δ si Δ' es de la forma



El número de triángulos t en Δ es:

$$t = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^n a_{ii}^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^n \lambda_i^3.$$

Proposición. Si $\rho(\Delta) > \sqrt{m}$, entonces Δ contiene al menos un triángulo.

Demostración: Los valores propios de A_Δ son $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n = \rho(\Delta)$. Se tiene:

$$\lambda_n^2 = \rho(\Delta)^2 > m = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \lambda_i^2 = \frac{1}{2} (\lambda_1^2 + \dots + \lambda_n^2),$$

$$\lambda_n^2 > \lambda_1^2 + \dots + \lambda_{n-1}^2$$

$$\lambda_n^3 > \lambda_1^2 \lambda_n + \dots + \lambda_{n-1}^2 \lambda_n \geq \lambda_1^3 + \dots + \lambda_{n-1}^3.$$

Si t es el número de triángulos en Δ , tenemos

$$6t = \sum_{i=1}^n \lambda_i^3 \geq \lambda_n^3 - \sum_{i=1}^{n-1} |\lambda_i|^3 > 0.$$

Luego, $t > 0$. □

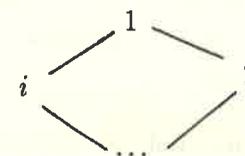
Corolario. Si Δ es un árbol con n vértices, entonces

$$\rho(\Delta) \leq \sqrt{n-1}.$$

Demostración: Para un árbol se tiene $m \leq n-1$. □

3.2. El resultado de "conteo" de triángulos en una gráfica Δ se puede extender como veremos a continuación.

Una subgráfica C de Δ se llama un *i-ciclo* en Δ si C es de la forma



Denotemos por $c_i(\Delta)$ el número de i -polígonos en Δ .

Proposición. Sea Δ una gráfica sin lazos ni flechas múltiples. Las siguientes afirmaciones son equivalentes:

a) Δ es bipartita, esto es, existe una función $b: \Delta_0 \rightarrow \{0, 1\}$ de modo que si $b(x) = b(y)$ entonces x, y no son adyacentes en Δ (también se dice que Δ es 2-colorable).

b) Para todo i impar, $c_i(\Delta) = 0$.

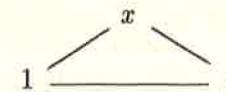
c) El polinomio característico

$$p_\Delta(t) = t^n + a_1 t^{n-1} + a_2 t^{n-2} + \dots + a_n$$

tiene $a_{2s+1} = 0$ para toda s .

d) El espectro $\text{Spec}(A_\Delta)$ es simétrico respecto a 0, esto es, si $\lambda \in \text{Spec}(A_\Delta)$, entonces $-\lambda$ es un valor propio de A_Δ de la misma multiplicidad que λ .

Demostración: (a) \Rightarrow (b): es claro. Supongamos que (b) es satisfecho y probemos (a). Sea $\Delta_0 = \{1, \dots, n\}$ y hagamos $b(1) = 0$. Para todo vértice x adyacente a 1, hagamos $b(x) = 1$. Si y es adyacente a x con $b(x) = 1$, hacemos $b(y) = 0$. Observemos que no hay incompatibilidad en esta definición. En efecto, si la hubiese tendríamos un 3-ciclo



en Δ . Es claro que podemos continuar definiendo $b: \Delta_0 \rightarrow \{0, 1\}$ para demostrar que Δ es bipartita.

(b) \Rightarrow (c): Sea $(b_{ij}) = B = tI_n - A_\Delta$; el coeficiente a_{2s+1} de $p_\Delta(t)$ es

$$\begin{aligned} a_{2s+1} &= \sum_{f(\sigma)=n-2s-1} (-1)^{\text{sgn } \sigma} \prod_{\sigma(i) \neq i} b_{i\sigma(i)} \\ &= - \sum_{f(\sigma)=n-2s-1} (-1)^{\text{sgn } \sigma} \prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)}, \end{aligned}$$

donde $f(\sigma)$ denota la cardinalidad del conjunto de puntos fijos de σ .

Si $a_{2s+1} \neq 0$, entonces para alguna permutación $\sigma \in S_n$ con $f(\sigma) = n - 2s - 1$ se tendría $\prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} \neq 0$. Consideremos la subgráfica Δ'

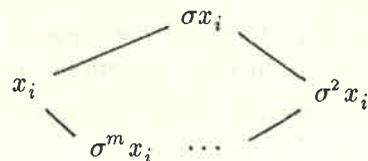
de Δ formada por los vértices i tales que $\sigma(i) \neq i$. Observemos que Δ' tiene un número impar de vértices. Elegimos x_1, \dots, x_t vértices en Δ' representantes de las σ -órbitas, esto es, si

$$x_i^\sigma = \{\sigma^j x_i : j = 0, 1, 2, \dots\},$$

entonces

$$\Delta'_0 = \bigcup_{i=1}^t x_i^\sigma, \quad x_i^\sigma \cap x_j^\sigma = \emptyset, \quad i \neq j.$$

Por tanto, debe haber alguna órbita x_i^σ de cardinalidad impar. La subgráfica correspondiente a esta órbita es



donde m es non, de manera que $c_m \neq 0$.

(c) \Rightarrow (b): Si tuviésemos un m -ciclo Δ' con m non y $\Delta'_0 = \{x_1, \dots, x_m\}$ con $a_{x_1 x_2} \dots a_{x_m x_1} \neq 0$, tomamos m mínima posible con esta propiedad. Definimos $\sigma \in S_n$ con $\sigma(x_i) = x_{i+1}$ ($i = 1, \dots, m - 1$), $\sigma(x_m) = x_1$ y $\sigma(x) = x$ para $x \notin \Delta'_0$. Luego $\text{sgn } \sigma = 1$. Además, si $\varphi \in S_n$ con $f(\varphi) = n - m$ y $\prod_{\varphi(i) \neq i} a_{i\varphi(i)} \neq 0$, entonces $\text{sgn } \varphi = 1$

(proceda como en (b) \Rightarrow (c)). Obtenemos entonces:

$$a_m = \sum_{\varphi \in S_n} \prod_{\varphi(i) \neq i} a_{i\varphi(i)} \geq \prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} > 0.$$

(c) \Rightarrow (d): Si n es par, entonces $p_\Delta(t) = q_1(t^2)$ para un polinomio $q_1(x)$ de grado $n/2$; si n es impar, entonces $p_\Delta(t) = tq_2(t^2)$, donde $q_2(x)$ es un polinomio de grado $(n - 1)/2$.

Sean μ_1, \dots, μ_k las raíces del polinomio $q_i(x)$ ($i = 1$ o 2 dependiendo de si n es par o non). Entonces las raíces de $p_\Delta(t)$ son $\mu_1, \dots, \mu_k, -\mu_1, \dots, -\mu_k$ y además 0 si n es impar.

(d) \Rightarrow (c): Sean $\mu_1, \dots, \mu_k, -\mu_1, \dots, -\mu_k$ las raíces de $p_\Delta(t)$ diferentes de 0 , tomadas con multiplicidad. Además, 0 es raíz de $p_\Delta(t)$ con multiplicidad $n_0 \geq 0$. Entonces

$$p_\Delta(t) = t^{n_0} \prod_{i=1}^k (t - \mu_i)(t + \mu_i) = t^{n_0} q(t^2),$$

donde $q(x) = \prod_{i=1}^k (x - \mu_i^2)$ es un polinomio de grado k . Luego, los coeficientes impares a_{2s+1} de $p_\Delta(t)$ son iguales a 0 . \square

Ejercicio: Complete los detalles de la demostración (c) \Rightarrow (b).

3.4. Para una gráfica bipartita Δ bastan dos colores para pintar los vértices de manera que dos vértices adyacentes no tengan el mismo color. Esta propiedad está contenida en el espectro de A_Δ . Consideraremos ahora una importante generalización.

El *número cromático* $\chi(\Delta)$ de una gráfica es el mínimo número de colores que se requiere para pintar los vértices de Δ de modo que dos vértices adyacentes no tengan el mismo color.

Teorema. Sea Δ una gráfica, entonces se tiene

$$\chi(\Delta) \leq \rho(\Delta) + 1.$$

Demostración: Sea $m(\Delta)$ el mínimo número de vértices adyacentes a algún vértice de Δ .

Observemos primero que existe una subgráfica inducida Δ' de Δ tal que

$$m(\Delta') \geq \chi(\Delta) - 1.$$

En efecto, sea Δ' la subgráfica más pequeña de Δ que no puede iluminarse con $\chi(\Delta) - 1$ colores. Supongamos que $x \in \Delta'_0$ tiene sólo d vecinos con $d < \chi(\Delta) - 1$. Consideramos Δ'' la subgráfica de Δ' obtenida al

quitar x . Por definición de Δ' , la gráfica Δ'' puede iluminarse con $\chi(\Delta) - 1$ colores. Si $y_1, \dots, y_d \in \Delta''_0$ son los vecinos de x , podemos dar a x un color diferente del de cualquier y_i , $i = 1, \dots, d$, de forma que Δ' pueda todavía iluminarse con $\chi(\Delta) - 1$ colores. Ello es contradictorio. Luego, $m(\Delta') \geq \chi(\Delta) - 1$.

Sea $A_{\Delta'} = (b_{ij})$ la matriz de adyacencia de Δ' y supongamos que Δ' tiene m vértices. Con base en (1.3) y (IV.3.3), tenemos

$$\rho(\Delta) \geq \rho(\Delta') \geq \min_i \left\{ \sum_{j=1}^m b_{ij} \right\} = m(\Delta') \geq \chi(\Delta') - 1. \quad \square$$

Ejercicio: Muestre que la igualdad $\chi(\Delta) = \rho(\Delta) + 1$ es válida si y solamente si Δ es de uno de los siguientes tipos:

- \tilde{A}_n con n impar,
- una gráfica completa K_n , o sea, cada uno de los n vértices de Δ está unido por medio de una arista con cada uno de los otros $n - 1$ vértices.

3.5. Ejemplos y ejercicios: Sean Δ una gráfica con n vértices y $A_{\Delta} = (a_{ij})$ su matriz de adyacencia. Sea ρ el radio espectral de Δ .

1. Sea $D(\Delta) = \max_i \left\{ \sum_j a_{ij} \right\}$ el grado máximo de Δ . Pruebe que $\rho \geq \sqrt{D(\Delta)}$.

2. Si Δ es conexa pero no es un árbol ni un circuito \tilde{A}_n , entonces $\rho > \varphi^{1/2} + \varphi^{-1/2}$, donde $\varphi = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1)$ es la razón áurea.

3. Se dice que Δ es r -regular si Δ no tiene lazos ni aristas múltiples y $\sum_{j=1}^m a_{ij} = r$ para cada $i = 1, \dots, n$. Suponga que Δ es r -regular y pruebe:

- $\rho = r$.
- Si $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ son los valores propios de A_{Δ} , entonces $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = nr$.
- $r - n \leq \lambda_i \leq n - 2 - r$, $i = 1, \dots, n - 1$.

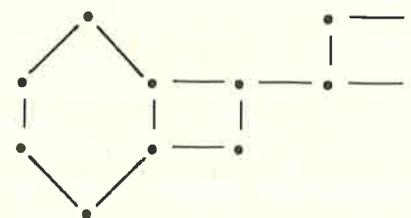
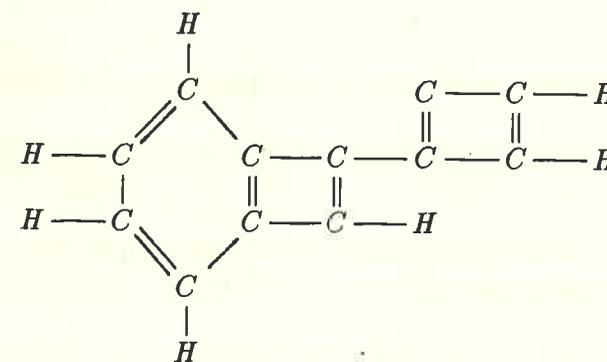
4. Una gráfica Δ es regular si y solamente si A_{Δ} acepta a $(1, 1, \dots, 1)$ como vector propio.

4. ALGUNAS APLICACIONES

En esta sección veremos algunas aplicaciones de la teoría espectral de gráficas en problemas de química. Como no profundizaremos en la justificación del problema ni en la teoría química subyacente, podemos considerar la aplicación de la teoría de gráficas a estos problemas como una ilustración cualitativa o heurística.

4.1. Consideraremos ciertos compuestos químicos formados por carbono e hidrógeno, 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 cuatro de sus electrones. En los compuestos que nos interesan σ de estos enlaces se efectúan compartiéndose electrones (llamados σ -electrones) con 3 átomos diferentes de carbono o de hidrógeno; el cuarto enlace se efectúa por medio de un electrón (llamado π -electrón) que se comparte con cualquier carbono, para este segundo átomo, el electrón compartido es también un π -electrón. En particular, dos átomos de carbono pueden compartir dos electrones: un σ -electrón y un π -electrón, dando lugar a los enlaces dobles indicados en los conocidos diagramas químicos. Consideremos el siguiente ejemplo.



El esqueleto de una molécula puede representarse en forma gráfica como sigue: se toma un vértice por cada átomo de carbono; dos vértices son adyacentes si y sólo si hay un σ -electrón que define un enlace entre los átomos de carbono correspondientes.

Estas "gráficas moleculares" satisfacen propiedades especiales: son conexas, no tienen lazos ni aristas múltiples, el máximo grado de un vértice es 3, y pueden dibujarse en el plano. El problema que nos ocupa es determinar el espectro de la gráfica molecular y con su ayuda calcular otras cantidades de interés en química. A este problema y algunas soluciones se les conoce como *Teoría de Hückel*.

4.2. En caso de que la gráfica molecular Δ de un hidrocarburo conjugado sea bipartita, se dice que la molécula es *alternante* (o *hidrocarburo alternante*). En este caso se sabe que el hecho de que $0 \in \text{Spec}(A_\Delta)$ es sinónimo de inestabilidad química de la molécula. El problema de que $0 \in \text{Spec}(A_\Delta)$ es también relevante para moléculas no alternantes, pero la relación con la estabilidad química no está tan claramente establecida.

Sea Δ una gráfica bipartita. Consideraremos el problema de saber si $0 \in \text{Spec}(A_\Delta)$. Sea $\eta(\Delta)$ la multiplicidad algebraica de 0 en el espectro de A_Δ .

Ejercicios

1. Muestre que si Δ es un ciclo de longitud par $2m$, entonces $\eta(\Delta) = 1 + (-1)^m$.

2. Si Δ es una gráfica lineal de longitud n , entonces $\eta(\Delta) = \frac{1}{2} [1 - (-1)^n]$.

Proposición. Sea Δ un árbol con n vértices y sea q el máximo número de aristas no adyacentes dos a dos. Entonces

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

Demostración: Sea

$$p_\Delta(t) = t^n + a_1 t^{n-1} + \dots + a_{n-1} t + a_n$$

el polinomio característico de A_Δ . Entonces $\eta(\Delta) = n - \min \{i: a_j = 0, j > i\}$. Deseamos entonces probar que $2q = \min \{i: a_j = 0, j > i\}$.

Sea $j > 2q$; probaremos que $a_j = 0$. En efecto,

$$a_j = - \sum_{f(\sigma)=n-j} (-1)^{\text{sgn } \sigma} \prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)},$$

donde $\sigma \in S_n$. Para $\sigma \in S_n$ con $f(\sigma) = n - j$, supongamos que $\prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} \neq 0$. Como $j > 2q$, los pares $\{(i, \sigma(i)): \sigma(i) \neq i\}$ determinan un conjunto de aristas donde al menos dos de ellas tienen un vértice común, como en la figura,

$$i \text{ --- } \sigma(i) = j \text{ --- } \sigma(j) = \sigma^2(i)$$

ya que si $\sigma(i) = \sigma(j)$, entonces también $i = j$. Como σ es una permutación de orden finito $m \geq 3$, obtenemos un ciclo con m vértices en Δ . Esto contradice que Δ es un árbol. Así, $\prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} = 0$ y $a_j = 0$.

Por otra parte, sean $\{(i, \sigma(i)): i = 1, \dots, q\}$ parejas de vértices que determinan un conjunto de aristas no adyacentes dos a dos. Podemos suponer que $\sigma \in S_n$ con $\sigma^2 = 1$ y $\sigma(x) = x$, para $x \notin \{1, \dots, q, \sigma(1), \dots, \sigma(q)\}$. Entonces $\text{sgn } \sigma = 0$ y $f(\sigma) = n - 2q$ con $\prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} \neq 0$. Como antes podemos ver que si $\varphi \in S_n$ con $f(\varphi) = n - 2q$ y $\prod_{\varphi(i) \neq i} a_{i\varphi(i)} \neq 0$, entonces $\varphi^2 = 1$ y $\text{sgn } \varphi = 0$. Por tanto,

$$a_{2q} = - \sum_{f(\varphi)=n-2q} \prod_{\varphi(i) \neq i} a_{i\varphi(i)} \leq - \prod_{\sigma(i) \neq i} a_{i\sigma(i)} < 0.$$

Entonces, $\eta(\Delta) = n - 2q$. □

4.3. Los vértices de una gráfica bipartita Δ pueden numerarse de forma tal que

$$A_\Delta = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{bmatrix};$$

en efecto, si $b: \Delta_0 \rightarrow \{0, 1\}$ es una coloración, podemos suponer que $b^{-1}(0) = \{1, \dots, m\}$ y $b^{-1}(1) = \{m+1, \dots, n\}$. La matriz B se llama la *matriz de incidencia* de Δ .

Lema. Si Δ es una gráfica bipartita con n vértices y con matriz de incidencia B , entonces

$$\eta(\Delta) = n - 2 \operatorname{rg} B.$$

Demostración: Sea B una matriz $p \times q$ con rango $r = \operatorname{rg} B$. Existen entonces vectores $x_1, \dots, x_{q-r} \in \mathbb{R}^q$, $y_1, \dots, y_{p-r} \in \mathbb{R}^p$ tales que

$$Bx_i = 0, \quad B^T y_j = 0, \quad i = 1, \dots, q-r, \quad j = 1, \dots, p-r.$$

Definimos $\hat{x}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ x_i \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$, $\hat{y}_j = \begin{pmatrix} y_j \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ tales que

$$A_\Delta \hat{x}_i = 0, \quad A_\Delta \hat{y}_j = 0, \quad i = 1, \dots, q-r, \quad j = 1, \dots, p-r.$$

Además, estos vectores son linealmente independientes. Luego, $\eta(\Delta) \geq n - 2r$. Si $A_\Delta z = 0$ con $z = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}$, $y \in \mathbb{R}^p$, $x \in \mathbb{R}^q$, entonces

$$Bx = 0, \quad B^T y = 0.$$

Se sigue que x (respectivamente y) es combinación lineal de x_1, \dots, x_{q-r} (respectivamente y_1, \dots, y_{p-r}) y z lo es de $\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{q-r}, \hat{y}_1, \dots, \hat{y}_{p-r}$. Se sigue el resultado. \square

En particular, se sigue que una condición necesaria de equilibrio para un hidrocarburo alternante con gráfica Δ es que la matriz de incidencia B sea invertible. En particular, la molécula tiene un número par de átomos de carbono.

4.4. El siguiente resultado es crucial para calcular $\eta(\Delta)$ en gráficas bipartitas.

Proposición. Sea Δ una gráfica bipartita y sean Δ' , Δ'' dos subgráficas inducidas. Supongamos que

- la gráfica Δ' es bipartita con matriz de incidencia B' de tamaño $p \times q$ y $\operatorname{rg} B' = \min\{p, q\}$;
- la gráfica Δ se obtiene uniendo algunos vértices de Δ' con algunos vértices de Δ'' . Entonces

$$\eta(\Delta) = \eta(\Delta') + \eta(\Delta'').$$

Demostración: Sea B (respectivamente B' , B'') la matriz de incidencia de Δ (respectivamente Δ' , Δ''). Entonces

$$B = \begin{bmatrix} B' & M \\ 0 & B'' \end{bmatrix}.$$

Podemos suponer que $p \leq q$. Entonces $\operatorname{rg} B' = p$. Luego B puede reducirse por operaciones elementales a una matriz de la forma

$$\begin{bmatrix} B' & 0 \\ 0 & B'' \end{bmatrix}$$

que tiene rango $\operatorname{rg} B' + \operatorname{rg} B''$. Luego, $\operatorname{rg} B = \operatorname{rg} B' + \operatorname{rg} B''$. Por (3.3),

$$\eta(\Delta) = n - 2\operatorname{rg} B = \eta(\Delta') + \eta(\Delta''). \quad \square$$

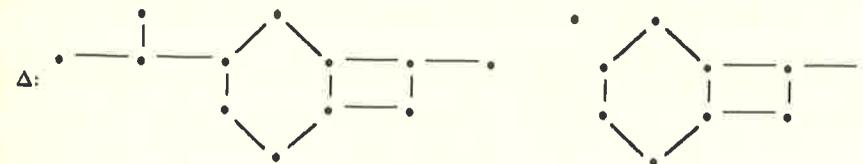
Corolario. Sea Δ una gráfica bipartita con un vértice x con sólo un vecino y . Sea Δ' la gráfica que se obtiene de Δ al quitar x y y , entonces

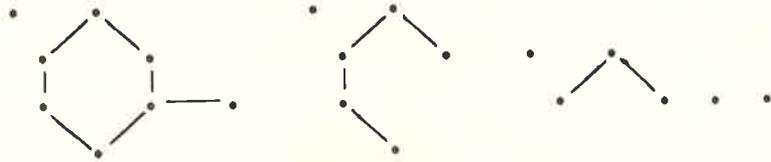
$$\eta(\Delta) = \eta(\Delta').$$

Demostración: La gráfica inducida con vértices $\{x, y\}$ satisface la condición (a) de la proposición anterior. \square

El proceso de eliminación de aristas dado por el corolario se conoce como "desmantelamiento de gráficas".

Ejemplo: El valor de η es el mismo para siguiente familia de gráficas.

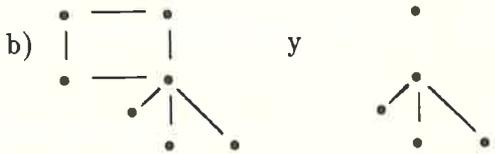
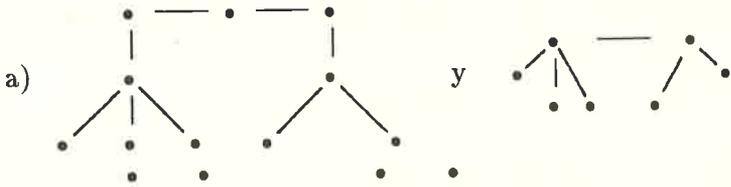




Luego, $\eta(\Delta) = 2$.

Ejercicios

1. Muestre que las siguientes parejas de gráficas tienen el mismo valor de η .



2. Calcule η para la gráfica.

