TEORÍA DE GRÁFICAS

El teorema de Cayley

Aprendiz: Kevin Gerardo Messina Rodríguez
Mentor: O'Bryan Alexander Cárdenas-Andaur

Índice

Introducción

La teoría de gráficas se originó con la contribución de Leonhard Euler, quien abordó el problema de los puentes de Königsberg como un acertijo matemático en lugar de un problema fundamental. Este acertijo consistía en determinar si era posible cruzar los siete puentes de la ciudad pasando una sola vez por cada uno, como se muestra en la imagen.

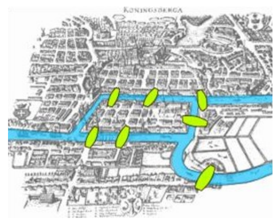


Figura 1: Mapa de los 7 puentes y 4 zonas de tierra

La solución de Euler abrió la puerta a lo que Leibniz había denominado *geometría de la posición*. Leibniz afirmaba que no había una rama de la matemática más pura que la geometría y que se necesitaba una rama similar.

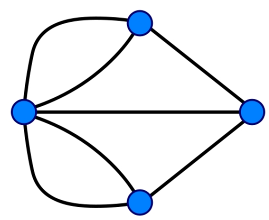


Figura 2: Representación de los Puentes de Königsberg

En el estudio de la teoría de gráficas, dos conceptos fundamentales son la planaridad y la conexidad. La planaridad de una gráfica se refiere a la posibilidad de dibujarla en un plano sin que sus aristas se crucen. Una gráfica es conexa si existe un camino entre cualquier par de vértices. Estos conceptos son esenciales no solo para la comprensión básica de las gráficas, sino también para aplicaciones más complejas y la formulación de teoremas significativos.

El principal objetivo del presente es enunciar y probar el Teorema de Cayley. Este habla sobre el número de árboles con igual número de vértices, es un resultado fundamental en la teoría combinatoria, con profundas implicaciones en áreas como la optimización de redes, la teoría de algoritmos y la biología computacional. La planaridad y la conexidad son propiedades críticas en la caracterización de árboles y, por ende, en la formulación y prueba de este teorema.

1. Preliminares de la teoría de gráficas

En esta sección se introducen algunos conceptos básicos, los cuales ayudarán a familia-riarizarse rápidamente con la teoría e ir avanzando hacía el objetivo principal.

Definición 1.1. Una **gráfica** $G = (V, E)$ finita es un par ordenado formado por un conjunto finito y no vacío $V = V(G)$ y un conjunto $E = E(G) \subset V \times V$. A los elementos de V se les llama **vértices** y a los de E **aristas**.

.

Gráficamente, se puede representar a los vértices como puntos en el plano y las aristas como conexiones (líneas) entre ellos.

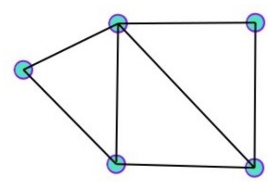


Figura 3: Representación de una gráfica

Los vértices de cada arista e serán llamados **puntos finales** de e y, por comodidad, una arista $\{u, v\}$ será denotada por uv.

La definición de gráfica no impide que existan dos tipos especiales de aristas:

1. **Multiarista**: Subconjunto de E con 2 o más aristas que poseen las mismas parejas de puntos finales.

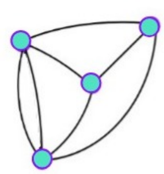


Figura 4: Ejemplo de gráfica con multiaristas

2. **Loop**: arista cuyos puntos finales son iguales .

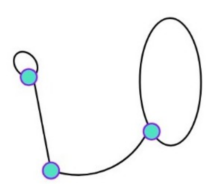


Figura 5: Ejemplo de gráfica con loops

Definición 1.2. Una gráfica G se dice **simple** si no posee loops ni multiaristas.

Un ejemplo de familia de gráficas simples es el de las llamadas **completas**. Una gráfica G se dice completa si existe una arista entre cada par de vértices distintos. Si $|V| = n$, la gráfica completa se denota como K_n y su conjunto de aristas se define por:

$$E = \{\{u, v\} \mid u, v \in V, u \neq v\}$$

El número de aristas en K_n es $\binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$ y corresponde al máximo número de aristas que puede poseer una gráfica simple con n vértices.

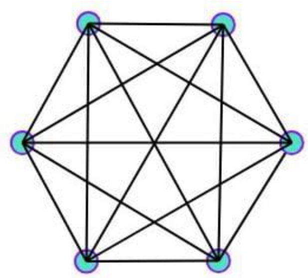


Figura 6: Gráfica completa K_6

Definición 1.3. Decimos que una **gráfica es plana**, si puede dibujarse en el plano sin que las aristas se intersecten entre sí, salvo en sus puntos finales.

Definición 1.4. Sean $G = (V, E)$, $H = (V_H, E_H)$ dos gráficas. Se dirá que H es una **subgráfica** de G si se cumplen las siguientes condiciones:

- $V_H \subseteq V$: El conjunto de vértices de H es un subconjunto del conjunto de vértices de G.
- $E_H \subseteq E$: El conjunto de aristas de H es un subconjunto del conjunto de aristas de G.

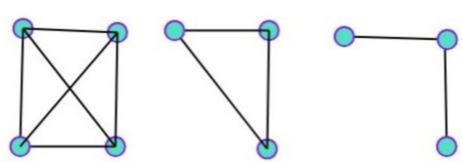


Figura 7: Tres subgráficas de K_4

Teorema 1.1. Sea $G = (V, E)$ una gráfica simple y sean $v_1, \ldots, v_n$ sus vértices, entonces se tiene que:

$$2m = \sum_{i=1}^{n} d(v_i)$$

Donde:

- m es el número de aristas de la gráfica.
- $d(v_i)$ es el grado del vértice v_i, es decir, el número de aristas incidentes en v_i.

Demostración. Notar que cada arista aportará al grado de los dos vértices correspondientes a sus puntos finales. □

Como consecuencia directa del teorema anterior se tiene el siguiente resultado

Teorema 1.2. Sea $G = (V, E)$ una gráfica simple. El número de vértices de grado impar es par.

2. Algunas familias de gráficas

En esta sección se introducen algunos ejemplos de familias de graficas presentes en la literatura.

Definición 2.1. El **complemento** $\overline{G}$, de una gráfica simple G, es otra gráfica simple con igual conjunto de vértices que G y conjunto de aristas definido como $uv \in E(\overline{G})$ si y solo si $uv \notin E(G)$.

Definición 2.2. Un **cliqué** de una gráfica G es una subgráfica H tal que H es una gráfica completa.

Definición 2.3. Un **conjunto de independencia** es un conjunto de vértices tal que no son adyacentes entre sí.

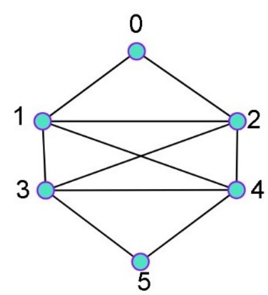


Figura 8: Los vértices (1,2,3,4) forman un cliqué y los vértices (0,5) un conjunto de independencia

De la definición de conjunto de independencia se tiene que un conjunto de vértices en una gráfica G se dirá de independencia si y solo si en el complemento forman un cliqué.

Definición 2.4. Una gráfica G se dice **bipartita** si $V(G)$ es la unión de dos conjuntos disjuntos V_1 y V_2 tales que las aristas de G poseen un vértice en V_1 y otro en V_2.

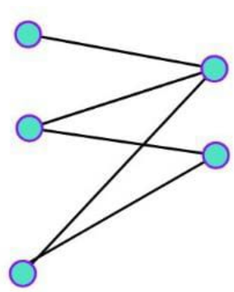


Figura 9: Ejemplo de gráfica bipartirta

Un subfamilia de gráficas bipartitas es la de las llamadas **gráficas bipartitas completas** estas son gráficas bipartitas en las que cada vértice de V_1 está conectado a cada vértice de V_2. Se denotan como $K_{m,n}$ donde $|V_1| = m$ y $|V_2| = n$, y formalmente su conjunto de aristas se define por:

$$E = \{\{u, v\} \mid u \in U, v \in V\}.$$

El número de aristas en $K_{m,n}$ es $m \times n$.

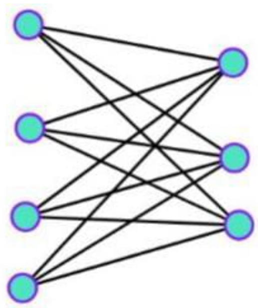


Figura 10: Gráfica bipartita completa $K_{4,3}$

Definición 2.5. Una gráfica se dice k-regular si cada vértice tiene exactamente k aristas incidentes. Es decir, para todo vértice $v \in V$, el grado de v es:$\deg(v) = k$.

.

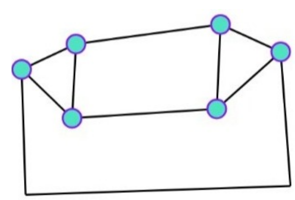


Figura 11: Ejemplo de gráfica 3- regular

Toda gráfica completa es k-regular.

Definición 2.6. Un camino en una gráfica $G = (V, E)$ es una secuencia de vértices $(v_0, v_1, \ldots, v_k)$ tal que $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ para todo $i \in \{0, 1, \ldots, k-1\}$. Un camino es **simple** si todos sus vértices son distintos, es decir, $v_i \neq v_j$ para todo $i \neq j$. Lo denotamos como P_n

Figura 12: Camino

Definición 2.7. Una gráfica G se dice **conexa** si existe un camino entre cualquier par de vértices.

Definición 2.8. Una **componente conexa** de una gráfica G es una subgráfica conexa máximal.

Definición 2.9. Un ciclo en una gráfica es un camino que empieza y termina en el mismo vértice, y no se repiten vértices salvo el inicio con el final

Definición 2.10. Una gráfica conexa sin ciclos, es llamada **Árbol**. A sus vértices de grado 1 se le denominan hojas. En varias situaciones es importante distinguir una hoja a la que se le denomina raíz.

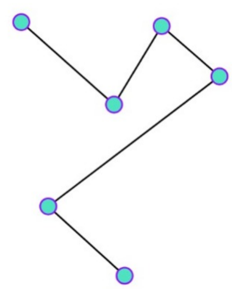


Figura 13: Árbol

Proposición 2.1. Un árbol tiene al menos dos vértices de grado 1

Demostración. Al escoger un vértice v cualquiera y, empezando por una arista que salga de v se recorre la gráfica hasta llegar a una hoja. Si v tiene grado 1, ya se tienen los dos vértices buscados, sino usando otra arista de v se repite el procedimiento hasta llegar a otra hoja. $\square$

Proposición 2.2. Una gráfica conexa con n vértices es un árbol si, y solo si tiene $n-1$ aristas.

Demostración. ($\Rightarrow$) Inducción sobre n. Si $n=1$, el número de aristas es $1-1=0$. Sea $n>1$ y sea v una hoja. Al quitar v de la gráfica queda un árbol con $n-1$ vértices, por tanto, por la Hipótesis de Inducción, con $n-2$ aristas. Así, el árbol buscado tiene $n-1$ aristas.
($\Leftarrow$): Por contradicción, si la gráfica es conexa, tiene $n-1$ aristas y no es un árbol, entonces posee $k \geq 1$ ciclos, es posible quitar una arista de cada ciclo (preservando la conexidad). Con esto se obtiene un árbol con n vértices y $n-1-k < n-1$ aristas, lo cual es una contradicción. $\square$

Definición 2.11. Un **bosque** es una gráfica cuyas componentes conexas son árboles, es decir, es una gráfica (no necesariamente conexa) sin ciclos.

Definición 2.12. Una **digráfica o gráfica dirigida**, es una gráfica en que cada arista se recorre en un sentido predeterminado.

Definición 2.13. La gráfica de Petersen es una gráfica simple simple cuyos vértices son los subconjuntos de 2 elementos de un conjunto de 5 elementos y cuyas aristas son los pares de subconjuntos disjuntos de 2 elementos.

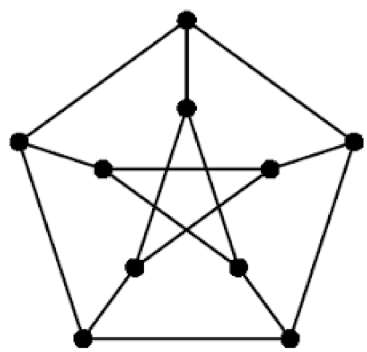


Figura 14: Gráfica de petersen

3. Matrices e Isomorfismos

En esta sección, se introducen las representaciones matriciales más relevantes en la teoría de gráficas, entre ellas, las matrices de incidencia, de grado, y de adyacencia. Una característica importante de estas es que nos ayudan a distinguir entre gráficas que son o no isomorfas, mediante la comparación de sus matrices correspondientes.

Definición 3.1. Dada una gráfica $G = (V, E)$ con $|V| = n$ vértices y $|E| = m$ aristas, la **matriz de incidencia I** es una matriz $n \times m$ tal que:

$$\mathbf{I}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si el vértice } v_i \text{ está en la arista } e_j, \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Definición 3.2. La **matriz de adyacencia A** de una gráfica $G = (V, E)$ con $|V| = n$ es una matriz $n \times n$ tal que:

$$\mathbf{A}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Definición 3.3. La **matriz de grado D** de una gráfica $G = (V, E)$ con $|V| = n$ es una matriz diagonal $n \times n$ tal que:

$$\mathbf{D}_{ii} = \deg(v_i)$$

donde $\deg(v_i)$ es el grado del vértice v_i (es decir, el número de aristas incidentes en v_i) y $\mathbf{D}_{ij} = 0$ para $i \neq j$.

A continuación se da un ejemplo de gráfica y sus matrices asociadas;

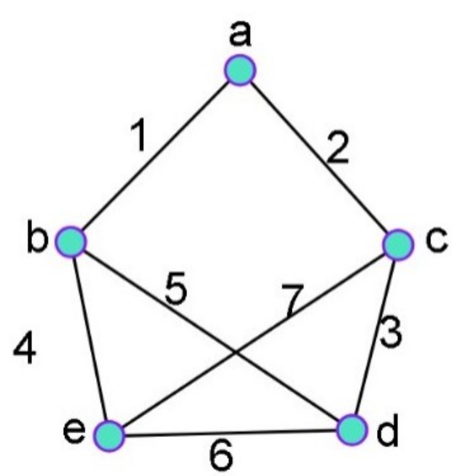


Figura 15: Una gráfica donde distinguimos aristas y vértices

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & a & b & c & d & e \\
\hline
a & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
b & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
c & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
d & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
e & 0 & 1 & 1 & 1 & 0
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|ccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\
\hline
a & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
c & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
d & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
e & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|ccccc}
a & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\
c & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\
d & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\
e & 0 & 0 & 0 & 0 & 3
\end{array}
$$

Figura 16: Matriz de adyacencia, incidencia y grado respectivamente

Definición 3.4. Un **isomorfismo** entre gráficas simples G y H es una biyección $f : V(G) \to V(H)$ tal que $uv \in E(G)$ si y solo si $f(u)f(v) \in E(H)$. Si existe un isomorfismo entre dos gráficas G y H se dirá que G es isomorfa a H y se denotará como $G \cong H$.

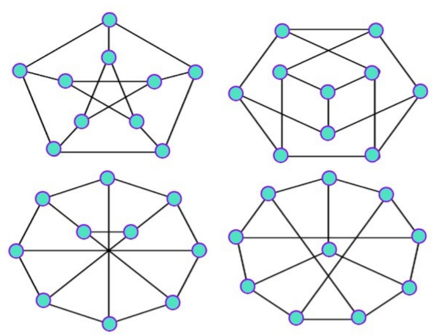


Figura 17: Ejemplos de gráficas isomorfas a la gráfica de Petersen

Proposición 3.1. La relación de isomorfismo es una relación de equivalencia en el conjunto de gráficas simples.

Demostración. Se probará que se cumplen las tres propiedades de una relación de equivalencia:

Propiedad reflexiva: La función identidad del conjunto $V(G)$ en sí mismo es un isomorfismo. Por lo tanto $G \cong G$.

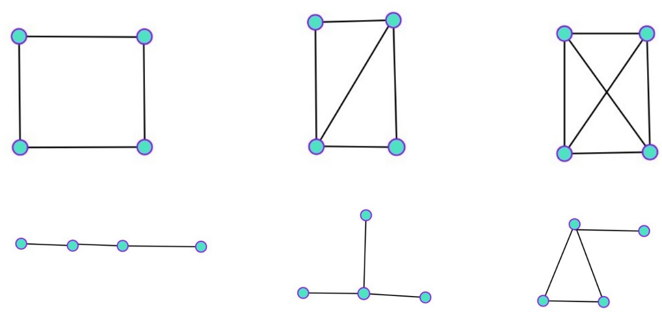
Propiedad simétrica: si $f : V(G) \to V(H)$ es un isomorfismo de G a H, entonces f^{-1} es un isomorfismo de H a G porque la arista $uv \in E(G)$ si y solo si $f(u)f(v) \in E(H)$. Así tenemos que $G \cong H \Longrightarrow H \cong G$

Propiedad transitiva: Suponemos que $f : V(F) \to V(G)$ y $g : V(G) \to V(H)$ son isomorfos. Tenemos que $uv \in E(F)$ si y solo si $f(u)f(v) \in E(G)$ y $xy \in E(G)$ si y solo si $g(x)g(y) \in E(H)$. Así f es un ismorfismo, para cada $xy \in E(G)$ podemos encontrar $uv \in E(F)$ tal que $f(u) = x$ y $f(v) = y$. $\square$

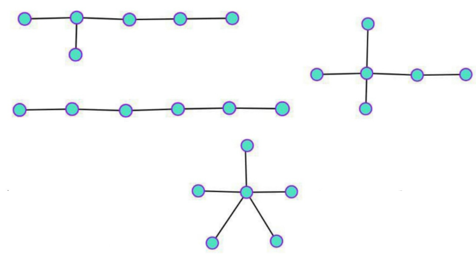
Observación 3.2. Si dos gráficas son isomorfas entonces tienen la misma estructura, esto significa que podemos utilizar como técnica para estudiar su isomorfía la comparación de sus características, tales como:

- Conexidad y componentes conexas
- Planaridad
- Grados máximos y mínimos.
- Subgráficas
- Cliqués y conjuntos de independencia
- etc

A continuación se tienen todas las gráficas conexas no isomorfas de 4 vértices:



Además, a continuación se muestran algunos árboles no isomorfos de 6 vértices



4. Sobre el Teorema de Cayley

Esta sección, al igual que el artículo en su totalidad, se basa en la integración de las ideas del estudio de Cayley sobre árboles y la química, específicamente en relación con los compuestos químicos que tienen la misma composición pero diferentes reacciones. Este enfoque permite calcular el número potencial de isómeros, compuestos que comparten la misma composición pero presentan distintas propiedades y niveles de accesibilidad.

En el caso de querer contar todos los árboles no isomorfos con n vértices, el problema se torna tan complejo que las técnicas de conteo conocidas resultan insuficientes. Este desafío nos llevaría a concluir que no existe una fórmula general para dichos árboles. No obstante, la situación cambia si se consideran distinciones entre los vértices; este tipo especial de grafos se denomina árboles enumerados.

Teorema 4.1 (de Cayley)**.** El número de árboles con n vértices etiquetados es n^{n-2}.

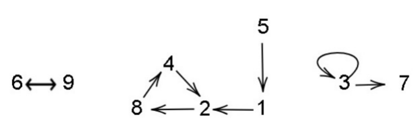
Demostración. Se establecerá una biyección entre el conjunto de árboles etiquetados en los que se ha distinguido una pareja de vértices (I, F) (posiblemente $I = F$) y las funciones de $[n]$ hacia $[n]$

Dada una función f, es posible representarla mediante una gráfica dirigida con n vértices enúmerados $1, \ldots, n$, agregando una arista entre los vértices i y j si y solo si $f(i) = j$.

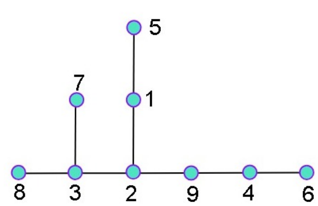
Sean $i_1 < i_2 < \ldots < i_k$ los elementos de n que están en algún ciclo dirigido en la gráfica. Fijando $I = f(i_1)$ y $F = f(i_k)$, se agrega una arista entre los vértices $f(i_1)$ y $f(i_2)$, hasta $f(i_{k-1})$ y $f(i_k)$. Después, se agregan aristas entre cada uno de los vértices restantes y su respectiva imagen bajo la función. $\square$

Para ilustrar la construcción, sea $n = 9$ y la función $f : (9) \to (9)$ definida por $f(1) = 2$, $f(2) = 8$, $f(3) = 3$, $f(4) = 2$, $f(5) = 1$, $f(6) = 9$, $f(7) = 3$, $f(8) = 4$, $f = (9) = 6$. La gráfica dirigida que representa f es:

Los elementos en algún ciclo dirigido son $2 < 3 < 4 < 6 < 8 < 9$, y sus imágenes son, en orden: 8,3,2,9,4,6. Entonces el árbol con vértices distinguidos (I, F) que se asigna a f es:



Notemos que los elementos que estan por debájo de la gráfica son aquellos que presentan ciclos, (los que se van eliminando en la construcción del árbol)



Demostración. (2)

Denotamos por $F(n,s)$, $1 \leq s \leq n$, el número de bosques que tienen un conjunto de vértices $\{1,2,\ldots,n\}$ y s componentes que son árboles, tales que los vértices $1,2,3,\ldots,s$ pertenecen a diferentes árboles. Tenemos que $F(n,s) = sn^{(n-s-1)}$ para $1 \leq s \leq n$. En particular, para $F(n,1) = n^{n-2}$, es el número de árboles distintos con n vértices etiquetados.

La prueba está basada en una fórmula de recurrencia tal que si $n > 1$ y $1 \leq s \leq n$ tenemos que:

$$F(n,s) = \sum_{j=0}^{n-s} \binom{n-s}{j} F(n-1, s+j-1)$$

donde $F(1,1) = 1$ y $F(n,0) = 0$ para $n \geq 1$. Para probar esto, consideremos un bosque que tiene un conjunto de vértices $\{1,2,\ldots,n\}$ y s componentes que son árboles, tales que los vértices $1,2,\ldots,s$ pertenecen todos a árboles diferentes. En este bosque, el vértice 1 puede tener grado $j = 0,1,\ldots,n-s$; es decir, el vértice 1 puede estar conectado a j vértices en el conjunto de vértices $\{s+1,\ldots,n\}$. Llamemos a estos vértices j vértices secundarios. Podemos elegir j vértices secundarios entre los $n-s$ vértices de $\binom{n-s}{j}$ formas. Ahora eliminemos el vértice 1 y todos los j bordes que emanan del vértice 1. Luego, la gráfica restante se convierte en un bosque con un conjunto de vértices $\{2,3,\ldots,n\}$ y que consta de $s+j-1$ componentes que son árboles, tales que los vértices $2,3,\ldots,s$ y los j vértices secundarios pertenecen a árboles diferentes. El número de dichos bosques es $F(n-1, s+j-1)$. Si sumamos $\binom{n-s}{j} F(n-1,s+j-1)$ para todos los valores posibles de j, obtenemos $F(n,s)$.

Ahora, usando inducción matemática. Si $n = 1$, la fórmula es evidentemente cierta. Suponiendo para $F(n-1,i) = i \cdot n^{n-i-2}$ para $1 \leq i \leq (n-1)$ y $n > 1$, tenemos que

$$F(n,s) = \sum_{j=0}^{n-s} \binom{n-s}{j} (s+j-1) \cdot n^{n-j-s-1} = s \cdot n^{n-s-1}$$

escribiendo así $\binom{j}{n-s} = (n-s)\binom{n-s-1}{j-1}$ para $j \geq 1$ y aplicando el teorema del binomio se completa la prueba.

$\square$

Referencias

[1] Maria Luisa Pérez Seguí. *Combinatoria Avanzada*. Editorial UNAM, 2019.

[2] Douglas B. West. *Introduction to Graph Theory*. Pearson, 2001

[3] Bondy J.A, Murty, U.S.R.,. *Graph Theory with Applications*. The Macmillan Press Ltd, 1977