

Una breve introducción a la teoría de grafos

Amador Menéndez Velázquez

EXISTE cierto tipo de problemas que únicamente tienen que ver con un determinado número de puntos y ciertos trazos que los unen. La teoría de los grafos (Ore, 1995 y Biggs, 1974) es la rama de la Matemática Discreta (Bujalance y otros, 1993) que se ocupa de tal tipo de problemas. La conectividad entre los elementos de un conjunto es pues el objetivo fundamental de la teoría de los grafos.

La teoría de los grafos es una de las áreas de la Matemática cuyo desarrollo ha estado siempre motivado por sus aplicaciones. Así, el primer artículo conocido sobre la misma fue escrito por Euler y publicado en 1736 para dar solución al célebre problema de «los puentes de Königsberg». La situación era la siguiente: ¿Es posible encontrar una ruta en la ciudad que recorra los siete puentes, cruzando cada uno de ellos una sola vez y regresando al punto de partida? Euler demostró que no era posible. Así surgió el concepto de grafo euleriano que, informalmente hablando, es «aquel grafo que puede ser dibujado sin levantar el lápiz del papel, sin pasar dos veces por la misma línea y acabando en el punto de partida». A partir de tal fecha muchos matemáticos importantes han realizado contribuciones. En los siglos XVIII y XIX se puede citar a Euler, Vandermonde, Cauchy, Cayley, Hamilton, Kempe, Tait, Heawood, Kirchoff y Petersen, entre otros. Durante este siglo, los estudios en este terreno no han cesado y otro hito en la historia de la Teoría de los Grafos fue la aparición en 1936 del primer texto sobre este tópico escrito por D. König (1936). Desde sus orígenes, la Teoría de los Grafos se utilizó para la resolución de juegos matemáticos, para el estudio de circuitos eléctricos y en diversas aplicaciones en una multitud de campos tan diferentes como la economía (Avondo-Bodino, 1962), física teórica (Haray, 1967 y Capra, 1979), psicología (Cartwright y Haray, 1963), física nuclear

En este artículo presentamos una breve introducción a la Teoría de los Grafos. La Teoría de los Grafos es un ejemplo de una rama de la Ciencia que ha surgido y evolucionado para ir proporcionando soluciones a problemas concretos. La Teoría de los Grafos se utiliza rutinariamente, aunque quizás de una forma inconsciente, en la Química, la Física, la Electrónica, la Informática... Por eso hemos creído conveniente presentar en un artículo de esta revista las bases de dicha teoría junto con algunas posibles aplicaciones adecuadas para abordar en el aula de Secundaria.

(Mattuck, 1967), lingüística (Culik, 1964), sociología (Flament, 1963), zoología (Lissowsky, 1971), tecnología (Korach y Haskó, 1972), antropología (Hage y Haray, 1983), computación (Even, 1979), biología (Roberts, 1989), ingeniería (Johnson y Johnson, 1972), química (Balaban, 1976 y Trinajstic, 1977)... En la actualidad, la teoría de los grafos sigue aplicándose dentro y fuera de las matemáticas y continúa siendo una rama de investigación muy activa. Las aplicaciones de la teoría de los grafos a la informática (por ejemplo, para la representación de datos o diseño de redes) han despertado interés en aspectos concretos de la teoría, como pueden ser la búsqueda de algoritmos adecuados para la exploración de grafos.

La teoría de los grafos está estrechamente ligada a otros campos de la matemática como la topología (en realidad la teoría de los grafos es topología monodimensional), la teoría de grupos, la teoría de conjuntos y la combinatoria.

A continuación expondremos los conceptos fundamentales de la teoría y algunas aplicaciones de la misma. El estudiante de Enseñanza Secundaria podrá darse cuenta de que el concepto de grafo ya lo ha utilizado, quizás inconscientemente, a lo largo de sus estudios. Así, por ejemplo, las leyes de Kirchoff o las fórmulas estructurales de los compuestos químicos son una manifestación inequívoca de la teoría de los grafos.

El concepto de grafo

Los grafos pueden ser considerados formalmente como diagramas o dibujos (representación diagramática), o bien algebraicamente como un par de conjuntos (representación algebraica).

Definición geométrica

Geoméricamente, un grafo G es un conjunto de puntos en el espacio, algunos de los cuales están unidos entre sí mediante líneas. En la figura 1 mostramos un ejemplo de grafo.

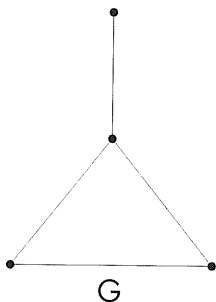


Figura 1. Representación geométrica del grafo G

Este grafo puede representar una multitud de situaciones posibles de la vida real. Podría simbolizar por ejemplo, un mapa de carreteras, donde los puntos representarían pueblos o ciudades y las líneas las carreteras que unen las ciudades entre sí. En este caso, el grafo nos informaría de las posibles comunicaciones que existen entre las ciudades. Pero este mismo grafo también podría esquematizar un circuito eléctrico, una molécula química (donde los puntos serían los átomos y las líneas los enlaces químicos), etc. Debemos de advertir, no obstante, que un grafo contiene únicamente información topológica, es decir, información sobre las conectividades entre puntos, careciendo de información geométrica en el sentido euclídeo (distancias, ángulos...). Así, los dos dibujos mostrados en la figura 2 representan en realidad el mismo grafo.

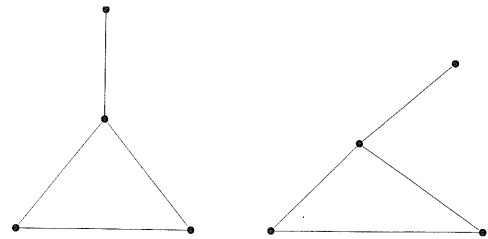


Figura 2. Dos representaciones geométricas diferentes de un mismo grafo

Recordemos al estudiante que la teoría de los grafos es topología monodimensional y la *topología* se puede definir como la «geometría de la distorsión» (ver figura 3).

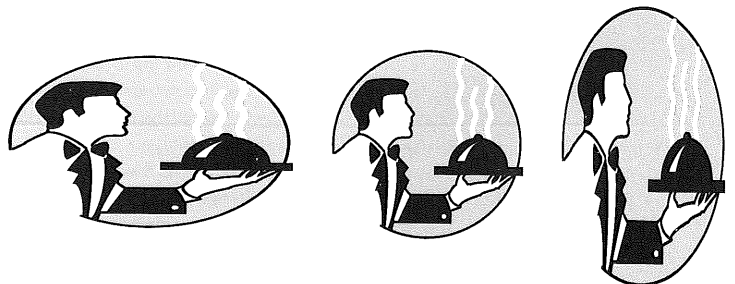


Figura 3. Una deformación «continua» de un objeto conserva la forma (topología) del mismo.

Definición algebraica

Acabamos de ver que un grafo G es un conjunto de puntos y de líneas conectando algunas parejas de puntos. Esta definición nos proporciona una visión muy intuitiva del concepto de grafo. Si queremos formalizar el concepto de grafo, debemos recurrir al álgebra, haciendo previamente mención explícita a dos conjuntos: el conjunto de los vértices («vertex set»), V , y el conjunto de los lados («edge set»), E , del grafo G . Así, algebraicamente, un grafo G se define como un par ordenado

$$G = (V, E) = (V(G), E(G))$$

donde V es un conjunto no vacío de puntos del espacio topológico, también conocidos como *vértices* o *nodos*, y E es un conjunto de pares no ordenados de elementos distintos de V , denominados *lados*, *líneas* o *aristas*. En la mayoría de los casos de interés práctico, ambos conjuntos son finitos. Si dos vértices i y j están unidos por una misma arista, diremos que los vértices i y j son *adyacentes*, y representaremos la arista correspondiente por (i, j) o (j, i) , ya que, según hemos advertido, se trata de un par no ordenado. También podemos decir que los vértices i y j son dos vértices vecinos, que son los extremos de un mismo lado, o que son *incidentes* al lado (i, j) . Por otra parte, diremos que dos lados son *adyacentes* si tienen al menos un vértice en común. Para poder representar algebraicamente un grafo es necesario que esté etiquetado, es decir, que los vértices se distingan unos de otros mediante etiquetas, las cuales pueden ser números o letras.

En la figura 4 mostramos como ejemplo un etiquetado posible del grafo G anteriormente considerado.

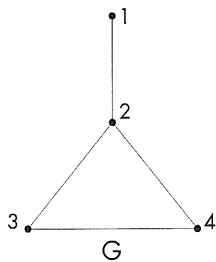


Figura 4. Etiquetado del grafo simple G

Los grafos son usados con frecuencia para representar redes de comunicación o transporte.

La representación algebraica de este grafo viene dada por (notación explícita):

$$G = (V, E) = (V(G), E(G))$$

$$V = V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$$

$$E = E(G) = \{(v_1, v_2), (v_2, v_3), (v_2, v_4), (v_3, v_4)\}$$

donde v_i hace alusión al vértice con la etiqueta i . Una representación alternativa (notación simplificada) es:

$$G = (V, E) = (V(G), E(G))$$

$$V = V(G) = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$E = E(G) = \{(1, 2), (2, 3), (2, 4), (3,4)\}$$

En este artículo usaremos la notación explícita o la notación simplificada, dependiendo de las necesidades particulares.

El número de vértices del grafo G , $|V(G)|$, se denomina *orden del grafo*. El número de lados del grafo G , $|E(G)|$, se conoce como *tamaño del grafo*. Un grafo es finito si $|V(G)|$ y $|E(G)|$ son finitos. En este artículo sólo trataremos con grafos finitos.

Caminos y distancias en un grafo

Los grafos son usados con frecuencia para representar redes de comunicación o transporte. En un grafo que represente una de estas redes es importante conocer la existencia de caminos que recorran todas las aristas o todos los vértices y que en cierto modo sean los más «económicos». En este artículo examinaremos este tipo de problemas. Para ello comenzaremos dando una serie de definiciones básicas.

Un *camino* o *ruta* en un grafo G es una secuencia (finita) en la que aparecen alternadamente vértices y lados de G :

$$v_0 \rightarrow (v_0, v_1) \rightarrow v_1 \rightarrow (v_1, v_2) \rightarrow v_2 \rightarrow \dots \rightarrow (v_{N-1}, v_N) \rightarrow v_N$$

donde cada lado tiene por extremos los vértices inmediatamente precedente y siguiente en la secuencia. Por lo tanto, el camino también puede ser representado, sin pérdida de información alguna, por la secuencia:

$$v_0 \rightarrow v_1 \rightarrow v_2 \rightarrow \dots \rightarrow v_{N-1} \rightarrow v_N$$

En esta última secuencia no aparecen explícitamente los lados, pero son evidentes por el contexto. A los vértices v_0 y v_N se les denomina extremos del camino (v_0 : vértice inicial del camino, v_N : vértice final del camino) y se dice que el camino va de v_0 a v_N , o que conecta v_0 y v_N . La longitud de un camino es el número de aristas que contiene. Un camino tiene la propiedad de que dos lados consecutivos del mismo son o bien adyacentes o bien idénticos (si retrocedemos en el camino).

El concepto de camino es demasiado general, así que vamos a imponer algunas restricciones que darán lugar a diferentes tipos de caminos. Lo haremos fijándonos en el grafo de la figura 5. Un camino se dice que es *cerrado* si sus extremos coinciden, es decir, si empieza y termina en el mismo vértice (ej., camino $2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 2$). En caso contrario, se dice que es un camino *abierto* (ej., camino $2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5$). Un *circuito* es un camino cerrado en el cual todos los lados (aunque no necesariamente todos los vértices) son distintos (ej., camino $6 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 6$). Un *ciclo* es un camino cerrado en el cual todos los vértices (excepto el inicial y el final) son distintos y, como consecuencia, todos los lados son también distintos (ej., camino $2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 2$, camino $1 \rightarrow 2 \rightarrow 6 \rightarrow 1$).

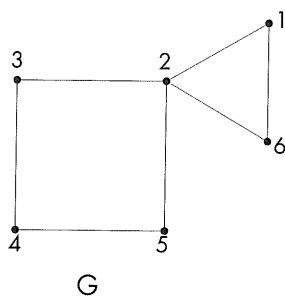


Figura 5. Grafo etiquetado G ilustrando diferentes tipos de caminos

La longitud de la vía más corta entre los vértices i y j en un grafo G se conoce como la *distancia* entre esos dos vértices y se representa por $d(i, j)$. Esta distancia d es una cantidad positiva y toma sólo valores enteros. Tiene las siguientes propiedades:

- (P1) $d(i, j) = 0 \Leftrightarrow i = j$
- (P2) $d(i, j) = d(j, i), \forall i, j \in V(G)$
- (P3) $d(i, k) \leq d(i, j) + d(j, k), \forall i, j, k \in V(G)$
- (P4) $d(i, j) = 1 \Leftrightarrow (i, j) \in E(G)$

Para el estudiante de Secundaria puede resultar muy interesante comparar estas propiedades de la *distancia topológica* con las propiedades de la distancia euclídea que estudia en la asignatura de Matemáticas.

Existen grafos donde para cada par de vértices i y j hay al menos un posible camino conectándolos y existen grafos donde no hay camino alguno conectando una determinada pareja de vértices. Si un grafo representa una red de comunicaciones es indudablemente importante conocer si existe algún camino entre una determinada pareja de vértices. Esto llevó a los matemáticos a introducir el concepto de *grafo conexo*. Si todas las parejas posibles de

vértices de un grafo G están conectados por al menos un camino, entonces se dice que G es un grafo conexo. Si no existe camino alguno entre alguna pareja de vértices i y j del grafo G , esto es, $d(i, j) = \infty$, se dice que G es un *grafo no conexo* y que los vértices i y j pertenecen a diferentes componentes del grafo. El número de componentes del grafo G lo representaremos por $k = k(G)$. En la figura 6 mostramos ejemplos de grafos de 1, 2 y 3 componentes, respectivamente.

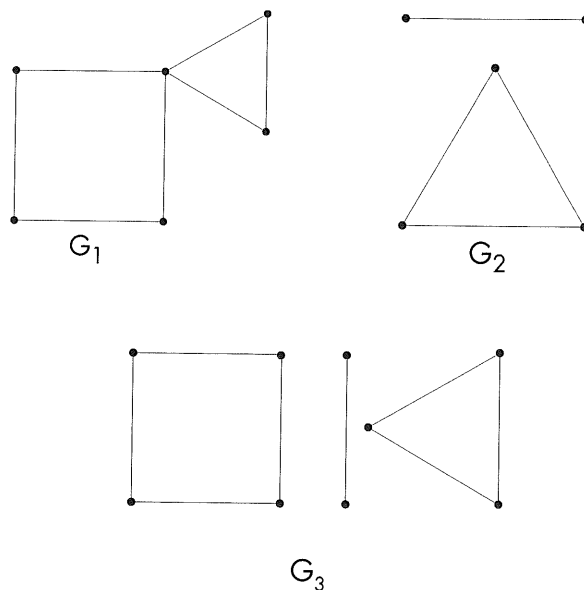


Figura 6. Representación diagramática de los grafos G_1, G_2 y G_3 , con una, dos y tres componentes de grafo, respectivamente.

Podemos observar que el grafo G_1 es un grafo conexo [$k(G_1) = 1$]. Sin embargo, los grafos G_2 y G_3 son grafos no conexos [$k(G_2) = 2, k(G_3) = 3$].

Una vez que se ha introducido el concepto de distancia en un grafo, se puede definir fácilmente la *valencia* o el *grado* de un vértice. Se define la valencia o el grado de un vértice dado i , $gr(i)$, como el número de vértices adyacentes al vértice i , es decir, el número de vértices cuya distancia al vértices i es 1. Un vértice de valencia cero se llama vértice *aislado*, por razones obvias. Un vértice de valencia uno se llama vértice *terminal*.

Representación matricial de los grafos

Los grafos también pueden ser representados mediante matrices. La ventaja de la representación matricial de un grafo es que para las matrices ha sido desarrollada toda una teoría, que nos permitirá la manipulación de las matrices para extraer cierta información característica del grafo. El estudiante puede ver así una aplicación práctica de la teoría matricial, que la primera vez que se le presenta en COU o en 2.º de Bachillerato le resulta un poco abstracta y quizás inútil.

La matriz que definiremos es la *matriz de adyacencia* de los vértices. Esta matriz también se conocen como *matriz topológica*. Es preciso advertir que para poder hacer uso de la representación matricial, al igual que ocurría con la representación algebraica, es necesario que los grafos estén etiquetados. Esta matriz contendrá exactamente la misma información que la representación algebraica del grafo, pero es mucho más manejable computacionalmente. En concreto, esta matriz goza de múltiples aplicaciones en física, química, diseño de redes...

La matriz de adyacencia de vértices $A(G)$ de un grafo etiquetado G con N nodos es la matriz cuadrada simétrica definida como

$$(A)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ y } j \text{ son adyacentes} \\ 0 & \text{si } i \text{ y } j \text{ no son adyacentes} \end{cases} \quad i \neq j$$

$$(A)_{ii} = 0$$

Por lo tanto, un elemento de la matriz genérico $(A)_{ij}$ tomará el valor 1 si y sólo si hay un lado conectando los correspondientes nodos i y j .

Consideremos como ejemplo el grafo G de la figura 4. La matriz de adyacencia de vértices $A(G)$ viene dada por

$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Podemos observar que en esta matriz es muy fácil visualizar la conectividad interna de los vértices. Podemos también observar la simetría respecto de la diagonal principal, es decir, $(A)_{ij} = (A)_{ji}$. Ello es debido a que ambos elementos de matriz nos informan de una misma realidad: que los vértices i y j están conectados por un lado.

De acuerdo a la teoría matricial, podemos calcular las potencias n -ésimas de la matriz A . Estas potencias encierran una importantísima información topológica. Así, un elemento genérico de la potencia n -ésima de la matriz A , a_{ij}^n (con $i \neq j$) es igual al número de diferentes caminos de longitud n conectando los vértices i y j . En el ejemplo que venimos considerando, las sucesivas potencias de A vienen dadas por (el estudiante puede comprobarlo):

$$A^1(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad A^2(G) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad A^3(G) = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 4 & 4 \\ 1 & 4 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Vamos a considerar, como ejemplo, el elemento a_{14} (o a_{41}) de cada una de estas tres matrices. En la primera matriz, $A^1(G)$, (que coincide con la matriz de adyacencia de los vértices) toma el valor cero, indicando que no existe ningún camino de longitud 1 conectando los vértices 1 y 4, o lo que es lo mismo, que no existe lado alguno conectando dichos vértices. Pero esto no significa que no podamos viajar del vértice 1 al vértice 4. Podemos viajar, aunque sea dando un pequeño rodeo. Así, podemos observar en la segunda matriz, $A^2(G)$, que el elemento toma el valor 2, reflejando la realidad de que existe un camino de longitud 2 que nos lleva del vértice 1 al vértice 4. Ese camino viene dado por la secuencia de vértices $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4$. Por último, cabe destacar que en la tercera matriz, $A^3(G)$, este elemento toma también el valor 1, reflejando nuevamente la existencia de un camino de longitud 3 entre los vértices 1 y 4. Este camino ahora viene dado por la secuencia $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$.

Como ejercicio, el estudiante puede tratar de fijarse en los diferentes elementos de cada una de las tres matrices anteriores para saber el número de caminos de diferente longitud entre las diferentes parejas de vértices. Una vez conocido el número de caminos, entonces puede tratar de averiguar cuáles son cada uno de estos caminos examinando el grafo. Vamos a considerar un nuevo ejemplo, ésta vez fijándonos en los vértices 1 y 2. Así, podemos ver en la primera matriz, $A^1(G)$, que el elemento a_{12} toma el valor uno. Esto significa que existe un lado o camino de longitud uno conectando estos vértices. Este camino viene dado por la secuencia de vértices $1 \rightarrow 2$. En la segunda matriz, $A^2(G)$, el elemento a_{12} toma el valor cero, reflejando la realidad de que no existe ningún camino de longitud dos conectando los citados vértices. Por último, podemos observar en la tercera matriz, $A^3(G)$, que el ele-

La ventaja de la representación matricial de un grafo es que para las matrices ha sido desarrollada toda una teoría, la cual nos permitirá la manipulación de las matrices para extraer cierta información característica del grafo.

mento a_{12} vale tres, indicándonos la existencia de tres caminos de longitud tres conectando los vértices 1 y 2. Estos caminos vienen dados, respectivamente, por las secuencias de vértices $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 2$; $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 2$; y $1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2$.

Una ampliación del concepto de grafo: grafo general

La definición de grafo dada anteriormente se corresponde con lo que algunos autores denominan *grafo simple*. En ella hemos puesto alguna restricción. Por ejemplo, hemos dicho que los elementos de E son pares no ordenados de elementos *distintos* de V . Por lo tanto, al no permitir que un elemento aparezca repetido en un mismo par, no estamos permitiendo la existencia de lazos o «loops» (aristas que empiezan y terminan en el mismo vértice). También hemos dicho que E es un *conjunto* de elementos y no una *familia* de elementos. En este contexto, entendemos por conjunto una colección de elementos distintos, y por familia una colección de elementos, algunos de los cuales pueden repetirse varias veces. De acuerdo a esta definición, todo conjunto es una familia, pero lo inverso no siempre es cierto. Así, por ejemplo, $\{1, 2, 3, 4\}$ es un conjunto y una familia, mientras que $\{1, 2, 3, 3, 4, 4\}$ es una familia, pero no un conjunto. En definitiva, al imponer que $E(G)$ sea un conjunto, estamos impidiendo que el grafo tenga más de una arista conectando una misma pareja de vértices. Existen algunas extensiones de la idea de grafo que son muy útiles y frecuentemente usadas en la vida real y las iremos examinando a continuación.

La ampliación del concepto de grafo simple surge precisamente al eliminar una o alguna de las restricciones impuestas en la definición del mismo.

Así, un *multigrafo* es un grafo con (posiblemente) varios lados entre un mismo par de vértices (lados múltiples). Por lo tanto, en la definición formal de multigrafo se permite que $E(G)$ sea una familia, es decir, que algunos elementos aparezcan repetidos (aristas con el mismo par de extremos). En la figura 7 mostramos un ejemplo de multigrafo. El conjunto de vértices y la familia de aristas vienen dados, respectivamente, por:

$$V(G) = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$E(G) = \{(1, 2), (1, 2), (2, 3), (2, 4), (3, 4)\}$$

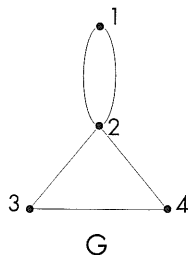


Figura 7.
Representación geométrica del multigrafo G

La ampliación del concepto de grafo simple surge precisamente al eliminar una o alguna de las restricciones impuestas en la definición del mismo.

Si eliminamos la restricción de que las aristas tengan por extremos dos vértices distintos de V , surge el concepto de *pseudografo*. Por lo tanto, al contrario que en un grafo simple, en un pseudografo están permitidas aristas que empiezan y terminan en el mismo vértice. Tales aristas se denominan *lazos* o «loops». En la figura 8 mostramos un ejemplo de pseudografo. En este caso, el conjunto de vértices y el conjunto de lados vienen dados, respectivamente, por:

$$V(G) = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$E(G) = \{(1, 1), (1, 2), (2, 3), (2, 4), (3, 4)\}$$

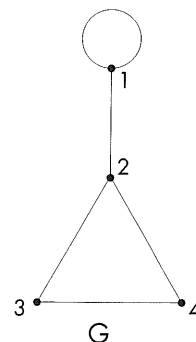


Figura 8. Representación geométrica del pseudografo G

Permitiendo la existencia de lados múltiples y de lazos, llegamos al concepto de *grafo general*. Así pues, un grafo general G puede definirse como un par ordenado $G = (V, E) = (V(G), E(G))$, donde $V(G)$ es un conjunto no vacío de elementos llamados puntos vértices o nodos y $E(G)$ una familia de pares no ordenados de elementos (no necesariamente distintos) de $V(G)$, llamados lados, líneas o aristas. Ahora, $V(G)$ se conoce como el conjunto de vértices («vertex-set») del grafo G y $E(G)$ como la familia de lados («edge-family») del grafo G . Cabe destacar que el primer grafo de la historia, el grafo representativo de la disposición de los puentes de la ciudad de Königsberg, que pronto analizaremos con detenimiento, no es un grafo simple sino un grafo general, ya que incluye múltiples lados entre algunas parejas de vértices.

Otro concepto útil es el de *digrafo* (o *grafo dirigido*). Un digrafo es una clase especial de grafos, en los cuales a las

aristas se les asigna un sentido, el cual se representa geoméricamente mediante una flecha. Se llama *origen* al primer vértice de una arista y *fin* al segundo. Algebraicamente, un digrafo D se define como un par ordenado $G = (V, A) = (V(D), A(D))$, donde $V(D)$ es un conjunto no vacío de elementos llamados puntos, vértices o nodos y $A(D)$ es una familia de (no necesariamente distintos) pares ordenados de elementos de $V(D)$ llamados *arcos* o *lados dirigidos*. A $V(D)$ se le conoce como el conjunto de vértices («vertex-set») del digrafo D y a $A(D)$ como la familia de arcos («arc-family») del digrafo D . Un arco que tiene como origen el vértice i y como fin el vértice j se representa mediante el par ordenado $[i, j]$. El lector debe observar que los elementos de $A(D)$ $[i, j]$ y $[j, i]$ son ahora diferentes. La diferencia formal entre un *grafo general* G y un *digrafo* D consiste en que los pares de vértices que definen los lados en un grafo son pares no ordenados, mientras que los pares de vértices que definen los arcos o lados dirigidos en un digrafo son pares ordenados. En la figura 9 mostramos como ejemplo los dos diferentes digrafos: los digrafos D_1 y D_2 .

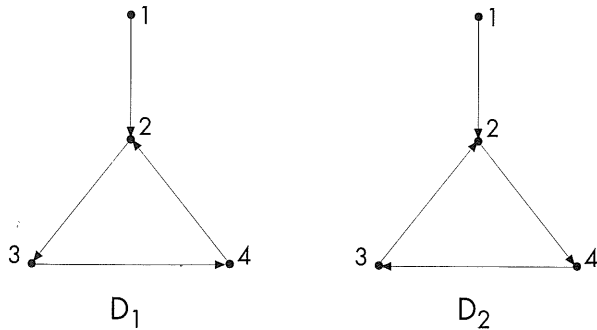


Figura 9. Representación diagramática de los digrafos D_1 y D_2

Podemos observar que aunque ambos digrafos tienen el mismo conjunto de vértices dado por

$$V(D_1) = V(D_2) = \{1, 2, 3, 4\}$$

la familia de arcos es diferente:

$$A(D_1) = \{[1, 2], [2, 3], [3, 4], [4, 2]\}$$

$$A(D_2) = \{[1, 2], [2, 4], [4, 3], [3, 2]\}$$

Finalmente, cabe advertir que en un problema concreto pueden presentárenos conjuntamente varias de las estructuras matemáticas anteriormente definidas, dando lugar a *multipseudografos*, *multidigrafos*, *pseudodigrafos* o *multipseudodigrafos*. En la figura 10 mostramos un ejemplo de multipseudografo,

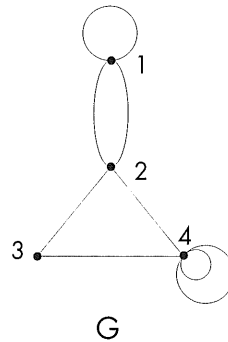


Figura 10. Representación diagramática del multipseudografo G

en el cual el conjunto de vértices y la familia de aristas vienen dados, respectivamente, por:

$$V(G) = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$E(G) = \{(1, 1), (1, 2), (1, 2), (2, 3), (2, 4), (3, 4), (4, 4), (4, 4)\}$$

Circuitos eulerianos

A continuación presentamos el problema que la mayoría de los autores señalan como el origen histórico de la teoría de los grafos.

En la figura 11 mostramos un plano de la antigua ciudad de Könisberg en la Prusia Oriental, mostrando el río Pregel que pasa por la ciudad y los siete puentes que la atravesaban en el siglo XVIII. Hemos representado mediante números del 1 al 4 las diferentes partes de la ciudad que están separadas por el río y hemos puesto etiquetas de la forma p_{ij} sobre los puentes, para reflejar que el puente p_{ij} une los sectores de la ciudad etiquetados como i y j .

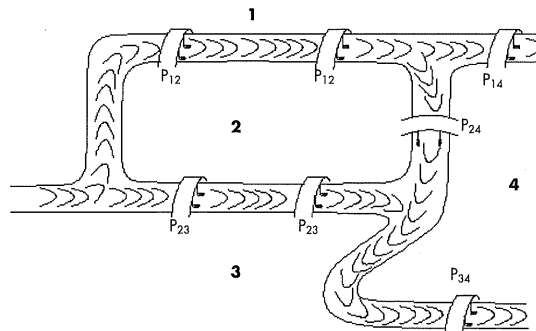


Figura 11. La disposición de los puentes en la antigua ciudad de Könisberg en el siglo XVIII

Muchos habitantes de Könisberg se plantearon el reto de encontrar una ruta en la ciudad que recorriera los siete puentes, cruzando cada uno de ellos una sola vez, y regresando al punto de partida. Puesto que todos los intentos resultaron fallidos, se comenzó a pensar que era imposible encontrar tal ruta. El problema no fue tratado matemáticamente hasta 1736 por Euler, quien escribió un artículo probando que no existía tal ruta. Para ello Euler formuló el problema en términos de la teoría de los grafos, representando el mapa de la ciudad mediante un multigrafo (ver figura 12) donde cada sector terrestre de la ciudad venía representado por un vértice y cada puente por una arista.

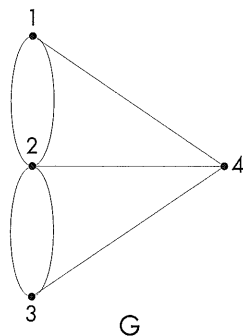


Figura 12. Representación geométrica de un multigrafo histórico: el multigrafo de Euler, el cual simboliza la disposición de los siete puentes de la ciudad de Könisberg

Una vez traducido este problema al lenguaje de la teoría de grafos, Euler trató de encontrar una respuesta al mismo, como caso particular, y al caso más general de un grafo cualquiera. Así se planteó el problema: ¿En que grafos es posible encontrar una *ruta* que recorra todas las aristas una sola vez y vuelva al punto de partida?

Dado un determinado vértice del grafo, si tiene valencia par, digamos $2n$, podremos salir de él y regresar a él n veces sin repetir arista. Sin embargo, si el vértice tiene valencia impar, digamos $2n + 1$, podremos salir de él y regresar a él n veces sin repetir arista. Esto contabiliza $2n$ aristas, por lo que siempre nos quedará forzosamente una arista por recorrer que nos separará del vértice en cuestión. Hecha esta observación, el estudiante puede plantearse las condiciones que han de cumplirse para que exista una ruta con las condiciones impuestas anteriormente (salir de un vértice, recorrer una sola vez todas las aristas y regresar al vértice de partida). Tras un poco de reflexión, quizás pueda llegar a las siguientes conclusiones a las que en su día llegó Euler:

- Si todos los vértices del grafo tienen valencia par, es decir, tienen un número par de aristas incidentes, se puede recorrer el grafo de una sola pasada y volver al punto de partida. En este caso, la ruta o circuito seguidos se denominan *eulerianos* y al grafo en cuestión se le denomina grafo *euleriano*.

Euler formuló el problema [de los puentes de Könisberg] en términos de la teoría de los grafos, representando el mapa de la ciudad mediante un multigrafo donde cada sector terrestre de la ciudad venía representado por un vértice y cada puente por una arista.

- Si el grafo tiene dos vértices con un número impar de aristas concurrentes, se le puede recorrer partiendo de uno de estos vértices y llegando al otro. A la ruta seguida en este caso se le denomina *ruta semieuleriana* y al grafo correspondiente grafo *semieuleriano*. El motivo de esta denominación resulta bastante obvio. No se cumplen todas las condiciones requeridas por Euler, sino sólo la mitad. Así, se recorren todas las aristas del grafo una sola vez (requisito exigido por Euler), pero no se vuelve al punto de partida (condición también exigida por Euler), sino que se comienza en un punto y se termina en otro.
- Si el grafo tiene más de dos vértices con un número impar de aristas concurrentes, el problema no tiene solución. El grafo en cuestión es un grafo no euleriano.

Si nos fijamos en el multigrafo representativo de la red de puentes de la ciudad de Könisberg (figura 12), podemos observar que los cinco vértices del multigrafo tienen grado impar. Por lo tanto, el problema no tiene solución, como en su día concluyó Euler. Así pues: «No existe una ruta en la ciudad de Könisberg que permita comenzar en un punto, recorrer una única vez los siete puentes de la ciudad, y regresar al punto de partida». Pero aún podemos ir más allá: «Ni tan siquiera existe una ruta que, comenzando en un punto determinado, recorra los siete puentes de la ciudad y termine en otro punto diferente». Este es el histórico problema conocido mundialmente por los matemáticos como el problema de los puentes de Könisberg. En la actualidad Könisberg es la ciudad lituana de Kaliningrado y el río Pregel es llamado Pregolya. Sobre ella se han construido dos puentes, no existentes en la época de Euler, para permitir una solución positiva al histórico problema (ver figura 13).

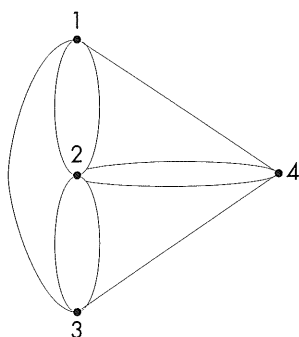


Figura 13. La disposición actual de los puentes en Kaliningrado (la antigua ciudad de Königsberg)

Si observamos el multigrafo de la figura 13 vemos como ahora todos los vértices tienen grado par. Por lo tanto, dicho grafo admite un circuito euleriano. Una posible ruta sería $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 1$. Así pues, el problema de los puentes de la nueva ciudad de Kaliningrado tiene ahora una solución positiva: «Podemos recorrer los nueve puentes de la ciudad una única vez, partiendo de un determinado punto y regresando finalmente al mismo punto». Muchos turistas, sobre todo matemáticos curiosos, acuden cada día a dicha ciudad para darse un *paseo euleriano* por la misma. Sin duda alguna, la construcción de dos nuevos puentes, ha sido una buena inversión para potenciar el turismo en la ciudad.

La respuesta dada por Euler al problema de los puentes de Königsberg es de una utilidad sin límites, pues no sólo responde a ese interrogante concreto planteado por los habitantes de la ciudad de Königsberg, sino que crea las herramientas necesarias para abordar el mismo tipo de problema con cualquier otro grafo. Pero la grandeza de este problema no sólo reside en el mismo, sino en que gracias a él nació y creció esa maravillosa disciplina que hoy conocemos como *teoría de los grafos*. Si este problema no hubiese caído en las manos y el ingenio de Euler, un hombre que con tan sólo 20 años ya había sido invitado a ingresar en la entonces

*Hoy en día,
y cada vez más,
se buscan rutas
óptimas
de transporte,
se diseñan
redes,...*
*Si un
determinado
grafo admite
un recorrido
euleriano,
esa es sin lugar
a dudas
la ruta óptima
de transporte.*

prestigiosa Academia Rusa de las Ciencias, un hombre que tenía amplios conocimientos de Teología, Medicina, Matemáticas, Física y Astronomía, además de dominar todas las lenguas orientales, quizás hoy no podríamos regocijarnos y disfrutar de esta maravillosa teoría. ¡Muchas gracias, Sr. Euler!

El dibujar rutas eulerianas constituye un entretenimiento que quizás resulte familiar a muchos estudiantes de Secundaria que estén familiarizados con pasatiempos matemáticos. En dichos pasatiempos se les pide encontrar la forma de dibujar una cierta figura usando una sola línea continua, sin repeticiones y sin levantar el lápiz del papel. Por ello, ésta puede ser una buena oportunidad para que el profesor de Matemáticas les plantee a sus alumnos de Secundaria alguno de estos pasatiempos durante la clase de Matemáticas o durante algún Taller de Matemáticas. Así, al mismo tiempo que les propone alguno de estos pasatiempos, puede ir familiarizándoles con algunos conceptos básicos de la teoría de los grafos, que le podrán ser muy útiles para futuros estudios. El estudiante podrá sentirse motivado porque verá que existen ciertas estrategias para abordarlos, que probablemente no conociera. Así, por ejemplo, podrá aprender que si existen más de dos vértices impares el problema no tiene solución, o que si existen sólo dos vértices impares, uno de ellos ha de ser el vértice de salida y otro el de llegada. En la figura 14 mostramos una serie de grafos y proponemos al estudiante que trate de encontrar una ruta euleriana o semieuleriana, si es que existe. En la tabla 1 presentamos la solución a estos pasatiempos.

A pesar de que el problema de búsqueda de una ruta euleriana o semieuleriana puede usarse con fines lúdicos como un divertido pasatiempo, tal como acabamos de exponer, éste no debe de hacernos olvidar que tiene una tremenda importancia práctica. Hoy en día, y cada vez más, se buscan rutas óptimas de transporte, se diseñan redes,... Si un determinado grafo admite un recorrido euleriano, esa es sin lugar a dudas la ruta óptima de transporte. Podemos pensar, por ejemplo, en un viejo problema muy conocido en la literatura matemática: el *problema del cartero chino*. Se trata de encontrar una ruta óptima para un cartero que ha de recorrer las diferentes calles de una ciudad. Este problema se puede formular en términos de la teoría de los grafos. Las diferentes calles pasarían entonces a desempeñar el papel de los lados del grafo. Si el grafo es euleriano o semieuleriano, está claro que la ruta óptima sería aquella que recorriera todas las calles una sola vez. Y muchos otros problemas similares al del cartero chino se nos pueden plantear en la vida cotidiana. Por ejemplo, imaginemos una exposición de pinturas. Los organizadores de estos eventos tratan normalmente de colocar las pinturas a lo largo de diferentes galerías de tal forma que el visitante pueda verlas todas, sin pasar dos

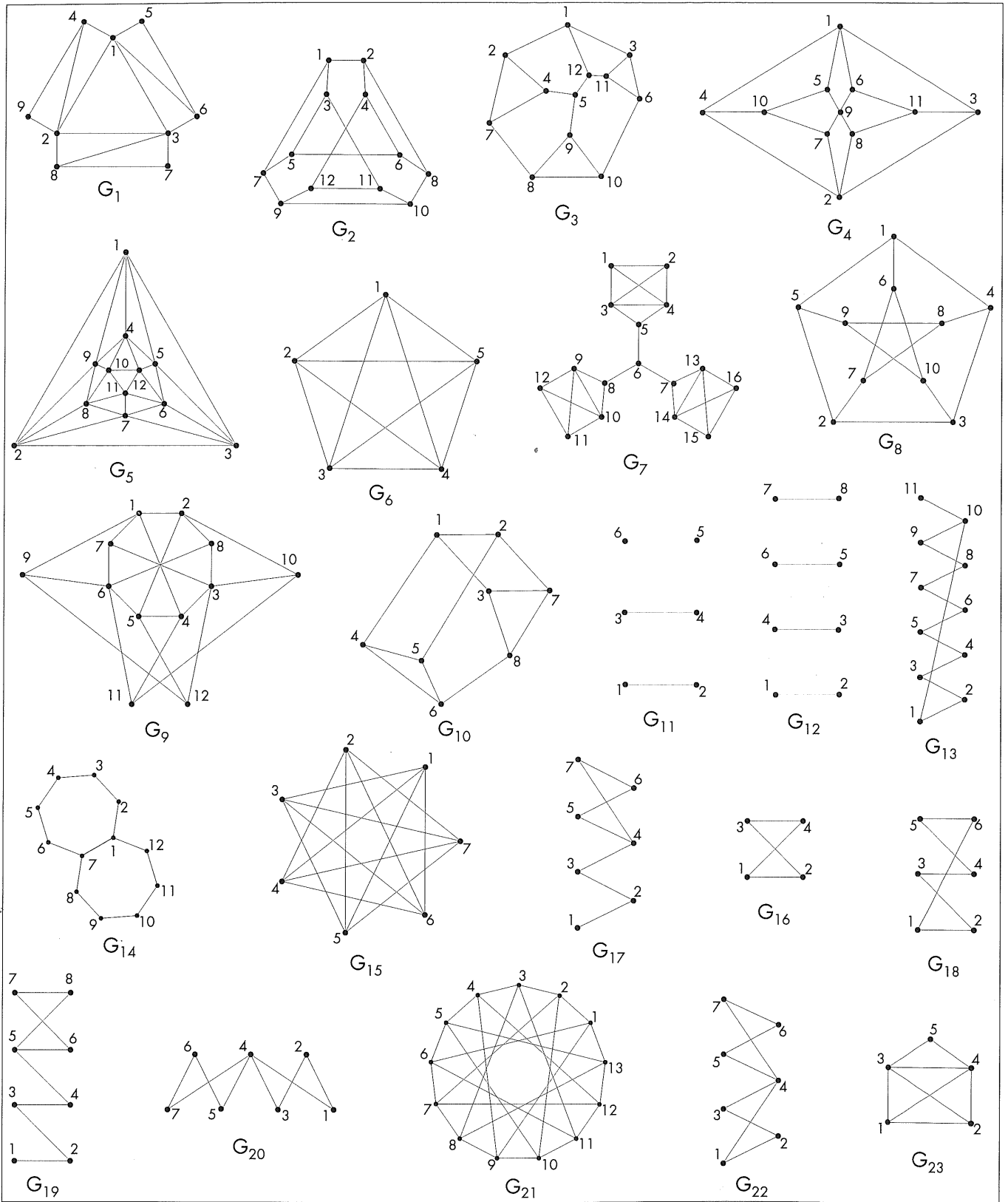


Figura 14. Una colección de grafos

veces por las mismas pinturas y regresando al punto de partida. En definitiva, tratan de colocar las pinturas en una disposición adecuada para que puedan ser contempladas siguiendo un circuito euleriano. La policía, cuando tiene que patrullar una determinada red de carreteras, trata de seguir una vía euleriana o semiuleriana si es que existe. Esa es la forma de garantizarse el recorrer todas las carreteras una sola vez en cada ronda. Y como estos, podríamos mostrar una multitud de ejemplos más, pero tampoco es el objetivo de este artículo. Simplemente queremos concienciar al lector que el diseño de vías eulerianas no es un puro pasatiempo matemático, sino que goza de multitud de aplicaciones en la vida real.

Ciclos hamiltonianos

En 1856, el astrónomo y matemático irlandés Willian Rowan Hamilton presentó al mundo el siguiente puzzle. El juego estaba basado en un dodecaedro regular, uno de los conocidos sólidos platónicos regulares. Este poliedro tiene 12 caras, cada una de las cuales es un pentágono regular, y en cada uno de sus 20 vértices confluyen tres aristas de los pentágonos. Cada vértice del dodecaedro de Hamilton se marcaba con el nombre de una ciudad importante en aquella época: París, Londres... El juego consistía en salir de una determinada ciudad (vértice del dodecaedro), encontrar una ruta a lo largo de las aristas del dodecaedro que pasase por cada ciudad una única vez y regresar a la ciudad de partida. Con objeto de hacer más interesante el desafío, se estipulaban de antemano unas cuantas ciudades que debían de ser visitadas en los primeros movimientos. Para recordar más fácilmente qué ciudades se habían visitado, se colocaba un alfiler en cada vértice, para que se pudiese arrollar un hilo alrededor de los alfileres a medida que el viaje iba progresando. El dodecaedro era un tanto incómodo de manipular por lo que Hamilton desarrolló una versión

...el diseño de vías eulerianas no es un puro pasatiempo matemático, sino que goza de multitud de aplicaciones en la vida real.

del juego, en la que reemplazaba el dodecaedro por un grafo con 20 vértices unidos entre sí mediante 30 aristas de la misma forma que en el dodecaedro (ver figura 15). El grafo resultante se conoce como *grafo del dodecaedro* y es uno de los cinco grafos platónicos existentes.

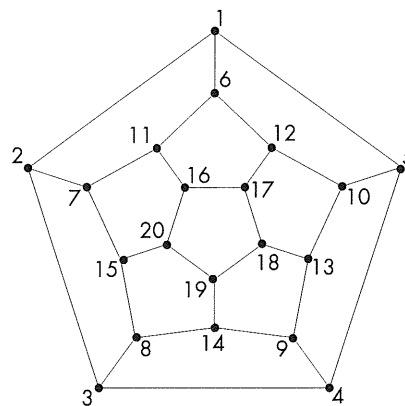


Figura 15. Juego de Hamilton: el grafo del dodecaedro

Dado un determinado grafo, si existe algún camino en el mismo que verifique las condiciones anteriormente expuestas (pasar por cada vértice una única vez y regresar al punto de partida) se conoce como *ciclo hamiltoniano*.

Un posible ciclo hamiltoniano para el grafo del dodecaedro es

$$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 10 \rightarrow 12 \rightarrow 17 \rightarrow 16 \rightarrow 20 \rightarrow 19 \rightarrow 18 \rightarrow 13 \rightarrow 9 \rightarrow 14 \rightarrow 8 \rightarrow 15 \rightarrow 7 \rightarrow 11 \rightarrow 6 \rightarrow 1$$

Pero cabe advertir que éste no es el único ciclo hamiltoniano posible. Otro posible sería

$$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 10 \rightarrow 13 \rightarrow 9 \rightarrow 14 \rightarrow 8 \rightarrow 15 \rightarrow 7 \rightarrow 11 \rightarrow 16 \rightarrow 20 \rightarrow 19 \rightarrow 18 \rightarrow 17 \rightarrow 12 \rightarrow 6 \rightarrow 1$$

En total, hay 60 posibles ciclos hamiltonianos diferentes. Como ejercicio para el Taller de Matemáticas, el estudiante puede tratar de encontrar los restantes.

Al igual que sucedía con los grafos eulerianos, a los grafos que admitan recorrer todos sus vértices mediante un ciclo hamiltoniano, se les denomina *grafos hamiltonianos*.

Al presentársenos por primera vez el concepto de grafo hamiltoniano, quizás encontremos cierto parecido con el problema de Euler de los puentes de Königsberg. Al fin y al cabo se trata de encontrar una determinada ruta, sujeta a ciertos requisitos. Sin embargo, los requisitos ahora son diferentes. En el problema de los grafos eulerianos, se trataba de encontrar una ruta que pasara por cada lado del grafo una sola vez. Ahora, sin embargo, se trata de encontrar una ruta que pase por cada vértice del grafo una única vez.

A pesar de la desesperada lucha de los matemáticos, no existe hoy en día teorema alguno (como ocurría con los grafos eulerianos) que nos permita determinar si un grafo

G	Tipo	Circuito euleriano o ruta semieuleriana/ Ciclo hamiltoniano
G ₁	NE H	1 → 4 → 9 → 2 → 8 → 7 → 3 → 6 → 5
G ₂	NE H	1 → 2 → 4 → 6 → 8 → 10 → 11 → 12 → 9 → 7 → 5 → 3 → 1
G ₃	NE NH	1 → 2 → 4 → 7 → 8 → 10 → 9 → 5 → 12 → 11 → 6 → 3 → 1
G ₄	NE H	— —
G ₅	NE H	1 → 2 → 3 → 5 → 6 → 7 → 8 → 9 → 10 → 11 → 12 → 4 → 1
G ₆	E H	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 1 → 3 → 5 → 2 → 4 → 1 1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 1
G ₇	NE NH	— —
G ₈	NE NH	— —
G ₉	NE H	1 → 7 → 6 → 9 → 12 → 5 → 4 → 11 → 10 → 3 → 8 → 2 → 1
G ₁₀	NE H	1 → 2 → 5 → 4 → 6 → 8 → 7 → 3 → 1
G ₁₁	NE NH	— —
G ₁₂	NE H	1 → 2 → 4 → 3 → 7 → 8 → 6 → 5 → 1
G ₁₃	SE NH	11 → 10 → 9 → 8 → 7 → 6 → 5 → 4 → 3 → 2 → 1 → 10 —
G ₁₄	SE H	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 8 → 9 → 10 → 11 → 12 → 1 → 7 1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 8 → 9 → 10 → 11 → 12 → 1
G ₁₅	E H	5 → 7 → 3 → 6 → 2 → 7 → 4 → 6 → 1 → 3 → 5 → 1 → 4 → 2 → 5 1 → 3 → 5 → 7 → 2 → 4 → 6 → 1
G ₁₆	E H	1 → 2 → 3 → 4 → 1 1 → 2 → 3 → 4 → 1
G ₁₇	SE NH	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 4 —
G ₁₈	E H	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 1 1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 1
G ₁₉	SE H	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 8 → 5 —
G ₂₀	SE NH	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 4 → 1 —
G ₂₁	E H	1 → 6 → 11 → 3 → 8 → 13 → 5 → 10 → 2 → 7 → 12 → 4 → 9 → 1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 8 → 9 → 10 → 11 → 12 → 13 → 1 1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 8 → 9 → 10 → 11 → 12 → 13 → 1
G ₂₂	E NH	1 → 2 → 3 → 4 → 5 → 6 → 7 → 4 → 1 —
G ₂₃	SE H	1 → 2 → 3 → 4 → 1 → 3 → 5 → 4 → 2 1 → 2 → 4 → 5 → 3 → 1

Tabla 1. Clasificación de los grafos de la figura 14 en eulerianos (E), semieulerianos (SE) o no eulerianos (NE) y en hamiltonianos (H) o no hamiltonianos (NH) y rutas correspondientes, si existen.

es o no hamiltoniano. El método de ensayo y error (que puede realizarse mediante ordenadores para acelerar el proceso) es la única forma posible de tratar de encontrar una respuesta al problema.

Como pasatiempo matemático, el estudiante puede tratar de buscar un ciclo hamiltoniano, si es que existe, para cada uno de los grafos de la figura 14 y de acuerdo con ello clasificar el grafo analizado. En la tabla 1 se exponen las soluciones a este pasatiempo.

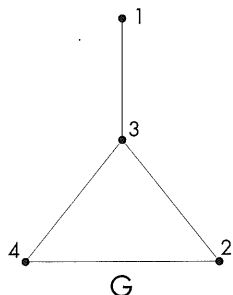
Primer Teorema de la Teoría de Grafos

Este teorema dice lo siguiente: «La suma de las valencias de todos los vértices de un grafo G es el doble del número de lados del grafo G». Esto se debe a que al sumar las valencias de todos los vértices, contamos dos veces cada lado.

$$\sum_{i=1}^N \text{gr}(i) = 2|E(G)|$$

Un corolario que se deduce inmediatamente de este teorema es que el número de vértices de grado o valencia impar ha de ser cero o un número par, ya que es la única manera posible de obtener un número par al sumar las valencias de todos los vértices.

Un ejemplo ilustrando este teorema se muestra en la figura 16.



$$\sum_{i=1}^N \text{gr}(i) = 1 + 3 + 2 + 2 = 2 \cdot 4$$

Figura 16. Un ejemplo ilustrando el «primer teorema de la teoría de los grafos». Los números en los vértices del grafo representan ahora la valencia de los mismos

Una aplicación a la Química: los grafos moleculares

Es precisamente la posibilidad de poder representar a los grafos mediante diagramas la que hace que sean muy utilizados como modelos estructurales en la ciencia. En particular, es muy frecuente su utilidad en la Química (Balaban, 1976 y Trinajstić, 1977). De hecho, el término grafo fue sugerido por Silvester para referirse a la fórmula estructural de un compuesto. Y es que es difícil encontrar algo en la ciencia que se asemeje tanto a un grafo como la fórmula estructural de un compuesto químico. Tales grafos se denominan *grafos moleculares*. En un grafo molecular (Ballaban, 1976), los vértices representan a los átomos y los lados a los enlaces químicos que conectan ciertas parejas de átomos. Es decir, los átomos de la molécula constituyen el conjunto V. Algunos de estos pares de átomos se encuentran enlazados. El conjunto de todos los pares de átomos que forman enlace químico constituye el conjunto E. En los grafos moleculares, suelen suprimirse los átomos de hidrógeno, ya que esto simplifica el grafo y no da lugar a ambigüedad. Estos grafos se denominan «grafos moleculares con los hidrógenos suprimidos» o «esqueletos del grafo». Como ejemplo, consideremos una molécula muy familiar a la comunidad química: la molécula de ciclohexano, de fórmula empírica C_6H_{12} (ver figura 17).

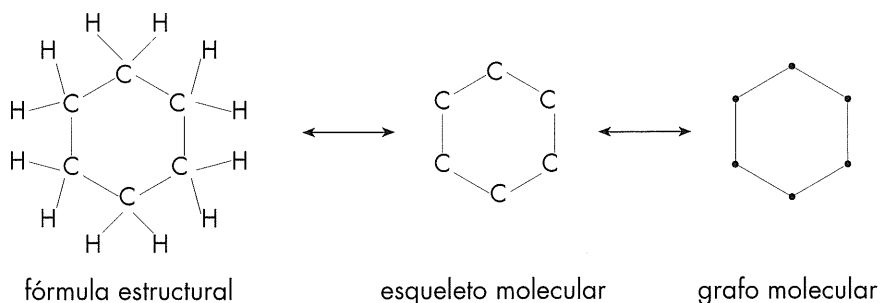


Figura 17. Obtención del esqueleto del grafo molecular del ciclohexano

La Teoría de los Grafos se ha usado mucho en la Química para contar *isómeros*. Por isómeros entendemos moléculas con la misma fórmula empírica (y por lo tanto, con el mismo peso molecular), pero diferente fórmula estructural. En la figura 18 mostramos dos moléculas con la misma fórmula empírica (C_3H_7OH) pero diferente fórmula estructural (diferente conectividad de los átomos o diferente red de enlaces).

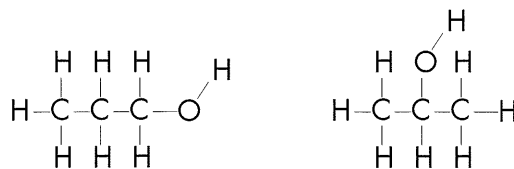


Figura 18. Los dos compuestos de fórmula estructural C_3H_7OH .

Las diferencias en la fórmula estructural conllevan diferentes propiedades físicas y/o químicas para estos compuestos. De hecho, también se pueden definir los isómeros como aquellos compuestos químicos con idéntica fórmula empírica que se diferencian en alguna propiedad física y/o química. El término isomerismo proviene de 1830 y fue introducido por Berzelius. Para los químicos tiene mucho interés conocer los diferentes isómeros hipotéticos posibles para cada fórmula empírica. Algunos de éstos isómeros quizás no existan en la realidad porque no son estables. De hecho, existen compuestos químicos que no tienen isómeros. Tales compuestos se denominan *unímeros*. No obstante, nunca está de más el saber todo el espectro posible de isómeros de un determinado compuesto químico. Por eso se han desarrollado a lo largo de la historia diferentes y fascinantes métodos de enumeración que usan conjuntamente la teoría de los grafos, la teoría de grupos y la combinatoria. No es el objetivo de este artículo examinar todos estos métodos, sino simplemente exponer unos materiales que puedan servir en el aula para que el estudiante pruebe su imaginación tratando de generar los diferentes isómeros de una serie de compuestos químicos. Esto le servirá para ver una nueva aplicación práctica de la teoría de los grafos, al mismo tiempo que le servirá para ir afianzándose en sus conocimientos químicos.

Vamos a tratar de generar los isómeros más sencillos: los de los hidrocarburos. Los hidrocarburos son unas sustancias químicas, como el petróleo y la parafina, cuyas moléculas están formadas exclusivamente por átomos de carbono e hidrógeno. Al estudiar las formas en que éstos pueden combinarse, los científicos han demostrado que los átomos de carbono se comportan como si tuvieran cuatro brazos (valencia 4), mientras que los de hidrógeno lo hacen como si sólo tuvieran uno (ver figura 19).



Figura 19. El átomo de carbono (valencia 4) y el átomo de hidrógeno (valencia 1)

Para formar una molécula, un cierto número de átomos de carbono se juntan «dándose la mano», de manera que no quede ningún átomo aislado. En la figura 20 mostramos dos formas posibles de estrechar sus manos tres átomos de carbono.

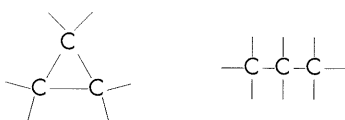


Figura 20. Dos posibles formas de combinar tres átomos de carbono para formar el esqueleto de la molécula

Una vez que los átomos de carbono se han dado la mano entre sí de una determinada manera, los átomos de hidrógeno ya están condicionados. Cada átomo de hidrógeno ha de dar su única mano a alguna mano libre de los carbonos (ver figura 21).

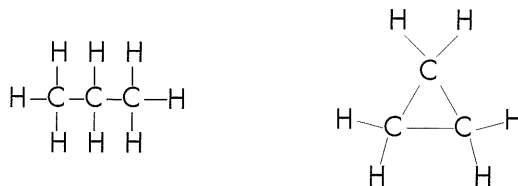


Figura 21. Fórmula estructural (incluyendo explícitamente los átomos de hidrógeno) de dos hidrocarburos

...se han desarrollado a lo largo de la historia diferentes y fascinantes métodos de enumeración [de polímeros] que usan conjuntamente la teoría de los grafos, la teoría de grupos y la combinatoria.

Por eso decimos, que la representación de las moléculas sin átomos de hidrógeno no encierra ninguna pérdida de información estructural ni da lugar a ambigüedad alguna. El químico es consciente de que los brazos libres de los átomos de carbono están enlazados («dándose la mano») a átomos de hidrógeno, aunque estos últimos no aparezcan explícitamente.

La familia de hidrocarburos menos compleja es la de los alcanos. Estos compuestos están formados por átomos de carbono y de hidrógeno unidos entre sí mediante enlaces simples (no hay más que un cruce de manos entre cada pareja de átomos unidos). Dentro de los alcanos, los más sencillos son los acíclicos, entendiéndose como tal aquellas disposiciones de átomos de carbono que no se repliegan formando ciclos. Estos compuestos tienen como fórmula empírica C_nH_{2n+2} , siendo n el número de átomos de carbono. A continuación mostraremos los diferentes isómeros posibles que se pueden generar para los valores más pequeños de n . Para simplificar, mostraremos el grafo molecular con los hidrógenos suprimidos para cada uno de los diferentes compuestos que aparezcan.

Los tres primeros miembros de esta familia son el metano, CH_4 , el etano,

C_2H_6 , y el propano, C_3H_8 . Son todos ellos unímeros. A partir de aquí, al ir aumentando el número de átomos de carbono, ya nos encontramos con diferentes isómeros (al menos, isómeros teóricos posibles) para cada fórmula empírica. Así, hay 2 posibles grafos moleculares diferentes con fórmula empírica C_4H_{10} , 3 posibles grafos moleculares con fórmula empírica C_5H_{12} , 5 posibles grafos moleculares con fórmula empírica C_6H_{14} y 9 posibles grafos moleculares con fórmula empírica C_7H_{16} . Una interesante y, al mismo tiempo, divertida tarea para el aula sería proponer al estudiante que intente encontrar los diferentes grafos moleculares representativos de los diferentes isómeros de cada serie. Hay que advertirle previamente, no obstante, de no contar como diferentes dos estructuras moleculares que en realidad sean la misma. En la figura 22 mostramos como ejemplo dos estructuras moleculares iguales.



Figura 22. Dos grafos isomorfos (misma red de enlaces o misma relación de conectividades)

Aunque la disposición de los átomos de carbono en las figuras siguientes pueda, en principio, parecer distinta, si se mira detenidamente podrá comprobarse de que la red de enlaces es la misma: «cada átomo está dando la mano a los mismos compañeros». Para que dos grafos moleculares sean diferentes deben pues de diferenciarse en la conectividad de los átomos. La diferente disposición de los átomos en el espacio no es relevante en la teoría de los grafos, ya que esta teoría está referida a un espacio topológico, donde la única propiedad de interés es la conectividad entre los elementos de un conjunto. En las figuras 23, 24, 25 y 26 mostramos los isómeros del butano, pentano, hexano

y heptano, respectivamente, para que el estudiante pueda comprobar si ha realizado bien el ejercicio que acabamos de proponerle.



Figura 23. Los isómeros del butano (fórmula empírica C_4H_{10})



Figura 24. Los isómeros del pentano (fórmula empírica C_5H_{12})

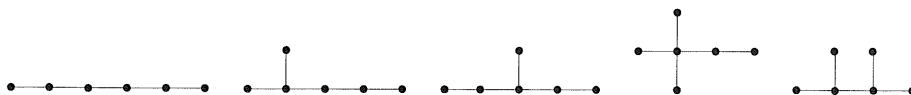


Figura 25. Los isómeros del hexano (fórmula empírica C_6H_{14})

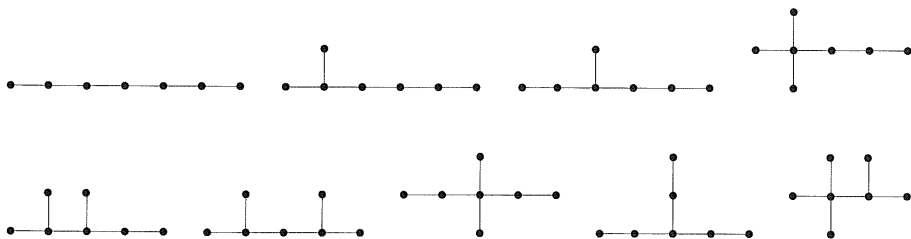


Figura 26. Los isómeros del heptano (fórmula empírica C_7H_{16})

Bibliografía

- AVONDO-BODINO, G. (1962): *Economic Applications of the Theory of the Graphs*, Gordon & Breach, New York.
- BALABAN, A. T. (Ed.) (1976): *Chemical Applications of Graph Theory*, Academic Press, London.
- Biggs, N. L. (1974): *Algebraic Graph Theory*, Cambridge University Press, Cambridge.
- BUJALANCE, E. y otros (1993): *Elementos de Matemática Discreta*, Editorial Sanz y Torres.
- CAPRA, F. (1979): *Am. J. Phys.*, 47, 11.
- CARTWRIGHT, D. y F. HARAY (1963): *Psychol. Rev.*, 63, 277.

CULIK, K. (1964): *Application of Graph Theory to Mathematical Logic and Linguistics*, Czechoslovak Academy of Sciences, Prague.

DIAS, J. R. (1993): *Molecular Orbital Calculations Using Chemical Graph Theory*, Springer-Verlag, Berlín.

EVEN, S. (1979): *Graph Algorithms*, Pitman, London.

FLAMENT, C. (1963): *Applications of Graph Theory to Group Structure*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

HAGE, P. y F. HARAY (1983): *Structural Models in Anthropology*, Cambridge University Press, Cambridge.

HARAY, F. (1967): *Graph Theory and Theoretical Physics*, Academic Press, New York.

JOHNSON, D. E. y J. R. JOHNSON (1972): *Graph Theory with Engineering Applications*, Ronald Press, New York.

KÖNIG, D. (1936): *Theorie der endlichen und unendlichen Graphen*, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig.

KORACH, M. y L. HASKÓ (1972): *Acta Chem Acad. Sci. Hung.*, 72, 77.

LISSOWSKY, A. (1971): *Acta Protozool.*, 11, 131.

MATTUCK, R. D. (1967): *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, McGraw-Hill, New York.

ORE, O. (1995): *Grafos y sus aplicaciones*, DLS-EULER, Madrid.

ROBERTS, F. (Ed.) (1989): *Applications of Combinatorics and Graph Theory to the Biological and Social Sciences*, Springer-Verlag, New York.

TRINAJSTIC (1977): *Semiempirical Methods of Electronic Structure Calculation. Part A. Techniques. Vol. 7. Modern Theoretical Chemistry*, G. A. Segal, Ed. Plenum Press, New York.

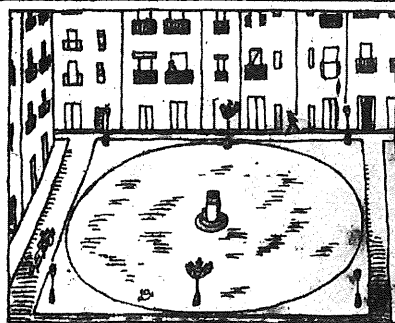
Amador Menéndez
Universidad de Oviedo

N.º 128. Dentro de una plaza de forma cuadrada, que tiene 50 m. de lado, se ha trazado un círculo de 42 m. de diámetro. ¿Cuál es la superficie que ha quedado fuera del círculo?

$$50 \times 50 = 2500 \text{ m}^2$$

$$3'14 \times 21^2 = 1384'75 \text{ m}^2$$

$$2500 - 1384'75 = 115'26 \text{ m}^2 \text{ que quedan fuera del círculo.}$$



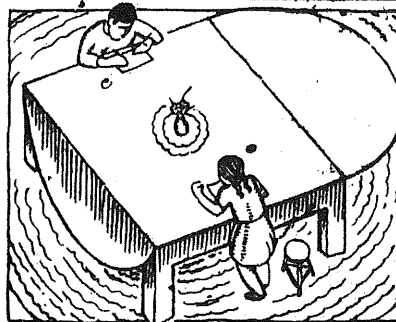
N.º 129. Una mesa cuadrada, de 2 metros de lado, tiene dos prolongaciones semicirculares, una a cada parte. ¿Cuál es la superficie total de la mesa?

$$2^2 = 4 \text{ m}^2$$

$$3'14 \times 1^2 = 3'14$$

$$4 + 3'14 = 7'14 \text{ m}^2$$

que mide la mesa



CÁLCULO
MENTAL

Núm. 45

Multiplicar dos números comprendidos entre 10 y 20. Se suma uno de los números con las unidades del otro, se multiplica por 10 y se añade el producto de las unidades de ambos.

$$16 \times 12 = (16 + 2) \times 10 + (2 \times 6) = 180 + 12 = 192$$