

# APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA NA RESOLUÇÃO DE CONJECTURAS EM TEORIA DE GRAFOS

A. FRANZEN, J. P. GARLOPA, J. V. COLOMBINI, R. DOS SANTOS

RESUMO. Nestas notas, nós apresentamos de maneira detalhada alguns conceitos da Teoria de Grafos que são necessários para entender algumas conjecturas apresentadas no artigo “*Constructions in combinatorics via neural networks*” de Adam Wagner.

## 1. INTRODUÇÃO

No artigo [1], Adam Wagner utiliza ferramentas de aprendizado de máquina para construir contraexemplos para algumas conjecturas em teoria dos grafos. O principal objetivo destas notas é apresentar os conceitos teóricos necessários para compreender algumas das conjecturas resolvidas nesse trabalho de A. Wagner.

A ideia geral do método utilizado por A. Wagner consiste em treinar uma rede neural para decidir se uma determinada aresta deve ou não ser adicionada a um grafo, de modo que o grafo resultante se aproxime de um contraexemplo para uma certa conjectura. Para isso, fixa-se inicialmente uma conjectura e constrói-se uma função que avalia o quão próximo um grafo está de ser um contraexemplo para ela. Por exemplo, para a Conjectura 3.1 (apresentada em detalhes na Seção 3), desejamos mostrar que existem grafos tais que

$$\lambda_1 + \mu < \sqrt{n-1} + 1.$$

Assim, quanto maior for o valor de  $\sqrt{n-1} + 1 - \lambda_1 - \mu$ , mais próximo o grafo estará de ser um contraexemplo para essa conjectura. De fato, todo contraexemplo terá um valor positivo de  $\sqrt{n-1} + 1 - \lambda_1 - \mu$ . As funções que avaliam o quão próximo um grafo está de ser um contraexemplo para uma conjectura são chamadas de **score**.

Após fixar uma conjectura e definir uma função **score**, fixa-se também o número  $n$  de vértices dos grafos que serão analisados. Por exemplo, no caso da Conjectura 4.1 (apresentada em detalhes na Seção 4), o contraexemplo encontrado em [1] possui 203 vértices. Assim, para abordar essa conjectura, precisaríamos escolher  $n = 203$  (ou maior), o que é computacionalmente pesado.

Portanto por conta de uma conjectura ser mais simples que a outra, a ordem de teste e validação vai de primeiro fazer a Primeira conjectura e posteriormente a segunda. Dessa forma, com a primeira conjectura fixada, a função **score** definida e o número  $n$  de vértices fixado, A. Wagner treina uma rede neural para decidir se uma determinada aresta deve ou não ser adicionada a um grafo. Para isso, inicia-se com o grafo trivial de  $n$  vértices (sem arestas). A partir desse grafo trivial, diversos grafos são gerados pela rede neural. Observe que, inicialmente, quando a rede neural ainda não foi treinada, os grafos gerados serão, de certa forma, aleatórios. Em seguida, calcula-se o **score** de cada grafo gerado e apenas aqueles com os melhores valores de **score** são utilizados para treinar a rede neural.

O processo descrito no parágrafo anterior é então repetido diversas vezes até que um contraexemplo seja encontrado ou até que um certo tempo limite seja atingido. Observe que, a cada repetição, a rede neural aprimora sua capacidade de construir grafos com **scores** melhores, já que ela é treinada com os melhores exemplos produzidos até então. Assim, espera-se que, caso exista um contraexemplo para a conjectura com  $n$  vértices, ele eventualmente seja construído na etapa de geração de grafos de uma iteração desse processo.

Nas próximas seções, apresentaremos os conceitos da teoria dos grafos necessários para compreender os enunciados de três conjecturas resolvidas em [1]. Os conceitos de aprendizado de máquina serão estudados em outras notas.

## 2. CONCEITOS BÁSICOS

Nessa seção, vamos apresentar e exemplificar alguns conceitos básicos relacionados a grafos que serão usados nas próximas seções. Para começar, vamos definir o que são *grafos*.

Intuitivamente, grafos são diagramas que consistem em um conjunto de pontos (chamados de vértices), com alguns desses pontos unidos por linhas (chamadas de arestas). Esses diagramas são usados para abstrair e analisar diversas estruturas, como, por exemplo, redes sociais, moléculas e ruas de cidades.

**2.1. Fundamentos.** Nessa seção, nós apresentaremos a definição de grafos e ilustraremos essa definição com exemplos. Para definir um grafo formalmente, precisaremos de um conceito prévio.

Dado um conjunto  $V$  não vazio, lembre que o produto cartesiano de  $V$  com ele mesmo é o conjunto definido por:

$$V \times V = \{(v, w) \mid v, w \in V\}.$$

Nesse conjunto  $V \times V$ , considere a relação de equivalência dada por:

$$(v, w) \sim (w, v) \quad \text{para todos } v, w \in V.$$

O conjunto de classes de equivalência  $V \times V / \sim$  será denotado por  $V \square V$ , e os elementos de  $V \square V$  serão denotados por  $[v, w]$ . Observe que, se  $v \neq w$  em  $V$ , então  $(v, w) \neq (w, v)$  em  $V \times V$  (ou seja, a ordem das entradas dos pares de  $V \times V$  é importante). No entanto, para quaisquer  $v, w \in V$ , temos que  $[v, w] = [w, v]$  em  $V \square V$  (ou seja, a ordem das entradas dos pares de  $V \square V$  não importa).

Usando essa definição, podemos escrever a definição formal de grafos.

**Definição 2.1** (Grafos). Um *grafo* é definido como um par ordenado  $(V, E)$ , onde:

- (i)  $V$  é um conjunto não vazio;
- (ii)  $E$  é um conjunto disjunto de  $V$ .

Os elementos de  $V$  são chamados de *vértices*, e os elementos de  $E$  são chamados de *arestas*. Além disso, quando  $E \neq \emptyset$ , a dupla  $(V, E)$  é munida de uma função  $\psi : E \rightarrow V \square V$ , que associa um par de vértices de  $V$  a cada aresta de  $E$ . A função  $\psi$  é chamada de *função de incidência* e, quando existe alguma aresta  $e \in E$  tal que  $\psi(e) = [v, w]$ , os vértices  $v$  e  $w$  são ditos *adjacentes*.

Para tornar a definição formal acima mais palpável, vamos dar alguns exemplos de estruturas que são grafos e de outras que não são grafos.

**Exemplo 2.2.** Considere os conjuntos  $V = \{v_1, v_2, v_3\}$ ,  $E = \{e_1, e_2\}$ , e a função  $\psi : E \rightarrow V \square V$  definida por  $\psi(e_1) = [v_1, v_2]$  e  $\psi(e_2) = [v_3, v_3]$ . Observe que, nesse caso, a dupla  $(V, E)$  é um grafo, pois  $V \neq \emptyset$ ,  $E \cap V = \emptyset$ , e  $\psi$  está bem definida. Uma representação diagramática desse grafo pode ser vista na Figura 2.1.

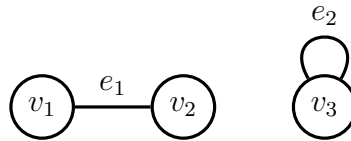


FIGURA 2.1. Exemplo de um grafo

Mostramos acima um exemplo de grafo. Agora, vamos apresentar objetos que não são grafos, pois alguma das condições da Definição 2.1 não é satisfeita.

**Exemplo 2.3.** Se  $V = \emptyset$ , então o par  $(V, E)$  não forma um grafo. No entanto, observe que, se  $V \neq \emptyset$  e  $E = \emptyset$ , então o par  $(V, E)$  forma um grafo. Observe também que, se  $E \cap V \neq \emptyset$ , por exemplo, se  $V = \{a, b\}$  e  $E = \{b, c\}$ , então o par  $(V, E)$  não forma um grafo.

**2.2. Matriz de adjacência e autovalores.** Embora pontos e linhas sejam convenientes para representar grafos visualmente, eles não são tão adequados para armazenar grafos em computadores. Para isso, é útil usar *matrizes de adjacência*, que serão definidas a seguir.

**Definição 2.4** (Matriz de adjacência). A *matriz de adjacência* de um grafo  $G = (V, E)$  é uma matriz  $M(G) = (a_{ij})_{i,j}$  quadrada de ordem  $|V|$ , construída da seguinte forma: dada uma ordenação do conjunto de vértices,  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  (onde  $n = |V|$ ), define-se  $a_{ij}$  como sendo a quantidade de arestas  $e \in E$  tais que  $\psi(e) = [v_i, v_j]$ . (Em particular, os laços são contados duas vezes.)

Vamos exemplificar essa definição com dois exemplos bem concretos.

**Exemplo 2.5.** Considere o grafo  $G = (V, E)$  dado por:

- $V = \{v_1, v_2\}$ ;
- $E = \{e_1\}$ ;
- $\psi : E \rightarrow V \square V$  é definida por  $\psi(e_1) = [v_1, v_2]$ .

Uma representação diagramática desse grafo pode ser vista na Figura 2.2, e sua matriz de adjacência é

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

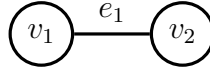


FIGURA 2.2. Grafo cuja matriz de adjacência é  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ .

**Exemplo 2.6.** Agora, considere o grafo  $G = (V, E)$  dado por:

- $V = \{v_1, v_2, v_3\}$ ;
- $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}$ ;
- $\psi : E \rightarrow V \square V$  é definida por  $\psi(e_1) = [v_1, v_1]$ ,  $\psi(e_2) = [v_1, v_2]$ ,  $\psi(e_3) = [v_2, v_3]$ ,  $\psi(e_4) = [v_2, v_3]$ ,  $\psi(e_5) = [v_2, v_3]$ ,  $\psi(e_6) = [v_3, v_3]$ .

Uma representação diagramática desse grafo pode ser vista na Figura 2.3, e sua matriz de adjacência é

$$M(G) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

Lembre que os autovalores de matrizes fornecem informações que permitem compreender suas propriedades estruturais. Em outras palavras, duas matrizes que possuem o mesmo conjunto (ou *espectro*) de autovalores

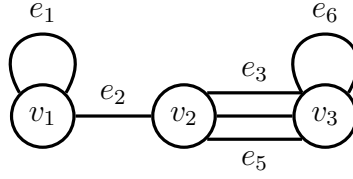


FIGURA 2.3. Grafo cuja matriz de adjacência é  $\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix}$ .

compartilham, de certa forma, a mesma estrutura. Assim, os autovalores constituem ferramentas poderosas no estudo de matrizes e, consequentemente, de grafos.

Nessa parte, vamos lembrar a definição de autovalores e autovetores de matrizes, vamos lembrar como calculá-los, e em seguida, vamos definir autovalores de grafos. Mas para começar, precisamos definir polinômios característicos e autovalores de matrizes.

**Definição 2.7** (Polinômio característico e Autovalores). Dada uma matriz quadrada  $A$  de ordem  $n > 0$ , seu *polinômio característico* é definido como

$$p(x) = \det(A - xI),$$

onde  $x$  é uma variável e  $I$  é a matriz identidade de ordem  $n$ . Os *autovalores* de  $A$  são os valores  $\lambda \in \mathbb{R}$  que satisfazem a equação  $p(\lambda) = 0$ .

Nos próximos três exemplos, nós lembraremos como usar polinômios característicos para calcular os autovalores de matrizes de maneira bem concreta.

**Exemplo 2.8.** Considere a matriz quadrada de ordem 1 dada por (7). O seu polinômio característico é

$$\det((7) - (x)) = 7 - x.$$

Consequentemente, seu único autovalor é  $\lambda = 7$ .

**Exemplo 2.9.** Considere agora a matriz quadrada de ordem 2 dada por

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

O seu polinômio característico é

$$\det\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix}\right) = \det\begin{pmatrix} -x & 1 \\ 1 & -x \end{pmatrix} = x^2 - 1.$$

Como  $x^2 - 1 = 0$  se, e somente se,  $x = 1$  ou  $x = -1$ , os autovalores dessa matriz são  $\lambda = 1$  e  $\lambda = -1$ .

**Exemplo 2.10.** Considere a matriz quadrada de ordem 3 dada por

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

O seu polinômio característico é

$$\begin{aligned}\det(M - xI) &= \det \begin{pmatrix} -x & 1 & 1 \\ 1 & -x & 1 \\ 1 & 1 & -x \end{pmatrix} \\ &= -x^3 + 3x + 2.\end{aligned}$$

Como  $-x^3 + 3x + 2 = (x + 1)^2(x - 2)$ , os autovalores de  $M$  são  $\lambda = 2$  (com multiplicidade 1) e  $\lambda = -1$  (com multiplicidade 2).

Usando a definição de autovalores de matrizes, podemos definir o conceito de autovalores de grafos.

**Definição 2.11** (Autovalores de grafos). Dado um grafo, seus *autovalores* são definidos como os autovalores da sua matriz de adjacência.

Denotaremos o espectro da matriz de adjacência de um grafo  $G = (V, E)$  como uma cadeia não crescente

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n,$$

onde  $n = |V|$ . Observe que os autovalores de  $M(G)$  podem, eventualmente, aparecer mais de uma vez nessa cadeia. Nos próximos dois exemplos, nós vamos ilustrar como calcular os espectros de grafos de maneira concreta.

**Exemplo 2.12.** Considere o grafo do Exemplo 2.5 (ver Figura 2.2). Lembre que a matriz de adjacência desse grafo é  $M(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Assim, pelo Exemplo 2.9, os autovalores desse grafo são  $\lambda_1 = 1$  e  $\lambda_2 = -1$ .

**Exemplo 2.13.** Considere o grafo da Figura 2.4. Observe que sua matriz de adjacência é

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

Pelos cálculos do Exemplo 2.10, obtemos que os autovalores desse grafo são  $\lambda_1 = 2$ ,  $\lambda_2 = -1$  e  $\lambda_3 = -1$ .

**2.3. Caminhos e conexidade.** Na definição de grafo (Definição 2.1), as arestas incidem em pares não ordenados de vértices, ou seja, a imagem da função  $\psi$  está contida no conjunto  $V \square V$ . Isso significa que as arestas não têm direção. Grafos cujas arestas possuem direção (isto é, quando a imagem da função de incidência está contida em  $V \times V$ ) são chamados de *grafos direcionados*. Apesar de importantes para diversos problemas, grafos direcionados não serão abordados neste texto, por fugirem ao seu escopo.

Mesmo que, em geral, as arestas de um grafo não sejam direcionadas, podemos percorrer um grafo, criando *caminhos*, como se as arestas fossem ruas de mão dupla que conectam os vértices.

**Definição 2.14** (Caminhos). Dados um grafo  $G = (V, E)$  e dois vértices  $v, w \in V$ , um *caminho* entre  $v$  e  $w$  é uma sequência  $(v_0, e_1, v_1, \dots, e_n, v_n)$  tal que:

- (i)  $v_0, \dots, v_n \in V$  são todos distintos,  $v_0 = v$  e  $v_n = w$ ;
- (ii)  $e_1, \dots, e_n \in E$  são todos distintos;
- (iii)  $\psi(e_i) = [v_{i-1}, v_i]$  para todo  $i \in \{1, \dots, n\}$ .

Assim como fizemos com o conceito formal de grafo, vamos exemplificar o conceito de caminho para torná-lo mais palpável.

**Exemplo 2.15.** Considere o grafo da Figura 2.1. Os únicos caminhos desse grafo são  $(v_1, e_1, v_2)$  e  $(v_2, e_1, v_1)$ . De fato, o único vértice adjacente a  $v_1$  é  $v_2$ , pois a única aresta que incide em  $v_1$  é  $e_1$ . Além disso, o único vértice adjacente a  $v_2$  é  $v_1$ , já que a única aresta que incide em  $v_2$  também é  $e_1$ . Observe que a aresta  $e_2$  não pode ser usada para construir um caminho, pois os seus vértices de incidência coincidem. Em particular,  $(v_3, e_2, v_3)$  não é um caminho nesse grafo.

**Exemplo 2.16.** Agora considere o grafo  $G = (V, E)$  definido por:

- $V = \{v_1, v_2, v_3\}$ ;
- $E = \{e_1, e_2, e_3\}$ ;
- $\psi : E \rightarrow V \square V$  é dada por  $\psi(e_1) = [v_1, v_2]$ ,  $\psi(e_2) = [v_1, v_3]$  e  $\psi(e_3) = [v_2, v_3]$ .

Uma representação diagramática desse grafo pode ser vista na Figura 2.4, e os caminhos nele são:

- Caminhos entre  $v_1$  e  $v_2$ :  $(v_1, e_1, v_2)$  e  $(v_1, e_2, v_3, e_3, v_2)$ ;
- Caminhos entre  $v_1$  e  $v_3$ :  $(v_1, e_2, v_3)$  e  $(v_1, e_1, v_2, e_3, v_3)$ ;
- Caminhos entre  $v_2$  e  $v_3$ :  $(v_2, e_3, v_3)$  e  $(v_2, e_1, v_1, e_2, v_3)$ .

Além disso, como os pares em  $V \square V$  não são ordenados, os caminhos entre  $v_2$  e  $v_1$  são obtidos a partir dos caminhos entre  $v_1$  e  $v_2$ , invertendo a ordem dos elementos da sequência. O mesmo vale para os caminhos entre  $v_3$  e  $v_1$  e entre  $v_3$  e  $v_2$ .

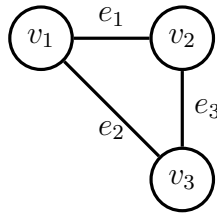


FIGURA 2.4. Grafo que admite diversos caminhos

Observe que a definição de caminho é bastante restritiva. Existem também conceitos que relaxam algumas das condições da Definição 2.14, como,

por exemplo, trilhas, ciclos e passeios. Alguns desses conceitos são definidos na Seção 5.

Mesmo sendo uma definição restritiva, caminhos estão relacionados a diversos problemas clássicos, como o *Problema do Caminho Mínimo* e o *Problema do Caixeiro Viajante*. Apesar de interessantes, esses problemas fogem ao escopo deste texto. Nossa principal aplicação do conceito de caminhos será a definição de conexidade de um grafo.

**Definição 2.17** (Grafos conexos). Um grafo  $G = (V, E)$  é dito *conexo* quando:  $|V| = 1$ , ou  $|V| > 1$  e, para qualquer par de vértices distintos  $v \neq w \in V$ , existe um caminho entre  $v$  e  $w$ . Caso contrário, ou seja, se existir algum par de vértices distintos em  $G$  para o qual não há caminho entre eles, o grafo  $G$  é dito *desconexo*.

Intuitivamente, um grafo é dito conexo quando ele não pode ser separado em duas partes desconexas. Os grafos desenhados acima fornecem exemplos de grafos conexos e desconexos.

**Exemplo 2.18.** Recordando o Exemplo 2.16, para quaisquer dois vértices distintos  $v$  e  $w$  no grafo da Figura 2.4, sempre existe algum caminho conectando  $v$  a  $w$ . Isso mostra que esse grafo é conexo. Por outro lado, no Exemplo 2.15, para os vértices  $v_1$  e  $v_3$  do grafo da Figura 2.1, não existem caminhos conectando esses vértices. Assim, esse grafo é desconexo.

### 3. CONJECTURA 2.1

Nessa seção, vamos definir e ilustrar os conceitos necessários para entender a seguinte conjectura:

**Conjectura 3.1.** Seja  $G = (V, E)$  um grafo, denote seu maior autovalor por  $\lambda_1$  e seu número de emparelhamento por  $\mu$ . Se o grafo  $G$  for conexo e  $n = |V| \geq 3$ , então

$$\lambda_1 + \mu \geq \sqrt{n-1} + 1.$$

Lembre da Definição 2.11 que  $\lambda_1$  denota o maior autovalor da matriz de adjacências de um grafo. Assim, nós vamos começar definindo o conceito de emparelhamento, que é necessário para definir  $\mu$ .

Intuitivamente, um emparelhamento em um grafo é uma escolha de pares de vértices do grafo. Esse pareamento é realizado através das arestas escolhidas do grafo, de forma que todo vértice que é incidente a uma dessas arestas é incidente a exatamente uma dessas arestas. Assim, cada um dos dois vértices em que as arestas incidem são considerados emparelhados.

**Definição 3.2** (Emparelhamentos). Dado um grafo  $G = (V, E)$  tal que  $E \neq \emptyset$  e  $\psi$  denota sua função de incidência, um emparelhamento em  $G$  é um subconjunto  $M$  de  $E$  tal que, para cada  $e_1 \neq e_2 \in M$ , se denotarmos



$\psi(e_1) = [v_1, w_1]$  e  $\psi(e_2) = [v_2, w_2]$ , então  $v_1 \neq w_1$ ,  $v_2 \neq w_2$ , e os conjuntos  $\{v_1, w_1\}$  e  $\{v_2, w_2\}$  são disjuntos. Ou seja,  $M$  não possui arestas que compartilham vértices.

O *número de emparelhamento* de  $G$ , denotado por  $\mu(G)$  ou simplesmente  $\mu$ , é a maior cardinalidade de um emparelhamento de  $G$ . Ou seja,

$$\mu(G) = \max\{|M| : M \text{ é um emparelhamento de } G\}.$$

Vamos ver nos exemplos abaixo que um grafo pode ter nenhum, um, ou mais de um emparelhamentos, e como calcular seu número de emparelhamento.

**Exemplo 3.3.** Considere um grafo  $G = (V, E)$  onde o conjunto de vértices  $V$ , o conjunto de arestas  $E$  e função de incidência  $\psi : E \rightarrow V \square V$  são dados da seguinte forma:

- $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ ,
- $E = \{e_1, e_2, e_3\}$ ,
- $\psi$  é definida por:  $\psi(e_1) = [v_1, v_2]$ ,  $\psi(e_2) = [v_2, v_3]$  e  $\psi(e_3) = [v_3, v_4]$ .

Uma representação diagramática desse grafo é a seguinte:

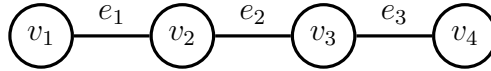


FIGURA 3.1. Grafo cujo emparelhamento máximo é  $\{e_1, e_3\}$ .

Note que os subconjuntos unitários de  $E$  ( $\{e_1\}$ ,  $\{e_2\}$  e  $\{e_3\}$ ) são emparelhamentos de  $G$ . De fato, a aresta  $e_1$  é incidente nos vértices  $v_1$  e  $v_2$ , a aresta  $e_2$  é incidente nos vértices  $v_2$  e  $v_3$ , e a aresta  $e_3$  é incidente nos vértices  $v_3$  e  $v_4$ .

Observe que o conjunto  $M_2 = \{e_1, e_3\}$  também é um emparelhamento de  $G$ . De fato,

- a única aresta de  $M_2$  que incide no vértice  $v_1$  é  $e_1$ ,
- a única aresta de  $M_2$  que incide no vértice  $v_2$  é  $e_1$ ,
- a única aresta de  $M_2$  que incide no vértice  $v_3$  é  $e_3$ ,
- a única aresta de  $M_2$  que incide no vértice  $v_4$  é  $e_3$ .

No entanto, os subconjuntos  $\{e_1, e_2\}$  e  $\{e_2, e_3\}$  de  $E$  *não* são emparelhamentos de  $G$ . De fato, no vértice  $v_2$  incidem tanto  $e_1$  quanto  $e_2$ , e analogamente, no vértice  $v_3$  incidem as arestas  $e_2$  e  $e_3$ .

Por fim, observe que o conjunto  $M_3 = \{e_1, e_2, e_3\}$  também não é um emparelhamento de  $G$ . De fato, no vértice  $v_2$  incidem as arestas  $e_1$  e  $e_2$ , e no vértice  $v_3$  incidem as arestas  $e_2$  e  $e_3$ .

Portanto, o número de emparelhamento deste grafo é  $\mu(G) = 2$ , pois o maior emparelhamento possui cardinalidade 2 (o conjunto  $\{e_1, e_3\}$ ).

O exemplo anterior ilustra um caso onde o grafo possui vários emparelhamentos possíveis. Vejamos agora um caso extremo onde não existem emparelhamentos.

**Exemplo 3.4.** Considere o seguinte grafo:  $G = (V, E)$  onde o conjunto de vértices  $V$ , o conjunto de arestas  $E$  e função de incidência  $\psi : E \rightarrow V \square V$  são dados da seguinte forma:

- $V = \{v_1\}$ ,
- $E = \{e_1\}$ ,
- $\psi$  é definida por:  $\psi(e_1) = [v_1, v_1]$ .

Uma representação diagramática desse grafo está contida na Figura 3.2.



FIGURA 3.2. Grafo sem emparelhamentos

Note que, embora a única aresta de  $G$  incida sobre o seu único vértice, o conjunto  $M = \{e_1\}$  não é um emparelhamento de  $G$ . De fato, a aresta  $e_1$  é incidente duas vezes sobre o mesmo vértice, ou seja,  $\psi(e_1) = [v_1, v_1]$  e  $v_1 = v_1$ . Isso significa que  $G$  não possui nenhum emparelhamento, e portanto  $\mu(G) = 0$ .

#### 4. CONJECTURA 2.3

Nessa seção será apresentada uma conjectura proposta por Auchiche e Hansen, explicada cada componente dessa conjectura e sua importância para o funcionamento dela.

**Conjectura 4.1** (Auchiche–Hansen). Seja  $G = (V, E)$  um grafo. Denote  $|V|$  por  $n$ , a proximidade de  $G$  por  $\pi$ , o diâmetro de  $G$  por  $D$  e o espectro de distâncias de  $G$  por  $\partial_1 \geq \dots \geq \partial_n$ . Se  $G$  for conexo,  $n \geq 4$  e  $D \geq 2$ , então

$$\pi + \partial_{\lfloor \frac{2D}{3} \rfloor} > 0.$$

Observe que, sem uma base teórica, esse enunciado não tem muito significado. Vamos definir cada um dos termos contidos no enunciado da conjectura acima e dar exemplos concretos. Primeiramente é importante entender o conceito de distância e de diâmetro, que serão úteis para a compreensão de todos os próximos termos do enunciado da conjectura.

**Definição 4.2** (Distância e Diâmetro). Dado um grafo  $G = (V, E)$ , a função *distância*  $d : V \times V \rightarrow \mathbb{N} \cup \{0\}$  é definida pelo comprimento do

menor caminho entre os vértices desse grafo  $G$ ,

$$d(v, w) = \min\{n \geq 0 \mid (v, e_1, v_1, \dots, v_{n-1}, e_n, w) \text{ é um caminho em } G\},$$

e o *diâmetro* do grafo  $G$  é definido como a maior distância entre dois vértices em  $V$ ,

$$D = \max\{d(v, w) \mid v, w \in V\}.$$

Para ilustrar a definição acima, vamos calcular as distâncias e os diâmetros de alguns exemplos.

**Exemplo 4.3.** O diâmetro de um grafo é  $D = 1$  se, e somente se, todos os vértices têm pelo menos uma ligação com todos os outros vértices. Alguns exemplos disso são os três grafos contidos na Figura 4.1.

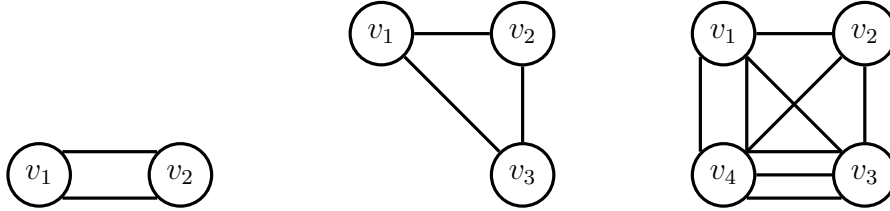


FIGURA 4.1. Três grafos com diâmetro igual a 1

Agora vamos considerar casos onde o diâmetro é maior que 1, começando com um exemplo onde  $D = 2$ .

**Exemplo 4.4.** Considere o grafo da Figura 4.2. Observe que:

$$\begin{aligned} d(v_1, v_2) &= 1, & d(v_1, v_3) &= 1, & d(v_1, v_4) &= 2, \\ d(v_2, v_3) &= 1, & d(v_2, v_4) &= 1 & \text{ e } & d(v_3, v_4) &= 1. \end{aligned}$$

Assim, o diâmetro desse grafo será  $d(v_1, v_4) = 2$ .

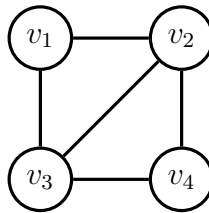


FIGURA 4.2. Grafo com diâmetro 2

No próximo exemplo, vamos mostrar um grafo com diâmetro ainda maior.

**Exemplo 4.5.** Considere o grafo da Figura 4.3. Observe que, nesse grafo,  $d(v_i, v_j) = |i - j|$  para todo  $i, j \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Assim, o *diâmetro* desse grafo é  $d(v_1, v_5) = 4$ .

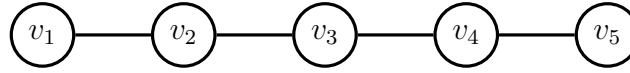


FIGURA 4.3. Grafo com diâmetro 4

Com o conteúdo que temos atualmente podemos avançar e entender sobre a matriz de distâncias. Ela é, basicamente, uma matriz que armazena as distâncias de todos os vértices do grafo.

**Definição 4.6** (Matriz de distâncias). Dado um grafo  $G = (V, E)$ , denote  $|V|$  por  $n$  e fixe uma ordem no conjunto de vértices,  $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ . Assim, a *matriz de distâncias* do grafo  $G$  é a matriz quadrada de ordem  $n \times n$  cuja entrada  $(i, j)$  é dada por  $d(v_i, v_j)$ , a distância entre o  $i$ -ésimo e o  $j$ -ésimo vértices em  $V$ .

Para ilustrar essa definição utilizaremos os grafos dos Exemplos 4.4 e 4.5, cujas distâncias entre os vértices nós já calculamos.

**Exemplo 4.7.** Para o grafo do Exemplo 4.4, a matriz de distâncias é a matriz  $4 \times 4$  dada por:

$$D(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

De forma análoga, podemos calcular a matriz de distâncias para o grafo da Figura 4.3.

**Exemplo 4.8.** Para o grafo do Exemplo 4.5, a matriz de distâncias é a matriz  $5 \times 5$  dada por:

$$D(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Além de sintetizar as distâncias de um grafo, nós podemos usar matrizes de distâncias para definir espectros de distâncias, que nos dão informações sobre o comportamento das distâncias no grafo.

**Definição 4.9** (Espectro de distâncias). O *espectro de distâncias* de um grafo  $G$  é a sequência de autovalores da sua matriz de distâncias.

Nós denotaremos o espectro de distâncias de um grafo  $G = (V, E)$  como uma cadeia não-crescente,  $\partial_1 \geq \partial_2 \geq \dots \geq \partial_n$ . Observe que nós fixaremos  $n = |V|$ , de forma que os autovalores de  $D(G)$  podem, eventualmente, aparecer mais de uma vez nessa cadeia.

**Exemplo 4.10.** Lembre do Exemplo 4.7 que a matriz de distâncias do grafo do Exemplo 4.4 é

$$D(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Assim, o seu polinômio característico é dado por

$$\det(D(G) - xI) = \det \begin{pmatrix} -x & 1 & 1 & 2 \\ 1 & -x & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -x & 1 \\ 2 & 1 & 1 & -x \end{pmatrix} = x^4 - 9x^2 - 12x - 4.$$

Para obter o espectro de distâncias desse grafo, nós precisamos calcular as raízes desse polinômio característico, ou seja, nós precisamos resolver a equação  $\det(D(G) - xI) = 0$ . Resolvendo essa equação, nós obtemos que o espectro de distâncias do grafo do Exemplo 4.4 é:

$$\partial_1 = \frac{3 + \sqrt{17}}{2} \approx 3,5, \quad \partial_2 = \frac{3 - \sqrt{17}}{2} \approx -0,5, \quad \partial_3 = -1, \quad \partial_4 = -2.$$

O último conceito que nós vamos apresentar nessa seção é o de proximidade. Ele é importante pois indica a distância média entre o vértice mais central do grafo (aquele que tem a menor soma de distâncias para todos os outros vértices) e os demais vértices do grafo.

**Definição 4.11** (Proximidade). Dado um grafo  $G = (V, E)$ , a sua *proximidade* é definida como

$$\pi = \frac{1}{n-1} \min \left\{ \sum_{w \in V} d(v, w) \mid v \in V \right\},$$

ou seja, a média das distâncias do vértice mais central do grafo para todos os outros vértices.

Para consolidar nossa compreensão do conceito de proximidade, vamos calcular esse valor para alguns grafos.

**Exemplo 4.12.** Considere o grafo do Exemplo 4.4. Para calcular a proximidade  $\pi$ , vamos começar calculando os somatórios  $\sum_{w \in V} d(v_i, w)$  para cada  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ .

- Para  $v_1$ , temos que

$$d(v_1, v_1) + d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) + d(v_1, v_4) = 0 + 1 + 1 + 2 = 4.$$

- Para  $v_2$ , temos que

$$d(v_2, v_1) + d(v_2, v_2) + d(v_2, v_3) + d(v_2, v_4) = 1 + 0 + 1 + 1 = 3.$$

- Para  $v_3$ , temos que

$$d(v_3, v_1) + d(v_3, v_2) + d(v_3, v_3) + d(v_3, v_4) = 1 + 1 + 0 + 1 = 3.$$

- Para  $v_4$ , temos que

$$d(v_4, v_1) + d(v_4, v_2) + d(v_4, v_3) + d(v_4, v_4) = 2 + 1 + 1 + 0 = 4.$$

Como o mínimo das somas acima é 3 e  $n - 1 = |V| - 1 = 3$ , obtemos que a proximidade desse grafo é

$$\pi = \frac{3}{3} = 1.$$

**Exemplo 4.13.** Considere, agora, o grafo do Exemplo 4.5. Observe que o vértice mais central desse grafo é  $v_3$ . Vamos mostrar que o mínimo dos somatórios  $\sum_{w \in V} d(v, w)$  é, de fato, atingido quando  $v$  é  $v_3$ .

- Para  $v_1$ , temos que

$$d(v_1, v_1) + d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) + d(v_1, v_4) + d(v_1, v_5) = 0 + 1 + 2 + 3 + 4 = 10.$$

- Para  $v_2$ , temos que

$$d(v_2, v_1) + d(v_2, v_2) + d(v_2, v_3) + d(v_2, v_4) + d(v_2, v_5) = 1 + 0 + 1 + 2 + 3 = 7.$$

- Para  $v_3$ , temos que

$$d(v_3, v_1) + d(v_3, v_2) + d(v_3, v_3) + d(v_3, v_4) + d(v_3, v_5) = 2 + 1 + 0 + 1 + 2 = 6.$$

- Para  $v_4$ , temos que

$$d(v_4, v_1) + d(v_4, v_2) + d(v_4, v_3) + d(v_4, v_4) + d(v_4, v_5) = 3 + 2 + 1 + 0 + 1 = 7.$$

- Para  $v_5$ , temos que

$$d(v_5, v_1) + d(v_5, v_2) + d(v_5, v_3) + d(v_5, v_4) + d(v_5, v_5) = 4 + 3 + 2 + 1 + 0 = 10.$$

Isso mostra que, de fato,  $v_3$  é o vértice  $v$  para o qual a soma  $\sum_{w \in V} d(v, w)$  é mínima. Como esse mínimo é 6 e  $n - 1 = |V| - 1 = 4$ , então obtemos que a proximidade desse grafo é:

$$\pi = \frac{6}{4} = \frac{3}{2}.$$

Com todos os conceitos apresentados nesta seção temos agora o arcabouço teórico necessário para compreender completamente a Conjectura de Auchiche-Hansen.

## 5. CONJECTURA 2.4

Nessa seção, vamos estabelecer os fundamentos necessários para entender a seguinte conjectura proposta por Collins:

**Conjectura 5.1.** Seja  $G$  um grafo finito. Denote por  $M(G)$  a matriz de adjacências de  $G$  e por  $D(G)$  a sua matriz de distâncias. Denote por  $a_0 + a_1\lambda + \dots + a_n\lambda^n$  o polinômio característico da matriz  $M(G)$  e por  $b_0 + b_1\lambda + \dots + b_n\lambda^n$  o polinômio característico da matriz  $D(G)$ . Se  $G$  for uma árvore, então:

- (a) a sequência dos valores absolutos dos coeficientes  $a_0, a_1, \dots, a_n$  que são não-nulos é unimodal,
- (b) a sequência dos valores absolutos dos coeficientes  $b_0, b_1, \dots, b_n$  que são não-nulos também é unimodal,
- (c) os picos das duas sequências acima são iguais.

Observe que, para entender o enunciado dessa conjectura, nós precisamos definir alguns conceitos, como árvores e sequências unimodais. Vamos começar definindo trilhas e ciclos, que serão usados na definição de árvores.

**Definição 5.2** (Trilhas e Ciclos). Dado um grafo  $G = (V, E)$ , uma *trilha* em  $G$  é uma sequência  $(v_0, e_1, v_1, \dots, e_n, v_n)$ , tal que:

- $v_0, \dots, v_n \in V$ ,
- $e_1, \dots, e_n \in E$  são todas distintas,
- $\psi(e_i) = [v_{i-1}, v_i]$  para todo  $i \in \{1, \dots, n\}$ .

No caso particular em que o primeiro e último vértices de uma trilha são iguais ( $v_0 = v_n$ ) e os outros vértices são diferentes ( $v_i \neq v_j$  para todos  $i \neq j \in \{1, \dots, n-1\}$ ), a trilha  $(v_0, e_1, v_1, \dots, v_{n-1}, e_n, v_0)$  é chamada de *ciclo*.

Observe que as definições de trilhas e de ciclos são parecidas com a definição de caminhos. Para mostrar as diferenças e semelhanças entre esses conceitos, vamos fazer um exemplo concreto.

**Exemplo 5.3.** Considere o grafo da Figura 5.1. Nesse grafo pode-se observar o ciclo formado pela trilha  $(v_1, e_1, v_2, e_2, v_1)$ . Além disso, observe que a trilha  $(v_1, e_2, v_2)$  não é um ciclo, pois o primeiro e o último vértice são distintos ( $v_1 \neq v_2$ ). No entanto, essa trilha  $(v_1, e_2, v_2)$  é um caminho, já que todos os seus vértices são distintos entre si. Note que, como todos os vértices de um caminho devem ser distintos entre si, nenhum caminho pode ser um ciclo.

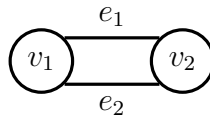


FIGURA 5.1. Grafo contendo diversas trilhas, ciclos e caminhos

Trilhas e ciclos são conceitos interessantes por si mesmos e que estão relacionados com diversas aplicações importantes. Mas, dentro do escopo desse texto, a principal utilidade deles é na definição de árvores.

**Definição 5.4** (Árvore). Um grafo é dito uma *árvore* quando não contém nenhum ciclo.

A definição de árvore é surpreendentemente simples, mas as implicações dessa ausência de ciclos são profundas e geram muitas propriedades interessantes para esses grafos.

**Exemplo 5.5.** O grafo mostrado no Exemplo 5.3 não é uma árvore, já que possui o ciclo  $(v_1, e_1, v_2, e_2, v_1)$ . No entanto, esse grafo pode ser transformado em uma árvore retirando qualquer uma das arestas  $e_1$  ou  $e_2$ .

Para ilustrar melhor o conceito de árvore, vejamos um exemplo de um grafo que já satisfaz essa propriedade desde o início.

**Exemplo 5.6.** Um outro exemplo de árvore é o grafo da Figura 5.2.

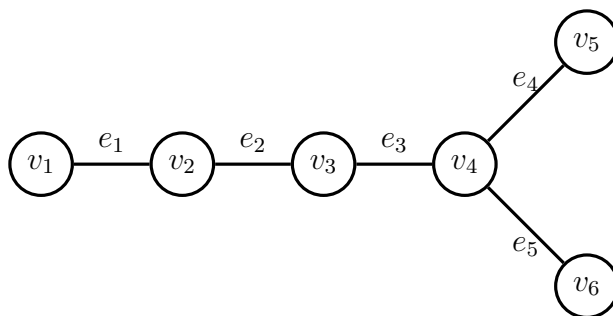


FIGURA 5.2. Exemplo de árvore

Para terminar essa seção, vamos definir sequências unimodais. Intuitivamente, essas são sequências de números reais que têm um único ponto de máximo.

**Definição 5.7.** Uma *sequência* de números reais é uma função  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ . Uma sequência  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$  é dita *unimodal* quando existe  $t \in \mathbb{N}$  tal que  $f$  é não-decrescente antes de  $t$ , ou seja,  $f(1) \leq f(2) \leq \dots \leq f(t)$ , e  $f$  é não-crescente depois de  $t$ , ou seja,  $f(t) \geq f(t+1) \geq f(t+2) \geq \dots$ . Nesse caso,  $t$  é chamado de *pico*.

Para tornar essa definição mais concreta, vamos examinar alguns exemplos de sequências e verificar se são ou não unimodais.

**Exemplo 5.8.** Em geral, nós denotamos uma sequência usando as imagens da função. Por exemplo, a função  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$  dada por  $f(n) = n$  é denotada por  $(f(n))_{n \in \mathbb{N}}$  ou por  $(n)_{n \in \mathbb{N}}$ . Observe que essa sequência não é unimodal,



pois  $n + 1 = f(n + 1) > f(n) = n$  para todo  $n \in \mathbb{N}$ , ou seja, ela é estritamente crescente e não possui um pico.

Agora vejamos um exemplo positivo de uma sequência que satisfaz a propriedade de unimodalidade.

**Exemplo 5.9.** Um exemplo de uma sequência que é unimodal é a sequência  $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$  dada por  $f(n) = -(n - 2)^2 + 1$ . De fato, observe que

$$f(1) = 0 < 1 = f(2), \quad f(2) = 1 > 0 = f(3), \quad f(3) = 0 > -1 = f(4),$$

e, em geral,  $f(n) = -(n - 2)^2 + 1 > -(n - 1)^2 + 1 = f(n + 1)$  para todo  $n \geq 2$ . Observe que, nesse caso, o pico da sequência  $(-(n - 2)^2 + 1)_{n \in \mathbb{N}}$  é  $t = 2$ .

Com todos os conceitos fundamentais agora definidos, temos o aparato teórico necessário para compreender completamente a Conjectura de Collins.

## REFERÊNCIAS

- [1] Adam Zsolt Wagner. Constructions in combinatorics via neural networks, 2021. <http://arxiv.org/pdf/2104.14516>.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO PAULO, SÃO JOSÉ DOS CAMPOS

*Email address:* angelo.franzen-, joao.garlopa-, jvfcolombini@unifesp.br

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, LORENA

*Email address:* rodrigofaria0912@gmail.com