



Evento	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2024
Local	Virtual
Título	Energia de grafos
Autor	DIEGO GABRIEL SCHNEIDER
Orientador	LUIZ EMILIO ALLEM

ENERGIA DE GRAFOS

Resumo: Um grafo $G = (V, E)$ é uma estrutura constituída por um conjunto $V \neq \phi$ de vértices e por um conjunto E de subconjuntos a dois elemento de V , denominados arestas. Dois vértices ligados por uma aresta são chamados de vértices adjacentes. A matriz de adjacência $A(G)$ de um grafo G com n vértices, é uma matriz quadrada $n \times n$, cuja entrada $a_{i,j}$ é igual a 1 se os vértices v_i e v_j são adjacentes, caso contrário é 0. Os grafos têm inúmeras aplicações nos dias atuais e neste trabalho mostraremos uma de suas aplicações em química, que é descobrir a energia de uma molécula (a qual sua estrutura pode ser representada por um grafo). A energia de um grafo G é definida como $E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|$ onde $n = |V|$ e $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são os autovalores da matriz de adjacência $A(G)$. E podemos calcular a energia de algumas famílias de grafos. Por exemplo, $E(K_n) = 2(n - 1)$, onde K_n denota o grafo completo, pois, seus autovalores são $n - 1$ (multiplicidade 1) e 1 (multiplicidade $n - 1$), $E(H_5) = 4s - 4$, onde H_5 denota o hiperoctaedro, pois, seus autovalores são $2s - 2$ (multiplicidade 1) e -2 (multiplicidade $(2s - 2)$) e $E(SK_2) = 2s$, onde SK_2 denota a união de S cópias de K_2 , pois, seus autovalores são 1 (multiplicidade s) e -1 (multiplicidade s).