



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	A TEORIA ESPECTRAL DE GRAFOS E ALGUNS PROBLEMAS INTERESSANTES APLICADOS NA QUÍMICA E BIOLOGIA
<b>Autor</b>	JEFERSON DIAS DA SILVA
<b>Orientador</b>	RODRIGO ORSINI BRAGA

# A TEORIA ESPECTRAL DE GRAFOS E ALGUNS PROBLEMAS INTERESSANTES APLICADOS NA QUÍMICA E BIOLOGIA

Autor: Jeferson Dias da Silva

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Orsini Braga

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

## Resumo

A Teoria Espectral de Grafos procura estudar propriedades estruturais de grafos a partir de matrizes e de seus espectros. Sua origem é marcada por um trabalho em Química Quântica, de 1931, mas somente a partir da tese de doutorado de *Cvetković*, em 1971, que a teoria teve um desenvolvimento significativo. O livro, *Teoria Espectral de Grafos - Uma Introdução*, apresentado no IIIº Colóquio de Matemática da Região Sul, tem sido referência para professores, alunos e pessoas que têm interesse em iniciar seus estudos na área de Teoria Espectral de Grafos.

Durante a iniciação científica pude colaborar na resolução dos exercícios sugeridos neste livro, os quais, eventualmente, poderão ser publicados com o objetivo de servir como um material complementar de estudo. A Teoria Espectral de Grafos é rica em aplicações em diversas áreas. Neste trabalho apresento dois problemas interessantes presentes nesse livro aplicados na Química e na Biologia e que estão associados à *matriz laplaciana* de um grafo.

Os autovalores da matriz laplaciana são todos reais e não negativos, e o maior desses autovalores é chamado de *índice laplaciano*. Uma árvore é um grafo conexo com o menor número de arestas possível. Algumas árvores modelam isômeros de alcanos, que são estruturas moleculares compostas apenas por carbono e hidrogênio de maneira que os carbonos formem apenas ligações simples entre si. Vamos mostrar que, a partir da determinação de algumas cotas inferiores e superiores conhecidas para o índice laplaciano dessas árvores, podemos detectar a presença de um carbono quaternário na estrutura.

Outro problema interessante que vamos apresentar neste trabalho relaciona o segundo menor autovalor da matriz laplaciana com uma determinada estrutura molecular. Sabe-se da Biologia Molecular que o dobramento da molécula de RNA forma estruturas secundárias e terciárias. Uma estrutura secundária mostra como pares de bases se combinam umas com as outras de maneira a formar laços, hastes e outras estruturas secundárias, ao passo que uma estrutura terciária é uma forma mais complexa que representa a interação dos elementos da estrutura secundária no espaço tridimensional. Dessa forma, representar as estruturas secundárias por grafos planares é importante para facilitar a compreensão da molécula do RNA. O segundo menor autovalor da matriz laplaciana é chamado de *conectividade algébrica* e está relacionado com a compacidade do grafo. Vamos mostrar que a determinação desse autovalor permite identificar moléculas de RNA biologicamente correlacionadas, uma vez que possuem estruturas secundárias semelhantes.