Teoría de grafos y algunas aplicaciones: matemática útil en la vida diaria

José Sergio Durand Niconoff, Myrna Hernández Matus y Sergio Francisco Juárez Cerrillo

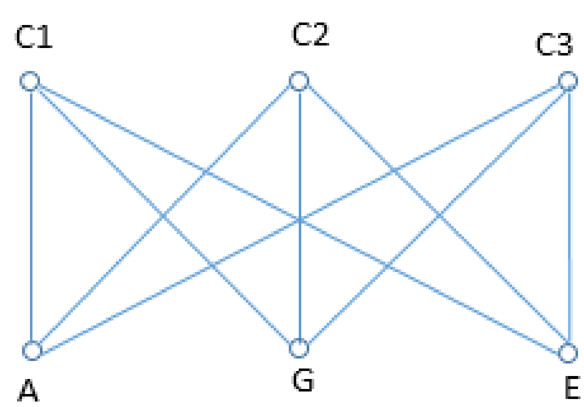
Hace algunos años, cuando era estudiante de licenciatura, al revisar la lista de materias optativas, con el propósito de elegir cuáles cursar en el siguiente semestre, noté algo que despertó mi curiosidad: el nombre de una de una, era para estudiantes avanzados de la licenciatura en Física y Matemáticas, llamada Teoría de gráficas. Todos los compañeros nos miramos y preguntamos: "¿Vamos a cursar nuevamente geometría analítica?", "¿Tú sabes de qué trata la teoría de gráficas?".

En términos sencillos, se puede decir que la teoría de gráficas es el estudio de diagramas que consisten de puntos y líneas que unen a algunos pares de esos puntos (aristas). A estos diagramas, formados por puntos y aristas, que cumplen ciertas propiedades se les llama gráficas.

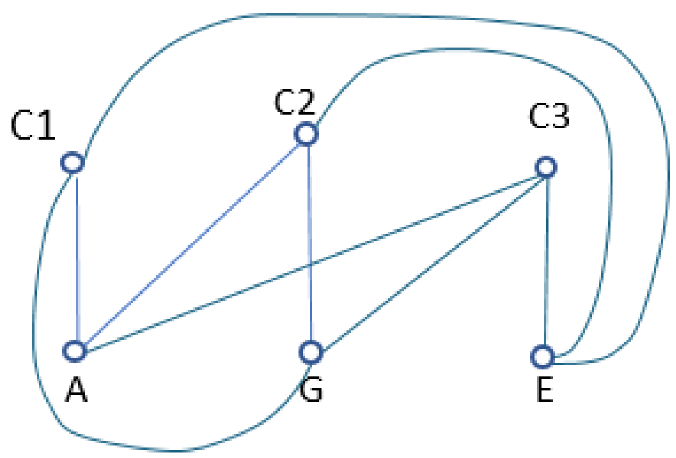
Muchas situaciones de la vida cotidiana pueden ser descritas por este tipo de diagramas; estos suelen aparecer en la ingeniería, en las ciencias naturales, biológicas y sociales. Veamos tres ejemplos.

1. La planaridad de una gráfica

Un problema de servicios. Se tienen tres casas, C1, C2 y C3, cada una conectada mediante conductos a una de las tres estaciones de servicios: abastecimiento de agua (A), gas (G) y electricidad (E). Estas se presentan en la Figura 1. ¿Es posible realizar tales conexiones sin que haya un cruce de los conductos?



a)



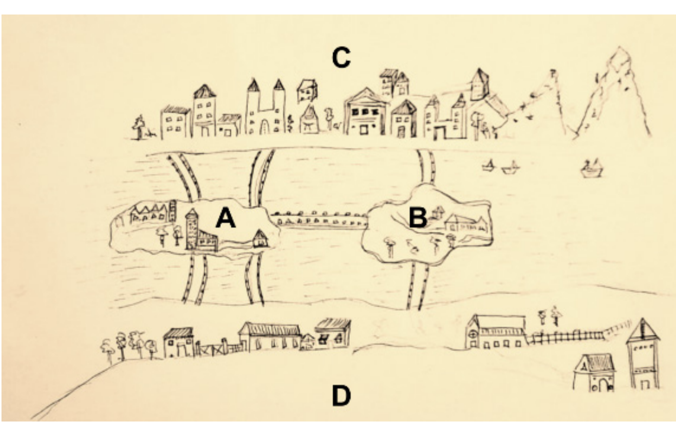
b)

Figura 1. a) Grafo representando el esquema de la situación de abastecimiento, los conductos se muestran como lados y las casas y centros de abastecimiento como puntos o vértices. b) Gráfica del abastecimiento en un intento de realizar las conexiones sin que haya un cruce de los conductos. Después de muchos intentos pareciera que siempre hay por lo menos un cruce.

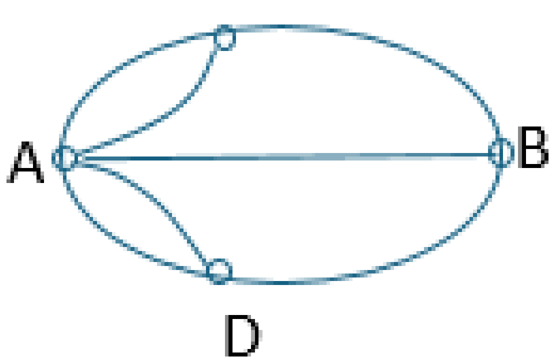
2. Un poco de historia. El problema de los puentes de Königsberg

La antigua ciudad alemana de Königsberg, que actualmente es la ciudad rusa llamada Kaliningrado, se encuentra a orillas del río Pregolia (Pregel) y sobre dos islas, que llamaremos A y B. Las islas están conectadas por un puente y se conectan con las orillas C y D mediante otros seis puentes más. Los pobladores de aquella época se plantearon el siguiente problema (Figura 2):

¿Es posible realizar un recorrido que comience y finalice en la orilla C, cruzando cada uno de los siete puentes solo una vez?



a)



b)

c)

Imagen de Leonhard Paul Euler

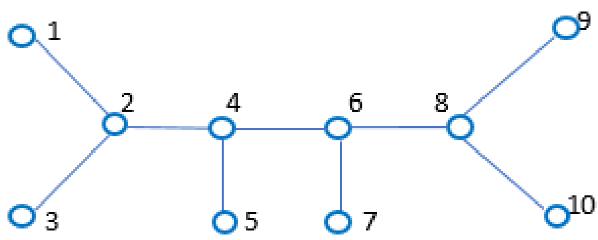
Figura 2. a) Esquema de la disposición de los puentes de Königsberg en el siglo XVIII. b) Representación mediante una gráfica, hecha por Leonhard Euler (imagen c), de la disposición de los siete puentes: cada punto con su letra indica la tierra firme de la ciudad y las líneas, rectas y curvas, representan los puentes (tomada de: https://iiif.wellcomecollection.org/image/V0001800/full/full/0/default.jpg).

3. Un ejemplo en química

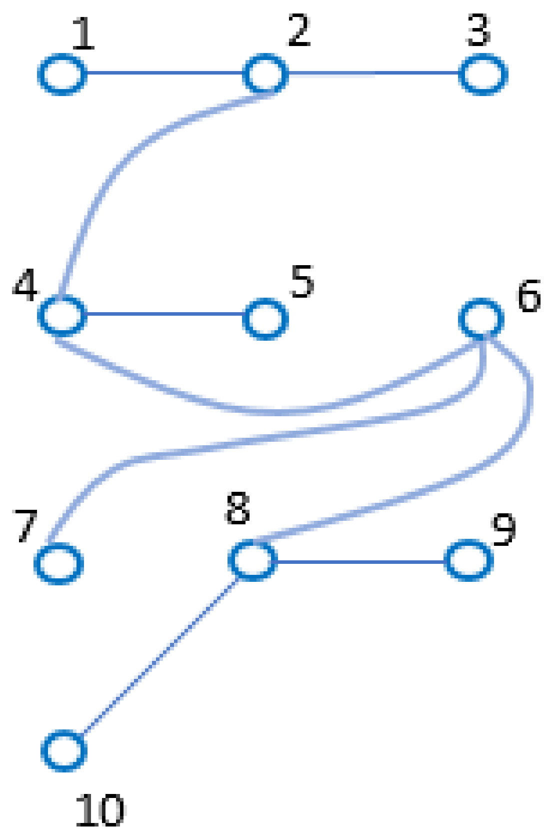
Una molécula representada por su fórmula estructural, $H_2C=CH-CH=CH_2$ compuesta de diez átomos y para cada pareja de átomos distintos en la molécula habrá pares de átomos que estén enlazados, mediante un enlace covalente. Si se representa cada átomo por un pequeño círculo y dibujamos una línea entre dos círculos que correspondan a átomos ligados químicamente, se podrá representar la fórmula estructural mediante un diagrama de puntos (círculos) y líneas (ver Figura 3). ¿Es posible obtener información de este diagrama de puntos y líneas que permita predecir o explicar alguna propiedad o actividad relevante de esta molécula? Por ejemplo, ¿tendrá propiedades anticancerígenas, antioxidantes, antinflamatorias, etcétera?

$$H_2C=CH-CH=CH_2$$

a)



b)



c)

Figura 3. a) Fórmula estructural de un compuesto químico, b) y c) dos gráficas «isomorfas» que representan a la misma molécula. Reciben ese nombre porque muestran el mismo patrón de conectividad entre sus puntos, aunque los lados de las figuras b) y c) son distintos.

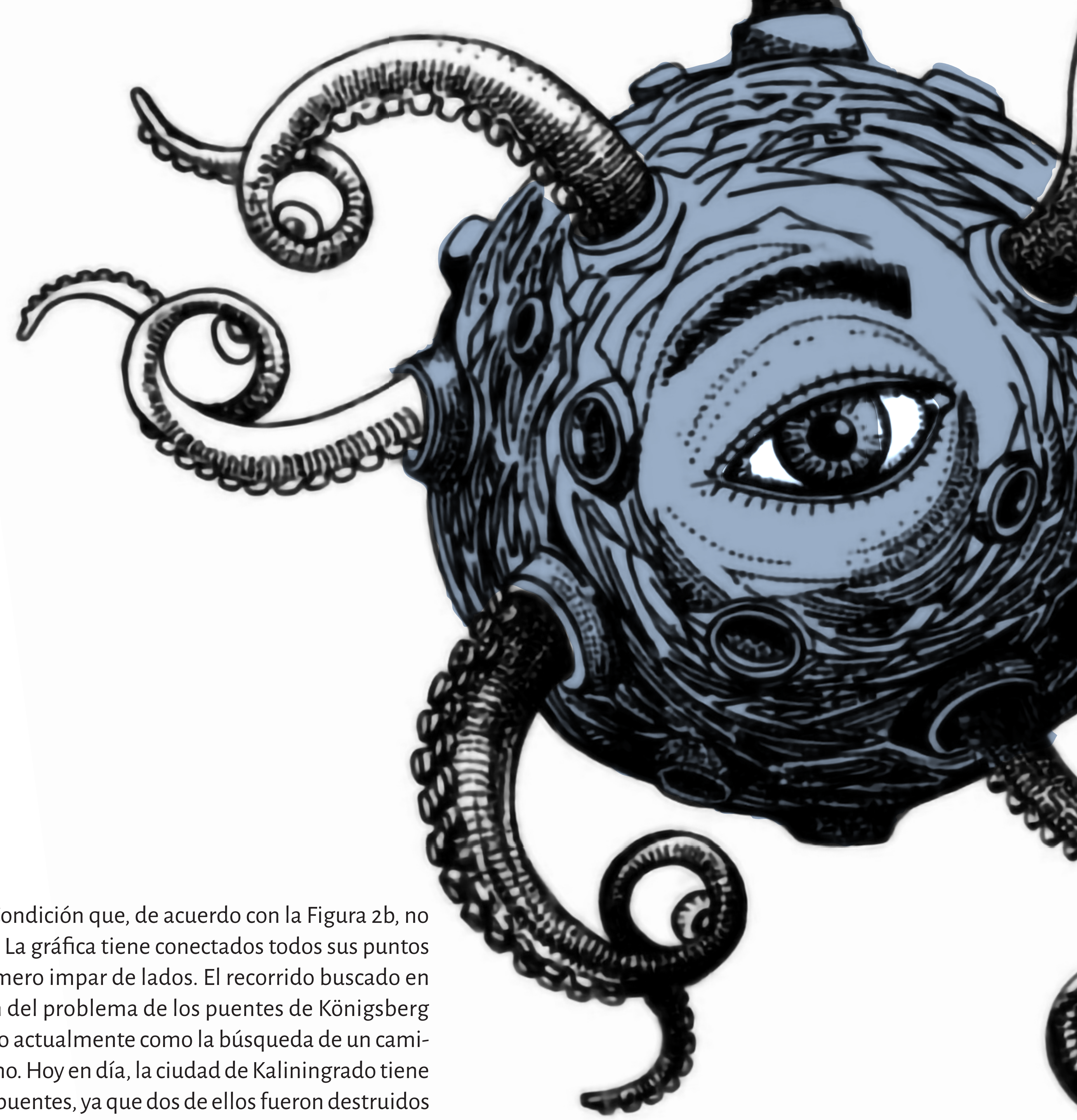
En los ejemplos anteriores se notará que el fenómeno o situación queda representado mediante un diagrama de puntos y líneas. Estos diagramas son conocidos como grafos o gráficas. Se debe evitar confundirlos con las gráficas que estudia la geometría analítica; no son lo mismo, aunque tienen el mismo nombre. Las gráficas que aparecen en geometría analítica son conjuntos de puntos del plano o del espacio cuyas coordenadas satisfacen una ecuación en el plano o en el espacio, respectivamente. Las gráficas o grafos que se comentan en este trabajo se refieren simplemente a puntos y líneas que unen a algunas parejas de ellos, es decir, no importa el tamaño ni la forma de esas líneas. Lo relevante es la conectividad: qué punto está conectado con cuál otro.

El estudio y solución de los problemas que este tipo de situaciones plantean dio lugar al nacimiento de lo que ahora se conoce en matemáticas como *Teoría de gráficas* o *Teoría de grafos*. Se considera que el matemático suizo Leonhard Euler, al dar respuesta al problema planteado en el ejemplo 2, con su publicación en 1736, aportó el germen de esta área de las matemáticas. Aunque debe mencionarse también como parte de este, los trabajos de Gustav Kirchhoff en el estudio de los circuitos eléctricos y a Arthur Cayley, con el estudio de la estructura química de los compuestos.

¿Mediante resultados de la *teoría de grafos* es posible, más allá del ensayo y error, resolver el problema planteado en el ejemplo 1?

En el caso de la Figura 1, la respuesta es *no*. Este tipo de planteamiento sobre “planaridad” de una gráfica, es decir, ¿una gráfica puede ser dibujada en el plano sin que ninguno de sus lados se intersecte, excepto en los puntos que la forman?, junto con su respuesta, tiene aplicaciones, por ejemplo, en el diseño arquitectónico o de la ingeniería civil. Con la interpretación adecuada de la gráfica, se pueden resolver problemas que van desde la disposición del mobiliario en una oficina hasta el mejoramiento de la vialidad en una ciudad. En el diseño y fabricación de circuitos eléctricos, es muy importante que las conexiones entre puntos tengan una representación planar, de otra forma la intersección de lados produciría un cortocircuito.

El ejemplo 2 se ubica en lo que se conoce como problemas de recorrido en una gráfica, de tal manera que este problema del paseo por los puentes está planteado para terminar en el mismo punto de partida. Ahora bien, después de muchos intentos de recorrido de acuerdo con la regla del paseo por los puentes de Königsberg se estará tentado a responder que *no es posible.* Tomando en cuenta la distribución de los puntos A a D, mostrada en la Figura 2a, se muestra el problema de los puentes mediante una gráfica, de acuerdo con el planteamiento de Euler, en la Figura 2b. Así, con los puntos se representan lugares de tierra firme en la ciudad y con las líneas, los siete puentes; Euler demostró que esta gráfica no puede recorrerse por completo siguiendo una trayectoria que inicie en un punto y termine en el mismo, no importa en qué punto se empiece, esto es, resulta imposible recorrer toda la gráfica regresando al punto de partida sin reencontrar las huellas del paseante. Un recorrido tal debería llegar a cada punto tantas veces como sale de él; por lo tanto, es necesario que en cada punto haya un número par



de lados. Condición que, de acuerdo con la Figura 2b, no se cumple. La gráfica tiene conectados todos sus puntos con un número impar de lados. El recorrido buscado en la solución del problema de los puentes de Königsberg es conocido actualmente como la búsqueda de un camino euleriano. Hoy en día, la ciudad de Kaliningrado tiene solo cinco puentes, ya que dos de ellos fueron destruidos durante la Segunda Guerra Mundial. Aunque encontrar recorridos eulerianos que inicien y terminen en el mismo punto es imposible, lo que sí se puede es encontrar caminos de este tipo de un punto a otro.

La búsqueda de recorridos eulerianos en gráficas tiene una gran importancia práctica en la vida cotidiana, por ejemplo, en la búsqueda de rutas óptimas de transporte de mercancía o de pasajeros.

En la seguridad en una red de carreteras, el patrullaje se trataría de realizar siguiendo un recorrido euleriano, si es que existe; de esta forma se garantizaría que se recorrieran todas las carreteras una sola vez en cada ronda de vigilancia. Asimismo, existen problemas similares en telecomunicaciones, criptografía y ciencias de la computación.

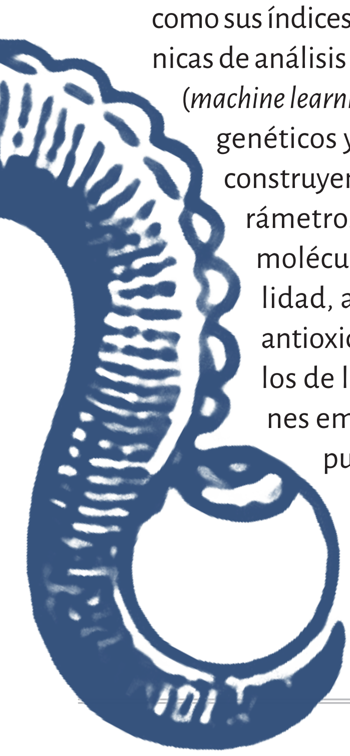
Con respecto al ejemplo 3, en la Figura 3a se muestra la fórmula estructural de un compuesto químico, mientras que en las Figuras 3b y 3c, dos gráficas que representan a dicha fórmula. Los puntos indican átomos de carbono e hidrógeno, y los lados, enlaces químicos entre pares de átomos. La gráfica del inciso b difiere en la numeración de los puntos y la gráfica en c difiere de la anterior en la forma de los lados. Desde el punto de vista de la teoría de gráficas, las dos gráficas son el mismo objeto matemático; esto es, en la construcción de la gráfica no importan las longitudes y formas de los lados, ni el tamaño de la gráfica o cómo se numeran sus puntos. La Figura 3b se transforma en 3c doblando y estirando sus lados, manteniendo la numeración de los puntos; estas representaciones del mismo objeto obtenidas con ese procedimiento se llaman *gráficas isomorfas*. Surgen varias preguntas: si estas representaciones del mismo objeto tendrán propiedades comunes y, si esas propiedades comunes serán responsables del comportamiento y/o actividad del compuesto que representan. La respuesta a estos cuestionamientos es *sí*.

Para responder a este tipo de planteamientos, ha surgido el área del conocimiento que actualmente se conoce como *Teoría química de gráficas.*

La teoría química de gráficas es el estudio de gráficas en el que cada punto representa a un átomo y cada línea o lado es el enlace entre los átomos de la estructura. Para responder a planteamientos con compuestos específicos, se trabaja de manera interdisciplinaria con la teoría de gráficas, la estadística y la química computacional. Las propiedades comunes entre gráficas isomorfas se conocen como índices topológicos. Uno de estos *índices topológicos* es el número de lados que llegan a cada uno de los puntos de la gráfica. A partir de este índice se derivan otros: el índice de Randic (también conocido como el índice de conectividad); los índices del grupo Zagreb o el de Wiener relacionado con las distancias entre puntos de las gráficas, entre otros. Estos índices son unos de los más conocidos y estudiados en la teoría de gráficas.

Ahora bien, ¿cómo encontrar esos índices topológicos? Cabe recalcar que, en primera instancia, la molécula se debe representar como una gráfica a partir de su fórmula estructural, con los átomos sirviendo como puntos y los enlaces como lados, y a partir de esta gráfica molecular se determinan uno o varios de los índices mencionados. Esta gráfica puede ser alargada, torcida o deformada, de tal manera que no se rompan los lados, ni se creen lados nuevos y las que se obtienen después de estas deformaciones son gráficas isomorfas. Para todas ellas los valores numéricos de los índices mencionados serán los mismos, es decir, se mantendrán invariantes para cualquier representación que se elija. Su valor depende del patrón de conectividad y no de la forma o tamaño de la gráfica, ni de la forma de sus lados.

¿De qué manera los índices topológicos explican el comportamiento del compuesto que está representado por las gráficas isomorfas? Para dar una respuesta es necesario partir de la suposición de que las características responsables de las propiedades físicas, químicas y biológicas de la molécula están dadas por su estructura, misma que queda capturada y resumida como un conjunto de números, esto es, los calculados como sus índices topológicos. Es así que, mediante técnicas de análisis estadístico y aprendizaje automático (*machine learning*), como la regresión, los algoritmos genéticos y las redes neuronales artificiales, se construyen modelos matemáticos entre los parámetros topológicos X y propiedades de la molécula Y, tales como su toxicidad, solubilidad, actividad anticancerígena, actividad antioxidante, o antinflamatoria. Estos modelos de la forma $Y=F(X)$ representan relaciones empíricas mediante la función F que se pueden utilizar para hacer predicciones sobre el comportamiento de la molécula; dichas relaciones permiten la explicación de las observaciones y, asimismo, hacer predicciones sobre el comportamiento de la molécula en condiciones impuestas a conveniencia, por ejemplo, para disminuir la toxicidad y/o aumentar su capacidad anticancerígena. Esta forma de trabajo hace posible minimizar tiempo y recursos experimentales en la búsqueda de nuevos fármacos o materiales.



Como conclusión tenemos que la teoría de grafos se ubica en un área de las matemáticas conocida como matemáticas discretas; esta teoría trata con las figuras geométricas que tienen propiedades que no dependen del tamaño y la forma, sino únicamente de la forma en la que pares de puntos están interconectados por líneas. Los grafos se ilustran como diagramas formados por puntos unidos por líneas.

La teoría de grafos estudia las propiedades que no cambian cuando la figura se deforma o cuando se le estira, tuerce o comprime, pero sin romper líneas o crear nuevas líneas que unan pares de puntos (suponiendo que es de un material deformable).

Como se describió en este trabajo, estos tipos de gráficas pueden representar situaciones de la vida real; de hecho, la teoría surgió y se desarrolló motivada por sus aplicaciones y amplia influencia en la vida cotidiana, desde un pasatiempo o juego, como el recorrido euleriano de una gráfica en “la firma del diablo” o el “timbiriche”, hasta la investigación en la búsqueda de curas para el cáncer, covid-19 o soluciones a problemas que surgen en comunicaciones, lingüística, economía, medicina, diseño arquitectónico, etcétera. Vale la pena estudiarla y que se incluya en la hoja de materias de áreas de la ciencia básica y las humanidades.

Lecturas adicionales

Muchas otras aplicaciones de la teoría de grafos pueden encontrarse en los siguientes ejemplos:

1. En el tratamiento avanzado sobre los métodos estadísticos y de aprendizaje automático para establecer relaciones empíricas entre los parámetros topológicos del grafo de una molécula con las propiedades de la molécula:
Kerber, A., Laue, R., Meringer, M., Rucker, C. & Schymanski, E. (2014). *Mathematical Chemistry and Chemoinformatics*. De Gruyter. https://doi.org/10.1515/9783110254075

2. En la metodología utilizada en estudios de compuestos anticancerígenos:
Koam, A. N. A., Azeem, M., Ahmad, A. & Masmali, I. (2024). Connection number-based molecular descriptors of skin cancer drugs. *Ain Shams Engineering Journal*, *15*(6), 102750, https://doi.org/10.1016/j.asej.2024.102750.
Li, Y., Aslam, A., Saeed, S. *et al*. (2022). Targeting highly resisted anticancer drugs through topological descriptors using VIKOR multi-criteria decision analysis. *Eur. Phys. J. Plus 137*, 1245. https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03469-x
Mukwembi, S. & Nyabadza, F. (2023). Predicting anti-cancer activity in flavonoids: a graph theoretic approach. *Sci. Rep.* 13, 3309. https://doi.org/10.1038/s41598-023-30517-y

3. En la investigación que coadyuva en la búsqueda de la cura del covid-19:
Mahji, B. K., Kulli, V. & Cangul, I. N. (2023). Nirmala leap indices of some chemical drugs against Covid-19. *J. Disc. Math. Appl. 8*(1), 13-21. https://doi.org/10.22061/jdma.2023.10093.1058

4. En el desarrollo de modelos de inteligencia artificial clínica:
Johnson, R., Li, M. M., Noori, A., Queen, O. & Zitnik, M. (2024). Graph artificial intelligence in medicine. *Annu. Rev. Biomed. Data Sci. 7*, 345-368. https://doi.org/10.1146/annurev-biodatasci-110723-024625

5. En el estudio de las redes sociales:
Teixeira, A. S., Santos, F. C. & Francisco, A. P. (2017). Emergence of Social Balance in Signed Networks. En Gonçalves, B., Menezes, R., Sinatra, R., Zlatic, V. (eds.), *Complex Networks VIII*. Springer Proceedings in Complexity. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-54241-6_16

Referencias

Krasner, E. & Newman, J. (1940). *Mathematics and the Imagination*. Simon and Schuster.
López de Medrano, S. (1973). *Teoría de gráficas*. ANUIES.
Ore, O. (1963). *Teoría y aplicaciones de los gráficos.* Random House.