

**Volume 27, 2012**

Editores

**Cassio Machiaveli Oishi**

Universidade Estadual Paulista - UNESP  
Presidente Prudente, SP, Brasil

**Fernando Rodrigo Rafaeli**

Universidade Estadual Paulista - UNESP  
São José do Rio Preto, SP, Brasil

**Rosana Sueli da Motta Jafelice (Editor Chefe)**

Universidade Federal de Uberlândia - UFU  
Uberlândia, MG, Brasil

**Rubens de Figueiredo Camargo**

Universidade Estadual Paulista - UNESP  
Bauru, SP, Brasil

**Sezimária de Fátima P. Saramago**

Universidade Federal de Uberlândia - UFU  
Uberlândia, MG, Brasil

**Vanessa Avansini Botta Pirani (Editor Adjunto)**

Universidade Estadual Paulista - UNESP  
Presidente Prudente, SP, Brasil



A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa, também, a publicar livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as **figuras em eps** e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja outros títulos publicados em formato e-book na página  
<http://www.sbmac.org.br/notas.php>

# INTRODUÇÃO À TEORIA ESPECTRAL DE GRAFOS COM APLICAÇÕES

2<sup>a</sup> edição

Nair Maria Maia de Abreu

nairabreunova@gmail.com

Programa de Engenharia de Produção - COPPE  
Universidade Federal do Rio de Janeiro - Brasil

Renata Raposo Del-Vecchio

renata@vm.uff.br

Cybele Tavares Maia Vinagre

cybl@vm.uff.br

Departamento de Análise  
Instituto de Matemática e Estatística  
Universidade Federal Fluminense - Brasil

Dragan Stevanović

dragan.stevanovic@upr.si

University of Primorska - Eslovênia  
University of Niš - Sérvia



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil

2012

Coordenação Editorial: Elbert Einstein Nehrer Macau

Coordenação Editorial da Série: Rosana Sueli da Motta Jafelice

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2012 by Nair Maria Maia de Abreu, Renata Raposo Del-Vecchio, Cybele Tavares Maia Vinagre e Dragan Stevanović.

Direitos reservados, 2012 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

**Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP  
Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner**

Abreu, Nair M. M.

Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações -  
São Carlos, SP : SBMAC, 2012, 129 p., 20.5 cm -  
(Notas em Matemática Aplicada; v. 27) - 2ª edição

e-ISBN 978-85-86883-65-1

1. Teoria espectral de grafos 2. Matriz de adjacência  
3. Matriz Laplaciana 4. Matriz Laplaciana sem sinal  
5. Matriz distância 6. Matriz de incidência

I. Abreu, Nair M. M. II. Del-Vecchio, Renata R.  
III. Vinagre, Cybele T. M. IV. Stevanović, Dragan  
V. Título. VI. Série

CDD - 51

Esta edição em formato e-book é uma edição revisada do livro original do mesmo título publicado em 2007 nesta mesma série pela SBMAC.

Dedicamos este livro aos professores e alunos do Grupo de  
Pesquisa em Teoria Espectral de Grafos TEG-Rio.  
*Os Autores*



# Agradecimentos

Nosso agradecimento especial às professoras Marina Tebet Azevedo de Marins e Carla Silva Oliveira, coautoras em textos de minicursos anteriores, [1] e [75], fontes importantes deste livro.

Aos professores Ricardo Eleodoro Fuentes Apolaya e Leonardo Silva de Lima, agradecemos o apoio fundamental em vários momentos deste trabalho.

Ao bolsista de Iniciação Científica Jaime Velasco Câmara da Silva, nosso reconhecimento pelo excelente trabalho sobre o Teorema da matriz-árvore, incluído nesta obra.

À professora Maria Aguiéiras Alvarez de Freitas, agradecemos a cuidadosa revisão da primeira versão deste livro; os erros que porventura permaneçam são de nossa exclusiva responsabilidade.

Finalmente, as duas primeiras autoras agradecem ao CNPq pelo auxílio concedido durante a realização deste trabalho.



# Conteúdo

<b>Prefácio</b>	<b>11</b>
<b>1 Conceitos básicos sobre grafos</b>	<b>13</b>
1.1 Introdução . . . . .	13
1.2 Conceitos básicos . . . . .	13
1.3 Relações entre alguns parâmetros de grafos . . . . .	18
1.4 Exercícios . . . . .	20
1.5 Notas bibliográficas . . . . .	22
<b>2 Matriz de adjacência</b>	<b>23</b>
2.1 Introdução . . . . .	23
2.2 Polinômio característico e espectro de um grafo . . . . .	24
2.3 O espectro de certos tipos de grafos . . . . .	35
2.3.1 Grafos circulantes e seus espectros . . . . .	39
2.4 Isomorfismo de Grafos . . . . .	44
2.5 Energia de grafos . . . . .	46
2.5.1 Limites para a energia de um grafo . . . . .	48
2.6 Exercícios . . . . .	54
2.7 Notas bibliográficas . . . . .	57
<b>3 Matriz de incidência</b>	<b>59</b>
3.1 Introdução . . . . .	59
3.2 Matriz de incidência e grafo-linha de um grafo . . . . .	59
3.3 Exercícios . . . . .	64
3.4 Notas bibliográficas . . . . .	65

<b>4</b>	<b>Matriz Laplaciana</b>	<b>67</b>
4.1	Introdução . . . . .	67
4.2	Conceitos e resultados preliminares . . . . .	67
4.3	O teorema da matriz-árvore . . . . .	72
4.4	Conectividade algébrica . . . . .	83
4.5	Autovalores e o problema do corte maximal . . . . .	87
4.5.1	Corte maximal e autovalores em algumas classes de grafos . . . . .	89
4.6	Aplicações . . . . .	94
4.6.1	Carbonos quaternários e grau máximo de vértices	94
4.6.2	RNA ( <i>ribonucleic acid</i> ) e conectividade algébrica	95
4.6.3	Potencial de ionização . . . . .	98
4.7	Exercícios . . . . .	98
4.8	Notas bibliográficas . . . . .	100
<b>5</b>	<b>Matriz distância e matriz Laplaciana sem sinal</b>	<b>101</b>
5.1	Introdução . . . . .	101
5.2	Matriz distância . . . . .	101
5.3	Matriz distância de uma árvore . . . . .	105
5.4	Matriz Laplaciana sem sinal . . . . .	109
5.5	Coespectralidade e aplicações . . . . .	113
5.6	Exercícios . . . . .	118
5.7	Notas bibliográficas . . . . .	120
	<b>Bibliografia</b>	<b>121</b>

# Prefácio

Nestas Notas de Matemática Aplicada, apresentamos um texto introdutório à Teoria Espectral de Grafos acessível a estudantes de final de graduação, iniciação científica e mestrado. Como pré-requisito, admitimos conhecimentos básicos de Álgebra Linear.

Pode-se dizer que a Teoria Espectral de Grafos busca utilizar os métodos e técnicas da Álgebra Linear para lidar com problemas do escopo da Teoria Algébrica dos Grafos. De fato, esta última estuda as propriedades algébricas de funções de representação e operações em grafos, conceitos e propriedades algébricas delas decorrentes tais como morfismos, automorfismos e isomorfismos, grafos-linha, grafos distância-regular e regularidade forte, dentre outras. Junte-se a isto o estudo das propriedades estruturais oriundas das matrizes que representam grafos. Estas últimas conduzem diretamente às propriedades espectrais das matrizes de representação, que constituem justamente o objeto de investigação da Teoria Espectral de Grafos.

Embora seu marco inicial seja um trabalho em Química Quântica de Hückel [51], de 1931, foi a partir da tese de doutorado de D. Cvetković [23] em 1971, que a Teoria Espectral de Grafos teve um grande desenvolvimento. Até meados de 1980, cerca de 700 trabalhos nesta área foram publicados por matemáticos e químicos. Nos últimos anos, o número de publicações sobre o assunto tem crescido surpreendentemente (ver [72]). Para conhecer os diversos aspectos desta linha de pesquisa, seus desdobramentos e aplicações, além de inúmeras referências e vários problemas em aberto, recomendamos uma visita a página <http://www.sgt.pep.ufrj.br/>.

Neste texto, apresentamos conceitos, métodos e técnicas da Teo-

ria Espectral de Grafos e mostramos sua utilização na modelagem de problemas de diversas áreas do conhecimento. Para analisar propriedades de grafos através de suas representações matriciais, estudamos cinco matrizes e seus respectivos espectros. Começamos com a matriz de adjacência, a mais conhecida e investigada, com vasta bibliografia. Em seguida, apresentamos a matriz de incidência e sua relação com o grafo-linha. Depois estudamos a matriz Laplaciana e algumas aplicações importantes. Finalmente, apresentamos as matrizes distância e Laplaciana sem sinal, que, recentemente, vêm despertando fortemente o interesse dos pesquisadores da área. O primeiro capítulo traz elementos da Teoria de Grafos necessários à leitura do trabalho. Ao final de cada capítulo, encontram-se Notas Bibliográficas destinadas a orientar os leitores interessados em prosseguir os estudos neste vasto e profícuo campo de conhecimento.

Esta é uma versão atualizada das Notas de Matemática Aplicada 27, que serviram como texto de um minicurso ministrado no CNMAC-2007. As maiores alterações podem ser percebidas na bibliografia, revisada e atualizada, e nos textos ao final dos capítulos. Algumas demonstrações e exemplos têm agora uma apresentação mais didática e a noção de centralidade foi introduzida de forma mais detalhada; as figuras foram refeitas e vários erros de digitação, certamente não todos, foram corrigidos.

Esperamos com este texto, além de proporcionar uma visão geral das técnicas e da abrangência da Teoria Espectral de Grafos, contribuir para a divulgação desta área tão interessante e promissora.

Rio de Janeiro, 03 de outubro de 2011.

Nair Maria Maia de Abreu  
Renata Raposo Del-Vecchio  
Cybele Tavares Maia Vinagre  
Dragan Stevanović

# Capítulo 1

## Conceitos básicos sobre grafos

### 1.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos as noções básicas e a terminologia própria da Teoria de Grafos estritamente necessárias à compreensão do restante do trabalho. Apresentamos também alguns parâmetros de grafos e certas relações entre eles.

### 1.2 Conceitos básicos

**Definição 1.1.** *Um **grafo** é uma estrutura  $G = G(V, E)$ , constituída por um conjunto finito e não vazio  $V$  cujos elementos são denominados **vértices**, e um conjunto  $E$  de subconjuntos a dois elementos de  $V$  denominados **arestas**. Indicamos por  $|V|$  e  $|E|$ , respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de  $G$ . Se  $u, v \in V$  e  $e = \{u, v\} \in E$ , dizemos que a aresta  $e$  **incide em  $u$  e  $v$** . O **grau de um vértice  $v$** , denotado por  $d(v)$ , é o número de arestas que incidem em  $v$ . Vértices ligados por arestas são ditos **vértices adjacentes**. Quando  $V$  é um conjunto unitário e  $E = \emptyset$  dizemos que  $G$  é o **grafo trivial**.*

No que se segue, consideramos apenas grafos sem arestas ligando

um vértice a ele mesmo (laços), sem arestas múltiplas (mais de uma aresta incidindo no mesmo par de vértices) e sem orientação. Estes grafos são chamados **grafos simples**, mas nos referiremos a eles como **grafos**.

**Exemplo 1.1.** No grafo  $G$  da Figura<sup>1</sup> 1.1,  $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$  e  $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6\}$ , e portanto  $|V| = 5$  e  $|E| = 6$ . As arestas são  $e_1 = \{v_1, v_2\}$ ,  $e_2 = \{v_2, v_3\}$ ,  $e_3 = \{v_4, v_5\}$ ,  $e_4 = \{v_1, v_4\}$ ,  $e_5 = \{v_1, v_5\}$  e  $e_6 = \{v_2, v_5\}$ . Os vértices  $v_1$  e  $v_2$  são adjacentes mas  $v_1$  e  $v_3$  são não adjacentes. Os graus dos vértices são:  $d(v_1) = d(v_2) = d(v_5) = 3$ ,  $d(v_3) = 1$  e  $d(v_4) = 2$ .

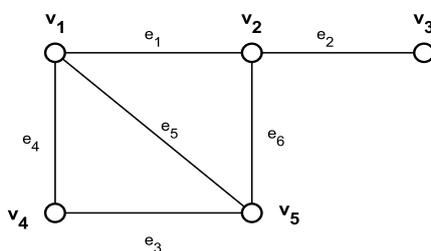


Figura 1.1: Grafo  $G$ .

**Definição 1.2.** Seja  $G = G(V, E)$  um grafo. Quando  $G' = G'(V', E')$  é um grafo satisfazendo  $V' \subset V$  e  $E' \subset E$  escrevemos  $G' \subset G$  e dizemos que  $G'$  é um **subgrafo** de  $G$ . Quando  $G' \subset G$  é tal que dois vértices são adjacentes em  $G'$  se e somente se eles são adjacentes em  $G$ , dizemos que  $G'$  é um **subgrafo induzido** de  $G$ .

Apresentamos a seguir alguns tipos especiais de grafos que aparecerão ao longo deste trabalho.

- **grafo regular de grau  $k$  ou  $k$ -regular:** É um grafo em que todos os vértices têm o mesmo grau  $k$ . A Figura 1.2 mostra um grafo 4-regular.

<sup>1</sup>Os grafos deste trabalho foram, em sua maioria, desenhados com o software *yEd Graph Editor* [77].

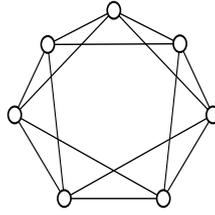


Figura 1.2: Um grafo 4-regular.

- **grafo completo:** É o grafo no qual quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. Para cada  $n \geq 1$ , o grafo completo com  $n$  vértices é  $(n - 1)$ -regular e denotado por  $K_n$ . Na Figura 1.3, vemos o grafo  $K_4$ .

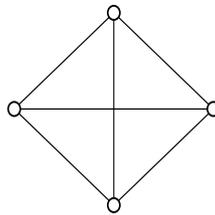
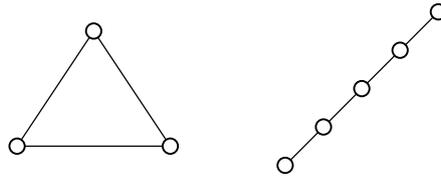
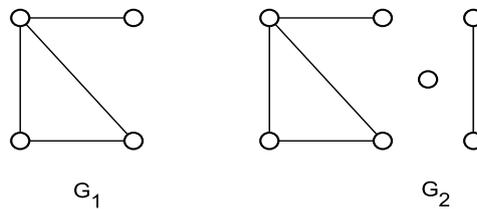


Figura 1.3: Grafo  $K_4$ .

- **cadeias, caminhos e ciclos:** Uma sequência finita  $v_1, v_2, \dots, v_k$  de vértices de um grafo  $G(V, E)$  é dita uma **cadeia** (*walk*) de  $v_1$  a  $v_k$  quando  $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$  para  $1 \leq i \leq k - 1$ . Dizemos que  $v_1, v_2, \dots, v_k$  é uma **cadeia fechada** (respectivamente, **cadeia aberta**) quando  $v_1 = v_k$  (respectivamente,  $v_1 \neq v_k$ ). Um **caminho** (*path*) é uma cadeia em que todos os vértices são distintos. Um caminho fechado é denominado **ciclo**. O **comprimento de um caminho ou de um ciclo** é o número de arestas que ocorrem em cada um. O caminho e o ciclo com  $n$  vértices são denotados, respectivamente, por  $P_n$  e  $C_n$ . Em particular, o ciclo  $C_3$  é chamado **triângulo**. Ver Figura 1.4.
- **grafo conexo:** É um grafo no qual existe um caminho ligando

Figura 1.4:  $C_3$  e  $P_5$ .

cada par de vértices. Em caso contrário, o grafo é denominado **desconexo**. Se  $G$  é um grafo desconexo, dizemos que  $G' \subset G$  é uma **componente conexa** de  $G$  quando  $G'$  é um grafo conexo e não existe um grafo conexo  $H \subset G$  tal que  $G' \subset H$  e  $G' \neq H$ .

Figura 1.5:  $G_1$  é um grafo conexo e  $G_2$  é desconexo com 3 componentes conexas.

- **árvore**: É um grafo conexo e sem ciclos. Um grafo desconexo e sem ciclos é chamado uma **floresta** (ver Figura 1.6).

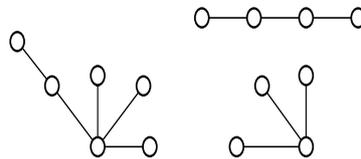


Figura 1.6: Uma floresta com 3 árvores.

- **grafo  $k$ -partido**: É um grafo  $G = G(V, E)$  no qual existe uma partição do conjunto de vértices  $V$  em  $k$  subconjuntos não vazios e disjuntos dois a dois (isto é,  $V = Y_1 \cup \dots \cup Y_k$ , com  $Y_i \cap Y_j = \emptyset$ , para

todo  $i \neq j$ ), de modo que as arestas de  $G$  sejam da forma  $\{p, q\}$  com  $p$  em  $Y_i$  e  $q$  em  $Y_j$ . Portanto, não há vértices adjacentes em um mesmo subconjunto da partição. Quando  $k = 2$ , temos um **grafo bipartido** e quando  $k = 3$ , temos um **grafo tripartido**. Em particular, árvores são grafos bipartidos.

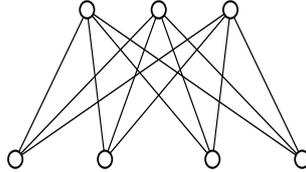


Figura 1.7: O grafo  $K_{3,4}$ .

- **grafo bipartido completo:** É um grafo  $G = G(V_1 \cup V_2, E)$  bipartido tal que cada vértice de  $V_1$  é adjacente a todo vértice de  $V_2$ . Se  $|V_1| = r$  e  $|V_2| = s$ , escrevemos  $G = K_{r,s}$ . O grafo do tipo  $K_{1,n}$  é chamado **estrela**. O grafo  $K_{3,4}$  pode ser visto na Figura 1.7.
- **grafo-linha:** É o grafo  $\ell(G)$  obtido do grafo  $G$  tomando as arestas de  $G$  como vértices de  $\ell(G)$  e ligando dois vértices em  $\ell(G)$  quando as arestas correspondentes em  $G$  possuírem um vértice comum. É fácil ver que se  $G$  é um grafo regular de grau  $k$  então  $\ell(G)$  é um grafo regular de grau  $2k - 2$ . Na Figura 1.8, notar que  $K_4$  é 3-regular e  $\ell(K_4)$  é 4-regular.

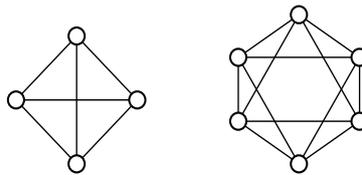


Figura 1.8:  $K_4$  e seu grafo-linha  $\ell(K_4)$ .

- **grafo complementar:** É o grafo  $\overline{G} = \overline{G}(\overline{V}, \overline{E})$  obtido de  $G = G(V, E)$  de tal forma que  $\overline{V} = V$  e  $\{v_i, v_j\} \in \overline{E}$  quando  $\{v_i, v_j\} \notin E$  (ver Figura 1.9).

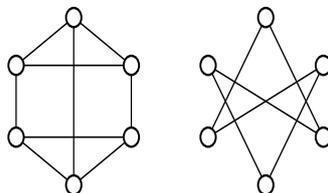


Figura 1.9: Um grafo e seu complementar.

Operações entre grafos permitem obter grafos a partir de grafos dados. Dentre as várias existentes, neste texto trabalharemos com a seguinte:

- **união de grafos:** Dados dois grafos  $G_1 = G_1(V_1, E_1)$  e  $G_2 = G_2(V_2, E_2)$  com  $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ , sua **união** é o grafo  $G_1 \cup G_2$  que tem conjunto de vértices  $V_1 \cup V_2$  e conjunto de arestas  $E_1 \cup E_2$ . Para qualquer grafo conexo  $G$ , escrevemos  $kG$  para indicar o grafo que é a união de  $k$  cópias de  $G$ . A Figura 1.10 mostra a união de 3 cópias de  $K_4$ , ou seja,  $3K_4$ .

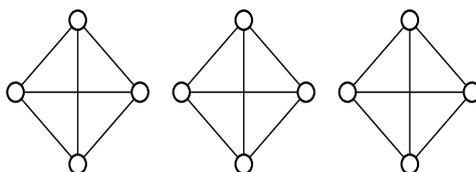


Figura 1.10:  $3K_4$ .

### 1.3 Relações entre alguns parâmetros de grafos

**Definição 1.3.** Seja  $G = G(V, E)$  um grafo. O **grau mínimo** de  $G$  é o número  $\delta = \min\{d(v) : v \in V\}$ . O número  $\Delta = \max\{d(v) : v \in V\}$

é chamado **grau máximo** de  $G$  e  $\bar{d} = \frac{1}{|V|} \sum_{v \in V} d(v)$  é chamado **grau médio** de  $G$ .

As seguintes relações são imediatas a partir das definições:

$$\delta \leq \bar{d} \leq \Delta \quad \text{e} \quad \bar{d} = \frac{2|E|}{|V|}.$$

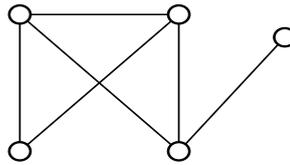


Figura 1.11: Grafo  $G$

**Exemplo 1.2.** No grafo  $G$  da Figura 1.11, temos  $\delta = 1$ ,  $\Delta = 3$  e  $\bar{d} = 2,4$ .

**Definição 1.4.** Seja  $G$  um grafo conexo. Se  $x$  e  $y$  são vértices de  $G$ , chamamos **distância de  $x$  a  $y$**  e denotamos por  $d(x, y)$ , ao mínimo dos comprimentos dos caminhos que ligam  $x$  a  $y$ . O máximo das distâncias entre dois vértices quaisquer de  $G$  é chamado **diâmetro** de  $G$  e denotado por  $\text{diam}(G)$ . Quando  $G$  é um grafo desconexo escrevemos  $\text{diam}(G) = \infty$ .

**Proposição 1.1.** O número de vértices de um grafo  $G$  com diâmetro  $D$  é no máximo igual a  $1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1}$ .

Demonstração: Tomemos um vértice  $v_1$  do grafo  $G$ . Este vértice está ligado no máximo a  $\Delta$  outros vértices. Cada um destes vértices pode estar ligado, no máximo, a  $\Delta - 1$  vértices (pois eles estão ligados a  $v_1$ ), acrescentando então no máximo,  $\Delta(\Delta - 1)$  vértices. Podemos

prosseguir sucessivamente deste modo por  $D-1$  vezes, chegando assim ao resultado desejado, qual seja,

$$|V| \leq 1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1}. \blacksquare$$

**Definição 1.5.** Quando  $G = G(V, E)$  tem diâmetro  $D$  e satisfaz

$$|V| = 1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1},$$

dizemos que  $G$  é um **grafo de Moore**.

**Exemplo 1.3.** O grafo da Figura 1.12 pode ser descrito como  $\overline{\ell(K_5)}$  e tem  $|V| = 10$ ,  $\Delta = 3$  e diâmetro  $D = 2$ . É um exemplo de grafo de Moore conhecido como **grafo de Petersen**.

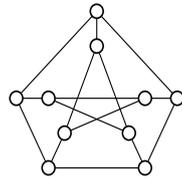


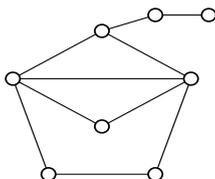
Figura 1.12: Grafo de Petersen.

Existem poucos grafos de Moore. Um problema importante de grafos, conhecido como problema do grau-diâmetro, é o de encontrar o grafo com grau máximo  $\Delta$ , diâmetro  $D$  e o maior número de vértices possível. J-C Bermond, C. Delorme e J. J. Quisquater apresentam em [9] uma tabela com  $\Delta$  variando de 3 a 16, e  $D$  variando de 2 a 10, onde, em cada caso, exibem os grafos com o maior número de vértices.

## 1.4 Exercícios

1. Prove que a soma dos graus dos vértices de um grafo é duas vezes o número de suas arestas.
2. Mostre que em todo grafo o número de vértices de grau ímpar é sempre par.

3. Prove que o complementar de um grafo desconexo é conexo.
4. Para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , seja  $d_i \in \mathbb{N}$ . Prove que  $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$  é a sequência de graus de uma árvore se e somente se  $d_n > 0$  e  $\sum_{i=1}^n d_i = 2(n-1)$ .
5. Prove que todo grafo conexo tem diâmetro finito e determine o diâmetro do grafo  $G$  da Figura 1.13.

Figura 1.13: Grafo  $G$ .

6. Construa o grafo-linha do grafo  $G$  dado na Figura 1.13.
7. Mostre que se  $\ell(G)$  é o grafo-linha de um grafo  $G$  então  $\ell(G)$  não pode ter  $K_{1,3}$  como subgrafo induzido.
8. Mostre que o grafo completo de ordem 5 sem uma aresta,  $K_5 - \{e\}$ , não é grafo-linha de nenhum grafo.
9. Construa todas as árvores com 8 vértices cujo diâmetro é 4.
10. Mostre que um grafo é bipartido se e somente se todo ciclo induzido tem comprimento par.
11. Seja  $G$  um grafo e  $G - \{v\}$  o grafo obtido de  $G$  pela retirada de um de seus vértices. Se  $G - \{v\} = K_{1,3}$ , determine  $G$ .
12. Qual é o número máximo de arestas de um grafo simples e conexo? Determine o(s) grafo(s) que atende(m) a esta propriedade. Responda às mesmas questões para o número mínimo de arestas.
13. Desenhe uma representação para cada grafo com 4 vértices. Verifique quantas delas representam grafos conexos. Quantas representam grafos sem ciclos como seus subgrafos induzidos? Dentre estas, quantas árvores há?

14. Prove que se um grafo com  $m$  arestas e  $n$  vértices tem  $m > \frac{n^2}{4}$  arestas então ele não é bipartido.
15. Os grafos 3-regulares são conhecidos como **grafos cúbicos** ou **3-cubos**. Para  $n \geq 3$ , construa um grafo cúbico sem triângulos e com  $2n$  vértices.

## 1.5 Notas bibliográficas

Os primeiros livros em Teoria dos Grafos surgiram ao final dos anos 60 e início dos anos 70. Hoje a literatura é vasta e rica, com uma série de bons títulos, o que torna mais fácil a tarefa de uma boa indicação, mas quase impossível a tarefa de apresentar a melhor lista de referências aos leitores mais interessados. Recomendamos, então, os livros de Bollobás [14], Diestel [34] e Harary [49], não somente por serem de autores consagrados, mas principalmente porque, através deles, estudantes de graduação, com alguma base em Matemática, podem se iniciar nesta lúdica e fértil área de pesquisa. Dentre uma série de livros e títulos em grafos que abordam estrutura de dados computacionais e descrevem algoritmos e suas complexidades, recomendamos os bons textos em português de Markenzon & Szwarcfiter [74] e Markenzon & Vernet [58], para o primeiro caso, e o de Szwarcfiter [73], mais específico para algoritmos computacionais. Há, também, uma tão vasta bibliografia voltada para aplicações e modelos em grafos que ficaria difícil uma indicação. No entanto, gostaríamos de citar o livro de Boaventura Netto [13], cuja utilização se tornou tradicional nos cursos das escolas brasileiras de Engenharia de Produção e afins.

## Capítulo 2

# Matriz de adjacência

### 2.1 Introdução

A matriz de adjacência é a matriz de zeros e uns que se constroi naturalmente a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo. Começamos o capítulo apresentando os conceitos preliminares associados a esta matriz e algumas das técnicas utilizadas para deduzir propriedades estruturais de grafos a partir dos coeficientes do seu polinômio característico e do seu espectro. Na primeira seção apresentamos ainda algumas relações entre os autovalores da matriz de adjacência e os parâmetros de grafos introduzidos no Capítulo 1 e fazemos uma breve introdução à noção de centralidade. A segunda seção traz alguns dos métodos utilizados na determinação do espectro de um grafo e uma subseção que apresenta os grafos circulantes e seus espectros. Na seção seguinte estudamos isomorfismo de grafos e conceitos relacionados. Como aplicação do estudo realizado no capítulo, dedicamos a última seção à *energia de grafos*, conceito que é definido em função dos autovalores da matriz de adjacência e que, surgido no contexto da Química Orgânica, vem despertando cada vez mais o interesse de matemáticos estudiosos da Teoria Espectral de Grafos.

## 2.2 Polinômio característico e espectro de um grafo

**Definição 2.1.** *Seja  $G = G(V, E)$  um grafo com  $n$  vértices. A **matriz de adjacência**  $A(G)$  de  $G$  é a matriz quadrada de ordem  $n$  cujas entradas são*

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E \text{ para } v_i, v_j \in V; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

$A(G)$  é uma matriz real e simétrica, formada por uns e zeros. Todos os seus autovalores são reais. Como o traço de  $A(G)$  é zero então seus autovalores somam zero.

**Definição 2.2.** *O polinômio característico da matriz de adjacência  $A(G)$  de um grafo  $G$ , ou seja,  $\det(\lambda I - A(G))$ , é denominado **polinômio característico de  $G$**  e denotado por  $p_G(\lambda)$ ;  $\lambda$  é dito um **autovalor do grafo  $G$**  quando  $\lambda$  é uma raiz de  $p_G(\lambda)$ . Se  $A(G)$  possui  $s$  autovalores distintos  $\lambda_1 > \dots > \lambda_s$  com multiplicidades iguais, respectivamente, a  $m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_s)$ , o **espectro do grafo  $G$** , denotado  $\text{spect}(G)$ , é definido como a matriz  $2 \times s$ , onde a primeira linha é constituída pelos autovalores distintos de  $A(G)$  dispostos em ordem decrescente e a segunda, pelas suas respectivas multiplicidades algébricas. Ou seja, escrevemos*

$$\text{spect}(G) = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & \lambda_s \\ m(\lambda_1) & \cdots & m(\lambda_s) \end{bmatrix}.$$

O maior autovalor de  $G$  é denominado **índice de  $G$**  e denotado por  $\text{ind}(G)$ .

**Exemplo 2.1.** *Seja  $G$  o grafo da Figura 2.1. Sua matriz de adjacência é*

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

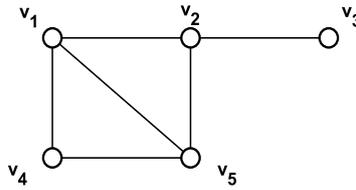


Figura 2.1: Grafo  $G$ .

Seu polinômio característico é  $p_G(\lambda) = \lambda^5 - 6\lambda^3 - 4\lambda^2 + 3\lambda + 2$  e seu espectro é

$$\text{spect}(G) = \begin{bmatrix} 2,6412 & 0,7237 & -0,5892 & -1 & -1,7757 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Portanto  $\text{ind}(G) = 2,6412$ .

Devemos notar que a soma das entradas de cada linha da matriz de adjacência de um grafo é igual ao grau do vértice correspondente.

A proposição a seguir é um primeiro exemplo de como propriedades estruturais de grafos são descritas por propriedades algébricas de matrizes associadas a eles.

**Proposição 2.1.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas e seja*

$$p_G(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \dots + a_{n-1}\lambda + a_n$$

*o polinômio característico de  $G$ . Então os coeficientes de  $p_G(\lambda)$  satisfazem:*

- (i)  $a_1 = 0$ ;
- (ii)  $a_2 = -m$ ;
- (iii)  $a_3 = -2t$ , onde  $t$  é o número de triângulos no grafo.

Demonstração: Da teoria de matrizes ([50]) temos que, para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq s$ ,  $(-1)^i a_i =$  soma dos menores principais de  $A(G)$  com  $i$  linhas e  $i$  colunas, onde um **menor principal de  $A(G)$  com  $i$  linhas e**

$i$  **colunas** é o determinante de qualquer **submatriz principal** de  $A(G)$ , ou seja, de qualquer matriz obtida de  $A(G)$  pela retirada de um subconjunto de  $n - i$  linhas e do correspondente subconjunto de colunas.

i) Como a diagonal de  $A(G)$  é formada por zeros então todos os seus menores principais com 1 linha e 1 coluna são iguais a zero, de onde segue que  $a_1 = 0$ .

ii) Qualquer menor principal de  $A(G)$  com 2 linhas e 2 colunas e que tenha entradas não-nulas é necessariamente da forma

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Como cada menor principal destes vale  $-1$  e existe um deles para cada par de vértices adjacentes temos que

$$(-1)^2 a_2 = (-1) \cdot |E| = (-1)m.$$

Logo,  $a_2 = -m$ , quando  $m$  é o número de arestas de  $G$ .

iii) Existem 3 possibilidades para menores principais de  $A(G)$  com 3 linhas e 3 colunas não todas nulas, a saber:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Destes, o único não nulo é o último, cujo valor é 2, e que corresponde a três vértices mutuamente adjacentes, ou seja, um triângulo. Logo  $(-1)^3 a_3 = 2 \times t$ , onde  $t$  é o número de triângulos de  $G$ . Assim,  $a_3 = -2t$ , como queríamos. ■

**Proposição 2.2.** *O número de cadeias de comprimento  $l$  ligando o vértice  $v_i$  ao vértice  $v_j$  em um grafo  $G$  é dado pela entrada de ordem  $i \times j$  da matriz  $A^l$ , onde  $A = A(G)$  é a matriz de adjacência de  $G$ .*

Demonstração: (Por indução em  $l$ ) O resultado é verdadeiro para  $l = 1$  pois  $A^1 = A$ . Suponhamos o resultado verdadeiro para  $l = L$ . Mas

existem tantas cadeias de comprimento  $L + 1$  ligando  $v_i$  a  $v_j$  quantas são as cadeias de comprimento  $L$  ligando  $v_i$  a vértices  $v_h$  adjacentes a  $v_j$ . Assim, o número de tais cadeias é dado por

$$\sum_{\{v_h, v_j\} \in E} (A^L)_{ih} = \sum_{h=1}^n (A^L)_{ih} A_{hj} = (A^{L+1})_{ij}.$$

Segue-se que o número de cadeias de comprimento  $L + 1$  ligando  $v_i$  a  $v_j$  é  $(A^{L+1})_{ij}$ . O resultado segue por indução. ■

O resultado acima fornece uma relação entre o número de cadeias fechadas de um grafo e as somas de potências de seus autovalores, como se vê no seguinte resultado.

**Corolário 2.1.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas e sejam  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  os seus autovalores. Então:*

- (i) *se  $T_l$  é o número total de cadeias fechadas de comprimento  $l$  em  $G$  então  $T_l = \text{tr}(A^l)$ . Portanto,  $T_l = \sum_{i=1}^n \lambda_i^l$ . Em particular:*
- (ii) *a soma dos quadrados dos autovalores é duas vezes o número de arestas, ou seja,  $\text{tr}(A^2) = 2m$ ;*
- (iii) *se  $G$  é um grafo regular de grau  $k$  então  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = kn$ , pois  $kn = 2m$ ;*
- (iv) *a soma dos cubos dos autovalores é seis vezes o número  $t$  de triângulos, ou seja,  $\text{tr}(A^3) = 6t$ .*

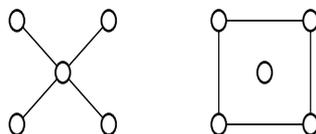


Figura 2.2: Grafos coespectrais com diferentes números de ciclos.

Vemos então que o espectro de um grafo determina o número de seus vértices, de suas arestas e de seus triângulos. No entanto, este fato não pode ser generalizado, ou seja, nem sempre os ciclos de comprimento  $r$  ( $r \geq 4$ ) são determinados em função de  $\text{tr}(A^r)$ . Os dois



então  $A + A^2 + \dots + A^9$  é a matriz

$$\begin{bmatrix} 31 & 119 & 87 & 133 & 46 & 46 & 114 & 27 & 55 & 9 \\ 119 & 118 & 366 & 133 & 234 & 46 & 114 & 114 & 55 & 55 \\ 87 & 366 & 278 & 467 & 188 & 188 & 366 & 87 & 234 & 46 \\ 133 & 133 & 467 & 200 & 421 & 96 & 133 & 133 & 124 & 124 \\ 46 & 234 & 188 & 421 & 232 & 233 & 234 & 46 & 311 & 78 \\ 46 & 46 & 188 & 96 & 233 & 58 & 46 & 46 & 78 & 78 \\ 114 & 114 & 366 & 133 & 234 & 46 & 118 & 119 & 55 & 55 \\ 27 & 114 & 87 & 133 & 46 & 46 & 119 & 31 & 55 & 9 \\ 55 & 55 & 234 & 124 & 311 & 78 & 55 & 55 & 108 & 109 \\ 9 & 55 & 46 & 124 & 78 & 78 & 55 & 9 & 109 & 30 \end{bmatrix},$$

que tem todas as entradas diferentes de zero, garantindo a conexidade do grafo.

O Teorema 2.2 a seguir, conhecido como *Teorema de entrelaçamento para matriz de adjacência*, nos dá uma relação entre os autovalores de um grafo e os autovalores do subgrafo obtido pela retirada de um dos seus vértices. A prova decorre do teorema geral de matrizes enunciado a seguir, que pode ser encontrado em [50]. Escrevemos  $\mathbb{M}_n$  para indicar o conjunto de todas as matrizes quadradas de ordem  $n$ .

**Teorema 2.1.** *Sejam  $A \in \mathbb{M}_n$  uma matriz simétrica e  $B \in \mathbb{M}_{n-j}$  uma submatriz principal de  $A$ . Então  $\lambda_{j+1}(A) \leq \lambda_j(B) \leq \lambda_j(A)$ , para todo  $j \in \{1, 2, \dots, n-j\}$ , onde os  $\lambda_j(A)$  são os autovalores de  $A$  e os  $\lambda_j(B)$  são os autovalores de  $B$ .*

**Teorema 2.2.** *Sejam  $G = G(V, E)$  e  $v_i \in V$ . Se  $G' = G - \{v_i\}$  então  $\lambda_{j+1}(G) \leq \lambda_j(G') \leq \lambda_j(G)$ , para todo  $j \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ .*

Demonstração: Basta notar que retirar o vértice  $v_i$  do grafo  $G$  corresponde a retirar a  $i$ -ésima linha e a  $i$ -ésima coluna da matriz de adjacência de  $G$ . ■

Quando usamos grafos para modelar redes, uma questão relevante é destacar os vértices mais importantes naquele contexto, isto é, os

vértices mais influentes na rede. Esta influência ou importância do vértice depende do tipo de relação modelada, representada pelas arestas do grafo, e é avaliada por meio de medidas de centralidade. Dentre as mais conhecidas estão a centralidade de grau (*degree centrality*), também chamada centralidade de informação, [39], a centralidade de intermediação (*betweenness centrality*), [38], e a centralidade de proximidade (*closeness centrality*), [70]. Todas estas são medidas não espectrais.

Em 1987, Bonacich [15] propôs uma medida de centralidade a partir de um autovetor associado ao índice do grafo.

Antes de apresentar a definição vamos relembrar alguns resultados de Álgebra Linear.

**Definição 2.3.** *O raio espectral de um grafo  $G$ , denotado por  $\rho(G)$ , é o número real não negativo  $\rho(G) = \max_i |\lambda_i|$ , onde  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  são os autovalores de  $G$ .*

Portanto, o raio espectral de um grafo é o raio do intervalo de centro na origem que contém todos os autovalores de  $G$ .

Seja  $G$  um grafo conexo. O Teorema de Perron-Frobenius, cuja prova pode ser encontrada em [50], garante que o raio espectral é o índice do grafo, pois grafos conexos têm matrizes de adjacência irredutíveis. E também que  $\rho(G)$  é positivo e tem multiplicidade algébrica igual a 1. Portanto, a multiplicidade geométrica é também 1, isto é, o espaço gerado pelos autovetores associados ao índice é unidimensional. O Teorema de Perron-Frobenius garante ainda que existe um autovetor associado ao índice com todas as coordenadas não negativas. Isto permite introduzir uma nova medida de centralidade de vértice de um grafo.

**Definição 2.4.** *A centralidade de autovetor  $x_i$  do vértice  $v_i$  é a  $i$ -ésima coordenada do autovetor unitário não negativo  $x = [x_1 \dots x_n]^T$  associado ao índice  $\lambda_1$  do grafo, ou seja,*

$$x_i = \frac{1}{\lambda_1} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j,$$

onde  $a_{ij}$  são as entradas da matriz de adjacência.

Note-se que, como a multiplicidade do raio espectral é 1, qualquer autovetor não negativo fornece a mesma ordenação para os vértices.

**Exemplo 2.3.** *Considere o grafo da Figura 2.1. Como já vimos no Exemplo 2.1, o índice deste grafo é 2,6412. Um autovetor associado a ele é  $x = [0, 5370, 0, 4747, 0, 1797, 0, 4066, 0, 5370]$ . Embora os vértices  $v_1, v_2$  e  $v_5$  tenham o mesmo grau (e portanto a mesma centralidade de grau) os vértices  $v_1$  e  $v_5$  têm centralidade de autovetor maior do que a do vértice  $v_2$ .*

Em muitas aplicações essa medida tem se mostrado mais adequada que as outras medidas citadas anteriormente. Isto se deve ao fato de a centralidade de autovetor de um vértice considerar, além do grau do próprio vértice, também o grau de seus vizinhos, dos vizinhos dos seus vizinhos, e assim por diante. Esta afirmação é decorrência do Método da Potência (ver [67]) aplicado à matriz de adjacência  $A$  (o método pode ser usado para esta matriz pois ela é diagonalizável e  $\lambda_1$  é o raio espectral). Verifica-se facilmente que a matriz  $A$  multiplicada pelo vetor  $\mathbf{1} = [1 \dots 1]^T$  fornece o vetor de graus dos vértices, que  $A^2 \cdot \mathbf{1}$  fornece o vetor da soma dos graus dos vizinhos de cada vértice, e assim por diante. O Método da Potência diz que a sequência  $(A^n \cdot \mathbf{1})_n$  converge para um autovetor associado a  $\lambda_1$  quando  $n \rightarrow \infty$ .

A centralidade de autovetor é, portanto, a medida mais conveniente quando se estuda propagação de um fenômeno numa rede, como por exemplo, no estudo de expansão de epidemias. Em [11] e [16] a centralidade de autovetor é usada para estudar *AIDS*. Em [41], esta centralidade é aplicada a uma rede de transportes.

As duas próximas proposições relacionam os autovalores de um grafo e alguns dos parâmetros apresentados no primeiro capítulo.

**Proposição 2.3.** *Se  $G$  é um grafo conexo então o número de autovalores distintos de  $A$  é no mínimo  $\text{diam}(G) + 1$ .*

Demonstração: Sejam  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t$  os autovalores distintos de  $G$ . Como  $A$  é uma matriz simétrica e real, seu polinômio mínimo tem grau  $t$  e portanto

$$(A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I) \cdots (A - \lambda_t I) = 0.$$

Logo  $A^t$  é uma combinação linear de  $I, A, A^2, \dots, A^{t-1}$ . Suponhamos  $t \leq \text{diam}(G)$  e tomemos  $u$  e  $v$  dois vértices de  $G$  tais que  $d(u, v) = t$ . Então  $(A^t)_{uv} = 0$  para todo  $i$  com  $0 \leq i \leq t-1$  e  $(A^t)_{uv} > 0$ , o que é uma contradição. Portanto  $t \geq \text{diam}(G) + 1$ . ■

**Proposição 2.4.** *Se  $G$  é um grafo com maior autovalor  $\lambda_1$  então*

$$\bar{d} \leq \lambda_1 \leq \Delta.$$

Demonstração: Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices. Sendo  $A$  a matriz de adjacência de  $G$  e  $\lambda_1$  seu maior autovalor, o teorema de Raleigh-Ritz [50] garante que

$$\lambda_1 = \max_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}.$$

Seja  $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T$ . Então temos que

$$\frac{\mathbf{1}^T A \mathbf{1}}{\mathbf{1}^T \mathbf{1}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n a_{ij} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d(v_i) = \bar{d}$$

e, portanto,  $\bar{d} \leq \lambda_1$ . Agora, a função  $N$  definida por

$$N(M) = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n m_{ij},$$

para  $M = (m_{ij})$  em  $\mathbb{M}_n$ , define uma norma sobre  $\mathbb{M}_n$ . Notar que  $N(A) = \Delta$ . Se  $\lambda$  é um autovalor de  $A$ , o Teorema de Perron-Frobenius [50] afirma que  $|\lambda| \leq \lambda_1$ ; além disso, existe no mínimo um autovalor  $\lambda$  tal que  $|\lambda| = \lambda_1$ . Se  $Ax = \lambda x$  para  $x \neq 0$  e se  $|\lambda| = \lambda_1$ , consideremos a matriz  $X$  de  $\mathbb{M}_n$  cujas colunas são todas iguais ao autovetor  $x$  e observemos que  $AX = \lambda X$ . Então

$$|\lambda|N(X) = N(\lambda X) = N(AX) \leq N(A)N(X)$$

e daí  $|\lambda| = \lambda_1 \leq N(A) = \Delta$ . ■

Na próxima proposição, vemos como técnicas de otimização são usadas para estabelecer um limite superior para o índice de um grafo. Técnicas de otimização combinatória são usadas em *softwares* elaborados para resolver problemas em grafos, como por exemplo, o *Autographix System*. Este *software*, criado por Pierre Hansen e Gilles Caporossi, tem por objetivo gerar conjecturas, fazer provas semiautomáticas e analisar e descrever classes de grafos [18]. O problema de encontrar um grafo com determinadas propriedades é transformado em um problema de otimização com a função-objetivo envolvendo um ou mais invariantes e, possivelmente, com algumas restrições.

**Proposição 2.5.** *Se  $G$  é um grafo com  $m$  arestas,  $n$  vértices e autovalores  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  então*

$$\lambda_1 \leq \sqrt{2m \left(1 - \frac{1}{n}\right)}.$$

Demonstração: Pelo Corolário 2.1 temos que  $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = 0$  e  $\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 = 2m$ . Sejam  $f$ ,  $g$  e  $h$  funções de  $\mathbb{R}^n$  em  $\mathbb{R}$  definidas por  $f(x_1, \dots, x_n) = x_1$ ,  $g(x_1, \dots, x_n) = x_1 + x_2 + \dots + x_n$  e  $h(x_1, \dots, x_n) = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$ .

Consideremos o seguinte problema de maximização com restrições de igualdade:

$$\max f(x_1, \dots, x_n)$$

sujeito às restrições

$$g(x_1 \dots x_n) = 0; \quad \text{e}$$

$$h(x_1 \dots x_n) = 2m.$$

Definimos então a Lagrangeana

$$L(x_1, \dots, x_n, k_1, k_2) = x_1 - k_1(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - k_2(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 - 2m)$$

e, resolvendo por multiplicadores de Lagrange, obtemos:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 1 - k_1 - 2k_2x_1 = 0; \quad (2.2.1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -k_1 - 2k_2x_i = 0, \quad \text{para todo } i, \quad 2 \leq i \leq n; \quad (2.2.2)$$

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0; \quad (2.2.3)$$

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = 2m. \quad (2.2.4)$$

Temos que  $k_2 \neq 0$ , pois, caso contrário,  $k_1$  seria simultaneamente igual a 0 e 1. Daí, segue de (2.2.2) que, para cada  $i$ ,  $2 \leq i \leq n$ ,  $x_i = \frac{-k_1}{2k_2}$ . De (2.4), segue então que  $x_1 + (n-1)\left(\frac{-k_1}{2k_2}\right) = 0$ . Logo,  $x_1 = -(n-1)\left(\frac{-k_1}{2k_2}\right)$ , e portanto,

$$x_1 = (n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right). \quad (2.2.5)$$

Substituindo (2.2.5) em (2.2.4), obtemos

$$\begin{aligned} (n-1)^2\left(\frac{k_1}{2k_2}\right)^2 + (n-1)\left(\frac{k_1}{-2k_2}\right)^2 &= (n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right)^2(n-1+1) = \\ &= n(n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right)^2 = 2m. \end{aligned}$$

Segue daí que  $\frac{k_1}{2k_2} = \sqrt{\frac{2m}{n(n-1)}}$ . Voltando a (2.2.5), obtemos

$$x_1 = (n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right) = (n-1)\sqrt{\frac{2m}{n(n-1)}} =$$

$$\sqrt{(n-1)^2\frac{2m}{n(n-1)}} = \sqrt{2m\left(1 - \frac{1}{n}\right)}.$$

■

## 2.3 O espectro de certos tipos de grafos

A determinação do espectro de um grafo com mais do que 4 vértices pelo cálculo direto das raízes de seu polinômio característico é realizada para grafos particulares com o auxílio de *softwares* de computação algébrica. Existem alguns *softwares* específicos para o trabalho com grafos. Um deles é o *NewGraph*, construído pelo quarto coautor destas Notas e disponível em

<http://www.sgt.pep.ufrj.br/index.php><sup>1</sup>.

Voltando ao espectro, a abordagem teórica direta da questão é bastante árdua e fornece às vezes resultados difíceis de serem manipulados. Alternativamente, alguns teoremas determinam o espectro de grafos obtidos a partir de outros por operações como o complementar, a união, etc.. Outros resultados fornecem apenas informações sobre alguns dos autovalores. E há aqueles que fornecem diretamente o espectro de certos tipos especiais de grafos por meio de algum artifício de prova. No cômputo geral, são conhecidos os espectros apenas de algumas poucas classes de grafos.

**Proposição 2.6.** *Se o grafo  $G$  é a união de dois grafos  $G_1$  e  $G_2$  então  $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) \cdot p_{G_2}(\lambda)$ . Em particular, se  $G_1, G_2, \dots, G_r$  são as componentes conexas de um grafo  $G$  então  $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) p_{G_2}(\lambda) \dots p_{G_r}(\lambda)$ .*

Demonstração: Se  $A_i$  é a matriz de adjacência de  $G_i$  ( $i = 1, 2$ ), então a matriz de adjacência  $A(G)$  de  $G$  é da forma

$$\begin{bmatrix} A_1 & O \\ O & A_2 \end{bmatrix}.$$

Pelo teorema de expansão de Laplace para determinantes [50], obtemos  $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) \cdot p_{G_2}(\lambda)$ . ■

No próximo resultado, merece destaque a técnica de utilizar um especial autovetor para garantir que  $k$  é autovalor de qualquer grafo  $k$ -regular.

---

<sup>1</sup>Último acesso em 26 de setembro de 2011. Usado neste trabalho, este *software* calcula diversos invariantes a partir do desenho do grafo.

**Proposição 2.7.** *Seja  $G$  um grafo regular de grau  $k$ . Então:*

- (i)  $k$  é um autovalor de  $G$ ;
- (ii)  $G$  é um grafo conexo se e somente se a multiplicidade de  $k$  é 1;
- (iii) qualquer autovalor  $\lambda$  de  $G$  satisfaz  $|\lambda| \leq k$ .

Demonstração: (i) Seja  $\mathbf{1}$  o vetor coluna  $[1\ 1\ \dots\ 1]^T$ . Como a soma das entradas de cada linha da matriz de adjacência  $A = A(G)$  de  $G$  é  $k$ , o grau de cada vértice, temos que  $A\mathbf{1} = k\mathbf{1}$ , ou seja,  $k$  é um autovalor de  $G$ .

(ii) Seja  $x = [x_1x_2\dots x_n]^T$  um autovetor associado ao autovalor  $k$  de  $G$  ( $Ax = kx$ ) e suponhamos que  $x_j$  é uma entrada de  $x$  com valor absoluto máximo. Temos que  $(Ax)_j = \sum x_i$ , onde o somatório é considerado sobre os  $k$  vértices  $v_i$  que são adjacentes a  $v_j$ . Logo  $\sum x_i = kx_j$ . Daí temos que, para cada  $l$  tal que  $v_l$  é adjacente a  $v_j$ ,

$$|x_j| + (k-1)|x_j| = \left| \sum x_i \right| \leq \sum |x_i| \leq |x_l| + (k-1)|x_j|.$$

Isto nos fornece  $|x_j| \leq |x_l|$  e, portanto,  $x_l = x_j$  para todos estes  $k$  vértices. Como  $G$  é conexo, podemos prosseguir sucessivamente desta maneira até mostrar que todas as entradas de  $x$  são iguais. Então  $x$  é múltiplo de  $\mathbf{1}$  e o autoespaço associado ao autovalor  $k$  tem dimensão 1.

Suponhamos agora que  $k$  possua multiplicidade 1. Se  $G$  é desconexo, tomemos  $G_1, G_2, \dots, G_m$  as componentes conexas de  $G$ . Como cada uma é um grafo conexo  $k$ -regular então  $k$  é um autovalor de multiplicidade 1 para cada  $G_i$ . Mas como  $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) \cdot p_{G_2}(\lambda) \cdot \dots \cdot p_{G_m}(\lambda)$  (Proposição 2.6), segue que  $k$  é um autovalor de  $G$  de multiplicidade  $m$ , contrariando a hipótese. Logo,  $G$  é conexo.

(iii) Seja  $y$  um vetor não nulo de  $G$  associado a um autovalor  $\lambda$  de  $G$  e seja  $y_j$  uma entrada de  $y$  com valor absoluto máximo. Como em (ii), temos  $\sum y_i = \lambda y_j$  e  $|\lambda||y_j| = \left| \sum y_i \right| \leq k|y_j|$ . Logo,  $|\lambda| \leq k$ . ■

De modo geral, não conhecemos todo o espectro de um grafo  $k$ -regular. Mas, dado que conhecemos seus autovalores, podemos determinar os autovalores do seu grafo complementar.

**Proposição 2.8.** *Seja  $G$  um grafo  $k$ -regular com  $n$  vértices e autovalores  $k, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ . Então os autovalores de  $\overline{G}$  são  $n - k - 1, -1 - \lambda_2, -1 - \lambda_3, \dots, -1 - \lambda_n$ , respectivamente associados aos mesmos autovetores de  $G$ .*

Demonstração: É fácil verificar que a matriz de adjacência  $A(\overline{G})$  de  $\overline{G}$  é dada por

$$A(\overline{G}) = J - I - A(G),$$

onde  $J$  é a matriz quadrada de ordem  $n$  em que todas as entradas são iguais a 1. Seja  $\{\mathbf{1}, u_2, \dots, u_n\}$  uma base ortogonal de autovetores de  $A(G)$  associados, respectivamente, aos autovalores  $k, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . Como  $A(G).\mathbf{1} = k.\mathbf{1}$  então

$$A(\overline{G}).\mathbf{1} = (J - I - A(G)).\mathbf{1} = (n - k - 1).\mathbf{1},$$

e portanto,  $\mathbf{1}$  é autovetor de  $\overline{G}$  associado ao autovalor  $n - k - 1$ . Além disso, para cada  $i, 2 \leq i \leq n$ ,

$$A(\overline{G}).u_i = (J - I - A(G)).u_i = -u_i - \lambda_i.u_i = (-1 - \lambda_i).u_i,$$

de onde segue que  $u_i$  é autovetor de  $\overline{G}$  associado ao autovalor  $-1 - \lambda_i$ . ■

**Exemplo 2.4.** *Se  $G$  é o grafo sem arestas com  $n$  vértices então  $p_G(\lambda) = \lambda^n$  e, portanto,*

$$\text{spect}(G) = \begin{bmatrix} 0 \\ n \end{bmatrix}.$$

**Exemplo 2.5.**  *$K_n$ , o grafo completo com  $n$  vértices, é o complementar do grafo do Exemplo anterior, que é 0-regular. Tem-se então que  $p_{K_n}(\lambda) = (\lambda - n + 1)(\lambda + 1)^{(n-1)}$  e*

$$\text{spect}(K_n) = \begin{bmatrix} n - 1 & -1 \\ 1 & n - 1 \end{bmatrix}.$$

**Exemplo 2.6.** *Se  $G$  é o grafo formado pela união de  $s$  cópias de  $K_2$  então  $G$  é 1-regular e tem  $2s$  vértices. Como vimos,  $p_{K_2}(\lambda) = \lambda^2 - 1$*

e, portanto, pela Proposição 2.6,  $p_G(\lambda) = (\lambda^2 - 1)^s$ . Logo

$$\text{spect}(G) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ s & s \end{bmatrix}.$$

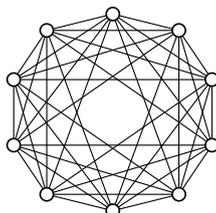


Figura 2.3: O hiperoctaedro  $H_5$ .

O grafo complementar de  $G$  é chamado **hiperoctaedro** (ou cocktail party graph) e denotado por  $H_s$  (ver Figura 2.3).

Pela Proposição 2.8, temos que

$$\text{spect}(\overline{G}) = \begin{bmatrix} 2s - 2 & 0 & -2 \\ 1 & s & s - 1 \end{bmatrix}.$$

Veremos no Exemplo 2.10, uma outra forma de calcular o espectro deste grafo.

**Exemplo 2.7.** Seja  $G$  um grafo bipartido cujo conjunto de vértices é particionado em dois subconjuntos disjuntos  $V_1$  e  $V_2$ , com  $|V_1| = k_1$  e  $|V_2| = k_2$ . Se rotulamos primeiramente os vértices de  $V_1$  e só depois os de  $V_2$ , conseguimos que a matriz de adjacência tenha a forma

$$A(G) = \begin{bmatrix} O & B \\ B^T & O \end{bmatrix},$$

onde  $B$  é uma matriz  $k_1 \times k_2$ . Afirmamos que  $\lambda$  é autovalor de  $G$  se e somente se  $-\lambda$  é autovalor de  $G$ . De fato, tomemos um autovetor  $x = [x_1 \dots x_{k_1} \ y_1 \dots y_{k_2}]^T$  de  $A(G)$  associado ao autovalor  $\lambda$  de  $G$ . Vamos mostrar que  $-\lambda$  é também autovalor de  $G$ , exibindo um de seus

autovetores associados, a saber,  $\tilde{x} = [x_1 \dots x_{k_1} - y_1 \dots - y_{k_2}]^T$ .  
 Realmente, como  $(A(G)x)^T = \lambda x^T$  então

$$\left[ B \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{k_2} \end{bmatrix} \quad B^T \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{k_1} \end{bmatrix} \right] = [\lambda x_1 \dots \lambda x_{k_1} \lambda y_1 \dots \lambda y_{k_2}].$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} (A(G)\tilde{x})^T &= \left[ B \begin{bmatrix} -y_1 \\ \vdots \\ -y_{k_2} \end{bmatrix} \quad B^T \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{k_1} \end{bmatrix} \right] = \\ &= [-\lambda x_1 \dots -\lambda x_{k_1} \lambda y_1 \dots \lambda y_{k_2}] = \\ &= (-\lambda) [x_1 \dots x_{k_1} - y_1 \dots - y_{k_2}] = (-\lambda)\tilde{x}^T. \end{aligned}$$

### 2.3.1 Grafos circulantes e seus espectros

Os grafos circulantes formam uma subclasse da classe dos grafos regulares. Para eles é possível dar uma descrição completa do espectro.

**Definição 2.5.** Consideremos  $n \in \mathbb{N}^*$  e representemos o anel dos inteiros módulo  $n$  por  $\mathbb{Z}_n = \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ . Dados  $l \in \mathbb{N}^*$  e inteiros  $k_1 < k_2 < \dots < k_l \in \{1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\}$ , dizemos que um grafo  $G$  com conjunto de vértices  $V = \{0, 1, \dots, n-1\}$  é **circulante** quando os vértices adjacentes a cada vértice  $i$  são exatamente  $i + k_r$  e  $i - k_r$  reduzidos módulo  $n$ , para  $r = 1, 2, \dots, l$ . Neste caso, escrevemos  $G = Ci(n, k_1, \dots, k_l)$ .

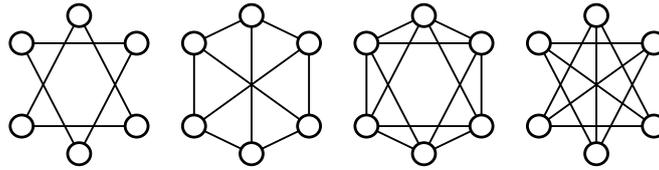


Figura 2.4:  $Ci(6, 2)$ ,  $Ci(6, 1, 3)$ ,  $Ci(6, 1, 2)$  e  $Ci(6, 2, 3)$ .

Assim, por exemplo, para  $n = 5$ ,  $Ci(5, 1) = Ci(5, 2) = C_5$ . Para  $n = 6$ ,  $Ci(6, 1) = C_6$  e  $Ci(6, 1, 2, 3) = K_6$ . Na Figura 2.4 ilustramos os outros grafos circulantes com  $n = 6$  vértices. De modo geral,  $Ci(n, 1) = C_n$ , para todo inteiro  $n \geq 3$  e  $Ci(n, 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor) = K_n$ , para cada  $n \geq 2$ .

Dado  $G = Ci(n, k_1, \dots, k_l)$  um grafo circulante, onde  $n, l, k_1, \dots, k_l$  são escolhidos como acima, temos que a matriz de adjacência  $A = [a_{ij}]$  de  $G$  satisfaz  $a_{i,j} = a_{0,j-i}$ , onde os índices pertencem a  $\{0, 1, 2, \dots, n-1\}$  e são reduzidos módulo  $n$ . De fato, o vértice 0 é adjacente ao vértice  $j - i \pmod{n}$  em  $G \Leftrightarrow j - i = k_r \pmod{n}$  ou  $j - i = -k_r \pmod{n}$ , para algum  $k_r$  da lista  $k_1, \dots, k_l \Leftrightarrow j = i + k_r \pmod{n}$  ou  $j = i - k_r \pmod{n}$ , ou seja, o vértice  $i$  é adjacente ao vértice  $j$  em  $G$ .  $A$  é o que se chama uma **matriz circulante**. Portanto, a matriz de adjacência de qualquer grafo circulante é determinada por sua primeira linha, sendo cada linha  $i$  a seguir, obtida da primeira pela permutação cíclica de  $i$  posições.

A teoria de matrizes circulantes afirma que: se  $[0, a_1, a_2, \dots, a_{n-1}]$  é a primeira linha de uma matriz circulante  $C$  então, considerando-se o polinômio  $q(\lambda) = a_1\lambda + a_2\lambda^2 + \dots + a_{n-1}\lambda^{n-1}$ , temos que os autovalores de  $C$  são dados exatamente por  $q(\omega) = \sum_{j=1}^{n-1} a_j\omega^j$ , para cada raiz  $n$ -ésima da unidade  $\omega$ , (ver [8], por exemplo).

Pelo que foi visto acima, a primeira linha da matriz de adjacência de  $G = Ci(n; k_1, k_2, \dots, k_l)$ , que corresponde ao vértice 0, possui 1 nas posições  $k_1, k_2, \dots, k_l, n - k_1, n - k_2, \dots, n - k_l$  e 0 nas posições restantes.

Daí, se fazemos  $\omega = e^{\frac{2\pi i}{n}}$ , os autovalores de  $G$  podem ser escritos como

$$\lambda_j = \sum \{\omega^{jk} : 1 \leq k \leq n-1, k = k_r, n - k_r \text{ para } r = 1, 2, \dots, l\},$$

onde  $j = 0, 1, \dots, n-1$ .

Para  $j = 0$ , obtemos assim

$$\lambda_0 = \sum_{r=1}^l \omega^{0 \cdot k_r} + \sum_{r=1}^l \omega^{0 \cdot (n - k_r)} = 2l.$$

Fixemos, por um momento,  $j \in \mathbb{N}$  tal que  $1 \leq j \leq n - 1$ . Temos que

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \sum_{r=1}^l w^{jk_r} + \sum_{r=1}^l w^{j(n-k_r)} \\ &= \sum_{r=1}^l e^{\frac{2\pi i}{n} j k_r} + \sum_{r=1}^l e^{\frac{2\pi i}{n} j (n-k_r)} \\ &= \sum_{r=1}^l \left( \cos k_r \frac{2\pi j}{n} + i \operatorname{sen} k_r \frac{2\pi j}{n} \right) + \sum_{r=1}^l \left( \cos(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} + i \operatorname{sen}(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} \right) \\ &= \sum_{r=1}^l \left( \cos k_r \frac{2\pi j}{n} + \cos(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} \right) + i \sum_{r=1}^l \left( \operatorname{sen} k_r \frac{2\pi j}{n} + \operatorname{sen}(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} \right). \end{aligned}$$

Como valem as relações trigonométricas  $\operatorname{sen} k \frac{2\pi}{n} = -\operatorname{sen}(n-k) \frac{2\pi}{n}$  e  $\cos k \frac{2\pi}{n} = \cos(n-k) \frac{2\pi}{n}$ , então

$$\sum_{r=1}^l \left( \operatorname{sen} k_r \frac{2\pi j}{n} + \operatorname{sen}(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} \right) = 0$$

e

$$\sum_{r=1}^l \left( \cos k_r \frac{2\pi j}{n} + \cos(n-k_r) \frac{2\pi j}{n} \right) = \sum_{r=1}^l 2 \cos k_r \frac{2\pi j}{n}.$$

Concluimos que os autovalores do grafo  $G = Ci(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$  são da forma

$$\lambda_j = \sum_{r=1}^l 2 \cos k_r \frac{2\pi j}{n}, \quad \text{para } j = 1, \dots, n-1.$$

**Exemplo 2.8.** O ciclo  $C_n$ .

Fixado um inteiro  $n \geq 2$ , a matriz de adjacência de  $C_n = Ci(n; 1)$  é a matriz circulante, cuja primeira linha é  $[0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1]$ . Considerando então o polinômio

$$q(x) = x + x^{(n-1)},$$

temos que  $\lambda_0 = q(1) = 1 + 1 = 2$  é autovalor de  $C_n$ , como era de se esperar (vide Proposição 2.7). Expressando as outras  $n$ -ésimas raízes da unidade como potências de  $\omega = e^{2\pi i/n}$ , obtemos os outros autovalores de  $C_n$  dados por

$$\lambda_j = q(\omega^j) = \omega^j + \omega^{j(n-1)},$$

para cada  $j$ ,  $0 \leq j \leq n-1$ . Como vimos acima e usando somas de cossenos, obtemos

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right) + \cos\left(\frac{j(n-1)\pi}{n}\right) = \\ &= 2\cos\left(\frac{2j\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{2j(n-2)\pi}{2n}\right) = \\ &= 2\cos(j\pi)\cos\left(j\pi - \frac{2j\pi}{n}\right) = 2(\cos(j\pi))^2\cos\left(\frac{2j\pi}{n}\right) = 2\cos\left(\frac{2j\pi}{n}\right), \end{aligned}$$

para cada  $j$ ,  $0 \leq j \leq n-1$ . Mas estes números não são todos distintos. Levando-se em conta as coincidências, a descrição completa do espectro é:

$$\text{spect}(C_n) = \begin{bmatrix} 2 & 2\cos(2\pi/n) & \dots & 2\cos(n-1)\pi/n \\ 1 & 2 & \dots & 2 \end{bmatrix}, \quad \text{para } n \text{ ímpar,}$$

e

$$\text{spect}(C_n) = \begin{bmatrix} 2 & 2\cos(2\pi/n) & \dots & 2\cos(n-2)\pi/n & -2 \\ 1 & 2 & \dots & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \text{para } n \text{ par.}$$

**Exemplo 2.9.** O grafo “Möbius Ladder”.

Dado um inteiro  $h \geq 2$ , o grafo  $M_h = Ci(2h; 1, h)$  é chamado **Möbius Ladder** (literalmente, “escada de Möbius”).  $M_h$  é um grafo 3-regular com  $2h$  vértices.

A matriz de adjacência  $A(M_h)$  de  $M_h$  é portanto a matriz circulante de ordem  $2h$  cuja primeira linha é dada por

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & \underbrace{1}_{\text{entrada } 1,h} & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

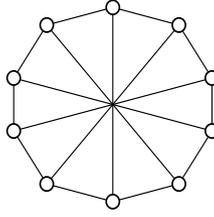


Figura 2.5:  $M_5$  (Möbius Ladder com 10 vértices)

Considerando então o polinômio  $q(x) = x + x^h + x^{2h-1}$ , temos que  $\lambda_0 = q(1) = 1 + 1 + 1 = 3$  é autovalor de  $M_h$ . Além disso, se expressamos as outras raízes  $2h$ -ésimas da unidade como potências de  $\omega = e^{2\pi i/2h}$ , os restantes autovalores de  $M_h$  são dados por

$$\lambda_k = q(\omega^k) = \omega^k + \omega^{kh} + \omega^{k(2h-1)},$$

para cada  $k$ ,  $1 \leq k \leq 2h-1$ . Desenvolvendo a partir do resultado geral obtido acima, temos, para cada  $k$ ,  $1 \leq k \leq 2h-1$ ,

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \cos\left(\frac{2k\pi}{2h}\right) + \cos\left(\frac{2kh\pi}{2h}\right) + \cos\left(\frac{2k(2h-1)\pi}{2h}\right) = \\ &= \cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) + \cos(k\pi) + \cos\left(2k\pi - \frac{k\pi}{h}\right) = \\ &= \cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) + \cos(k\pi) + \cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) = 2\cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) + (-1)^k. \end{aligned}$$

**Exemplo 2.10.** O hiperoctaedro ou "cocktail party graph" (ver Exemplo 2.6).

O hiperoctaedro  $H_s$  é um grafo com  $2s$  vértices no qual cada vértice  $v_i$  é adjacente a todos os outros, menos ao  $v_{i+s}$ . Ou seja,  $H_s$  é o grafo complementar de  $C_i(2s; s)$ , sendo portanto igual a  $C_i(2s; 1, \dots, s-1)$ . Usando o mesmo raciocínio dos exemplos anteriores, obtemos o espectro de  $H_s$ , já calculado no Exemplo 2.6.

## 2.4 Isomorfismo de Grafos

**Definição 2.6.**  $G_1$  e  $G_2$  são ditos **grafos isomorfos** quando existe uma correspondência biunívoca entre seus conjuntos de vértices de modo que as adjacências sejam preservadas. Neste caso, a bijeção é chamada um ) **isomorfismo**.

**Exemplo 2.11.** Os grafos da Figura 2.6 são isomorfos, com a bijeção entre os conjuntos de vértices dada por  $f(v_i) = u_i$ ,  $i = 1, \dots, 8$ .

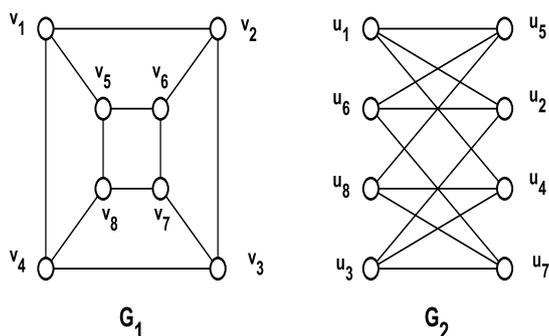


Figura 2.6:  $G_1$  e  $G_2$  são grafos isomorfos.

Assim dois grafos  $G_1$  e  $G_2$  são isomorfos quando podemos obter um do outro através de uma permutação das rotulações de seus vértices. Isto significa que  $A(G_1)$  e  $A(G_2)$  são matrizes semelhantes, ou seja, que existe uma matriz de permutação  $P$  (que é uma matriz ortogonal) tal que  $P^T A(G_1) P = A(G_2)$ . Isomorfismos permitem distinguir as propriedades inerentes à estrutura própria do grafo (os chamados **invariantes de grafos**) daquelas que dependem da sua representação, como o desenho e a rotulação dos vértices.

**Definição 2.7.**  $G_1$  e  $G_2$  são ditos **grafos coespectrais** quando têm os mesmos autovalores com as mesmas multiplicidades, isto é, quando  $\text{spect}(G_1) = \text{spect}(G_2)$ .

Se dois grafos são isomorfos eles têm o mesmo espectro. A recíproca dessa afirmação não é verdadeira em geral, como ilustra o exemplo a seguir:

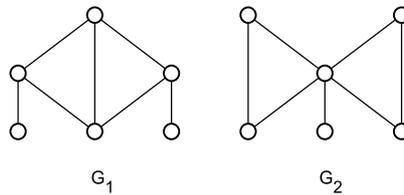


Figura 2.7:  $G_1$  e  $G_2$  são grafos não isomorfos e coespectrais.

**Exemplo 2.12.** Os grafos  $G_1$  e  $G_2$  da Figura 2.7 são coespectrais com

$$p_{G_1}(\lambda) = p_{G_2}(\lambda) = \lambda^6 - 7\lambda^4 - 4\lambda^3 - 7\lambda^2 + 4\lambda - 1.$$

Mas não são isomorfos, pois como vemos,  $G_2$  tem um vértice de grau 5 e, em  $G_1$ , o grau máximo é 3.

**Definição 2.8.** Dizemos que um grafo  $G$  é **caracterizado pelo seu espectro** quando os grafos coespectrais com  $G$  são isomorfos a  $G$ .

O fato de existirem grafos coespectrais não isomorfos significa que algumas propriedades de grafos não podem ser caracterizadas pelo espectro. A conexidade e a existência de ciclos de comprimento 4, por exemplo, são propriedades que não dependem do espectro dos grafos, como vimos na Figura 2.2. O grau dos vértices é também uma propriedade não caracterizada pelo espectro.

**Proposição 2.9.** Um grafo  $G$  possui um único autovalor se e somente se  $G$  é totalmente desconexo, ou seja, é um grafo sem arestas.

Demonstração: Seja  $\lambda$  autovalor de  $G$  com multiplicidade  $k$ . Como o traço da matriz de adjacência  $A(G)$  de  $G$  é zero então  $\lambda$  é zero. Logo o polinômio mínimo de  $A(G)$  é  $h(x) = x - \lambda = x$  e daí,

$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

Portanto,  $G$  possui  $k$  vértices isolados. ■

**Corolário 2.2.** *Grafos sem arestas são caracterizados pelo seu espectro.*

**Proposição 2.10.** *Se um grafo  $G$  tem exatamente dois autovalores distintos  $\lambda_1 > \lambda_2$ , com multiplicidades  $m_1$  e  $m_2$  respectivamente, então  $G$  é o grafo regular de grau  $\lambda_1$  formado por  $m_1$  cópias de  $K_{\lambda_1+1}$ . Temos ainda que  $\lambda_2 = -1$  e  $m_2 = m_1\lambda_1$ .*

Demonstração: Sejam  $\lambda_1 > \lambda_2$  os dois únicos autovalores de um grafo  $\overline{G}$  com  $n$  vértices. Então a matriz de adjacência  $A = A(G)$  de  $G$  tem polinômio mínimo  $h(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)$  e, portanto,

$$A^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)A + \lambda_1\lambda_2I = 0. \quad (2.4.6)$$

Assim, para todo  $k$ ,  $1 \leq k \leq n$ ,  $a_{kk}^2 = -\lambda_1\lambda_2$ . Portanto,  $G$  é um grafo regular de grau  $-\lambda_1\lambda_2$ . Pela Proposição 2.7,  $-\lambda_1\lambda_2 = \lambda_1$ , logo  $\lambda_2 = -1$ . Logo,  $G$  é um grafo regular de grau  $\lambda_1$ . Novamente por (2.4.6), temos que, para todos  $i, j$ ,  $1 \leq i, j \leq n$ ,  $a_{ij}^2 = 0$ , e portanto nenhum par de vértices não adjacentes de  $A(G)$  está ligado por um caminho de comprimento 2. Logo  $G$  é a união de  $m_1$  cópias do grafo completo com  $\lambda_1$  vértices. Segue que  $m_2 = m_1\lambda_1$ . ■

## 2.5 Energia de grafos

De acordo com a teoria quântica, propriedades de elétrons, átomos e moléculas num estado estacionário, são descritas por funções de ondas envolvendo massa e energia potencial. Hückel estudou os hidrocarbonetos insaturados, onde a estrutura da molécula pode ser representada por um grafo, como mostra a Figura 2.8.

Os vértices do grafo correspondem aos átomos de carbono do hidrocarboneto. Dois vértices são adjacentes se, e somente se, existe uma ligação entre os átomos de carbono correspondentes. Pela teoria de Hückel [51] os autovalores do grafo correspondem aos níveis de energia

dos elétrons  $\pi$ . Desse modo, o problema de determinação de energia de cada orbital molecular é reduzido ao da determinação do espectro do grafo correspondente. No estudo dos hidrocarbonetos conjugados insaturados os grafos são sempre conexos, planares e com grau máximo 3 (os vértices correspondem a átomos de carbono com valência no máximo 3); são os chamados **grafos moleculares**. Apesar destas restrições, esta classe de grafos é bastante ampla, envolvendo muitos problemas não triviais de Teoria Espectral de Grafos.

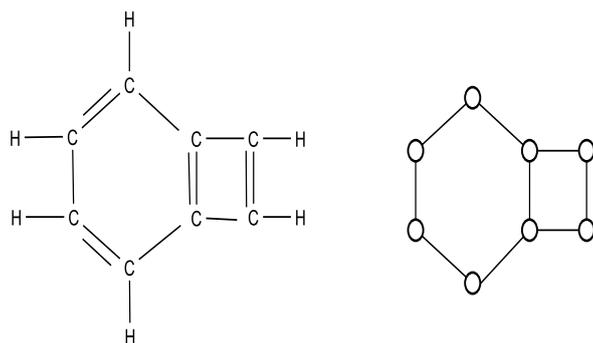


Figura 2.8: Estrutura de um hidrocarboneto e sua representação por um grafo.

Nesta seção de aplicação das propriedades da matriz de adjacência, pretendemos estudar alguns tópicos sobre energia de grafos.

A energia total dos elétrons  $\pi$  é um dos mais conhecidos conceitos relacionados às características químicas de uma molécula. As pesquisas sobre suas propriedades datam de 1940. Em 1978, I. Gutman introduziu o conceito de *energia de um grafo*. Inicialmente definido para os grafos moleculares, a abordagem matemática da questão vem ganhando cada vez mais contribuições, como se pode ver comprovar pelo *survey* [47] de 2005, e pelas referências ali contidas.

**Definição 2.9.** A *energia de um grafo*  $G$  com  $n$  vértices é o número

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|,$$

onde  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  são os autovalores de  $G$ .

**Exemplo 2.13.** Como consequência do Exemplo 2.5 tem-se que

$$E(K_n) = 2(n - 1).$$

O cálculo da energia de um grafo depende da determinação do seu espectro, o que, como já vimos, não é tarefa fácil. Desde o início do estudo deste conceito, no entanto, estimativas foram feitas para se determinar o “tamanho” desta grandeza, que resultaram no estabelecimento de limites superiores e inferiores para ela. Vamos em seguida apresentar alguns dos limites conhecidos para este parâmetro.

### 2.5.1 Limites para a energia de um grafo

Um dos primeiros (1971) limites estabelecidos para a energia de um grafo, e um dos mais conhecidos, foi determinado por McClelland [60] em termos unicamente dos números de vértices e de arestas do grafo.

**Proposição 2.11.** Se  $G$  é um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas então

$$E(G) \leq \sqrt{2mn}. \quad (2.5.7)$$

Demonstração: Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices,  $m$  arestas e autovalores  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz e pelo Corolário 2.1(ii), temos

$$(E(G))^2 = \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \cdot \sum_{i=1}^n 1 = n \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 2nm.$$

Logo  $E(G) \leq \sqrt{2mn}$ . ■

A igualdade vale em (2.5.7) se e somente se os valores absolutos de todos os autovalores do grafo  $G$  são iguais, ou seja, quando  $G$  é formado por cópias de  $K_1$  ou cópias de  $K_2$ .

No próximo teorema são estabelecidos limites para  $E(G)$  que dependem somente do número de arestas do grafo.

**Teorema 2.3** ([18]). *Se  $G$  é um grafo com  $m$  arestas então*

$$2\sqrt{m} \leq E(G) \leq 2m.$$

*E ainda,  $E(G) = 2\sqrt{m}$  se e somente se  $G$  é um grafo bipartido completo mais uma quantidade arbitrária de vértices isolados, e  $E(G) = 2m$  se e somente se  $G$  consiste de  $m$  arestas isoladas mais vértices isolados.*

Demonstração: Seja  $G$  um grafo com  $m$  arestas e autovalores  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Da Definição 2.9 segue que

$$[E(G)]^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i<j}^n |\lambda_i||\lambda_j|.$$

Ora, é possível provar (Exercício 1 deste Capítulo) que

$$\sum_{i<j}^n \lambda_i \lambda_j = -m.$$

Em vista disto,

$$\sum_{i<j}^n |\lambda_i||\lambda_j| \geq \left| \sum_{i<j}^n \lambda_i \lambda_j \right| = m. \quad (2.5.8)$$

Daí e do Corolário 2.1(ii), segue que

$$[E(G)]^2 \geq 4m,$$

ou seja,

$$E(G) \geq 2\sqrt{m}.$$

Da desigualdade (2.5.8), vemos que  $E(G) = 2\sqrt{m}$  ocorre exatamente quando o grafo  $G$  tem exatamente um autovalor positivo e um autovalor negativo. Mostra-se que este é o caso exatamente quando uma componente de  $G$  é um grafo bipartido completo e as outras componentes são vértices isolados (ver [24]).

Consideremos agora que  $G$  não tenha vértices isolados. Neste caso,  $n \leq 2m$  e daí

$$\sqrt{2mn} \leq \sqrt{4m^2} = 2m. \quad (2.5.9)$$

Levando em conta a desigualdade (2.5.7), obtemos

$$E(G) \leq 2m. \quad (2.5.10)$$

Os autovalores de  $mK_2$  são  $+1$  e  $-1$ , ambos com multiplicidade  $m$ , e portanto, os valores absolutos de todos os autovalores são iguais. Logo, para  $G = mK_2$  temos a igualdade em (2.5.7) e (2.5.9) e, portanto, temos a igualdade também em (2.5.10). Claramente, a igualdade em (2.5.10) vale também no caso em que  $G$ , além de  $m$  arestas isoladas, possui uma quantidade arbitrária de vértices isolados. ■

A determinação precisa da energia de um grafo depende da descrição completa de seu espectro, tarefa que pelo que já vimos pode ser realizada apenas para classes muito particulares de grafos. Vamos utilizar o nosso estudo sobre o espectro dos grafos circulantes para apresentar uma estimativa para a energia de grafos formados a partir de um grafo  $K_n$  do qual se retira um ciclo hamiltoniano, isto é, um ciclo que passa por todos os vértices. Denotemos tal grafo por  $K_n - H$ , onde  $H$  é um ciclo hamiltoniano de  $K_n$ . Se o conjunto de vértices de  $K_n$  é  $V = \{0, 1, \dots, n-1\}$ , então cada vértice  $i$  de  $K_n - H$  é adjacente a todo vértice de  $V - \{i\}$ , exceto  $i+1$  e  $i-1$  reduzidos módulo  $n$ . Portanto,  $K_n - H$  é o grafo circulante  $\overline{Ci}(n; 1)$ .

O teorema a seguir, provado por Stevanović e Stanković em [71], responde (negativamente) a uma conjectura anunciada em [5] afirmando que, a partir de um certo número de vértices, os grafos da forma  $K_n - H$  têm energia maior do que a energia do grafo  $K_n$ . Grafos com esta propriedade são chamados **hiperenergéticos**.

**Teorema 2.4.** *Existe  $n_0 \in \mathbb{N}^*$  tal que para todo  $n \geq n_0$ ,  $E(\overline{Ci}(n, 1)) > 2(n-1)$ .*

Demonstração: Usando o estudo feito acima para os autovalores de um grafo circulante e a Proposição 2.8, concluímos que os autovalores de  $\overline{Ci}(n, 1) = K_n - H$  são  $\alpha_0 = n-3$  e  $\alpha_j = -1 - 2\cos\frac{2\pi j}{n}$  para  $j = 1, \dots, n-1$ . Logo,

$$E(\overline{Ci}(n, 1)) = n-3 + \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - 2\cos\frac{2\pi j}{n} \right|.$$

Da teoria de integração obtemos a igualdade

$$\int_0^{2\pi} |-1 - 2\cos x| dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - 2\cos \frac{2\pi j}{n} \right|.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E(\overline{Ci}(n, 1))}{n-1} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \frac{n-3}{n-1} + \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - 2\cos \frac{2\pi j}{n} \right| \right] \\ &= 1 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |-1 - 2\cos x| dx. \end{aligned}$$

Observemos que, para  $x \in [0, 2\pi]$ ,

$$|-1 - 2\cos x| = \begin{cases} 1 + 2\cos x & \text{se } \cos x \geq -\frac{1}{2} \\ -1 - 2\cos x & \text{se } \cos x \leq -\frac{1}{2}, \end{cases}$$

ou seja,

$$|-1 - 2\cos x| = \begin{cases} 1 + 2\cos x & \text{se } 0 \leq x \leq 2\pi/3 \text{ ou } 4\pi/3 \leq x \leq 2\pi \\ -1 - 2\cos x & \text{se } 2\pi/3 \leq x \leq 4\pi/3. \end{cases}$$

Então,

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} |-1 - 2\cos x| dx = \\ &= \int_0^{2\pi/3} (1 + 2\cos x) dx + \int_{2\pi/3}^{4\pi/3} (-1 - 2\cos x) dx + \int_{4\pi/3}^{2\pi} (1 + 2\cos x) dx. \end{aligned}$$

Efetuada os cálculos, chegamos a

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E(\overline{Ci}(n, 1))}{n-1} &= \\ &= 1 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |-1 - 2\cos x| dx = \frac{4\sqrt{3}}{2\pi} + \frac{4}{3} \approx 2.43599 > 2. \end{aligned}$$

Logo, existe  $n_0 \in \mathbb{N}^*$  tal que  $E(\overline{Ci}(n, 1)) > 2(n-1)$  para todo  $n \geq n_0$ . Cálculos computacionais mostram que  $n_0 = 10$  [71]. ■

Dados inteiros  $n, k_1 < k_2 < \dots < k_l < n/2$  como antes, o grafo complementar  $\overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l)$  de  $Ci(n, k_1, \dots, k_l)$  tem conjunto de vértices  $V = \{0, 1, \dots, n-1\}$  em que cada vértice  $i$  está ligado a todo vértice de  $V - \{i\}$  exceto  $i + k_r$  e  $i - k_r$ , reduzidos módulo  $n$ ; ou seja,  $\overline{Ci}(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$  é o grafo circulante  $Ci(n, \{1, 2, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor\} - \{k_1, k_2, \dots, k_l\})$ . Ainda em [71], Stevanović e Stanković generalizaram o resultado anterior, estabelecendo o seguinte teorema:

**Teorema 2.5.** *Sejam  $l, k_1 < k_2 < \dots < k_l \in \mathbb{N}^*$ . Então existe  $n_0 \in \mathbb{N}^*$  tal que, para cada  $n \geq n_0$ , o grafo  $\overline{Ci}(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$  é hiperenergético.*

Demonstração: Sejam  $l, k_1, \dots, k_l$  como no enunciado. Pelo nosso estudo sobre grafos circulantes e ainda pela Proposição 2.8, temos que, para cada  $n \in \mathbb{N}^*$ , os autovalores de  $\overline{Ci}(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$  são dados por  $\lambda_0 = n - (n - (n - 2l)) - l = n - 1 - 2l$  e

$$\lambda_j = -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \quad \text{para } j = 1, \dots, n-1.$$

Portanto, para cada  $n \in \mathbb{N}^*$ ,

$$E(\overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l)) = (n-1-2l) + \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \right|. \quad (2.5.11)$$

Seguindo o raciocínio utilizado no resultado anterior, é suficiente provar que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E(\overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l))}{n-1} > 2. \quad (2.5.12)$$

Chamando  $c_{k_1, \dots, k_l}$  ao primeiro membro de (2.5.12) tem-se

$$c_{k_1, \dots, k_l} = 1 + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \right|.$$

Como visto anteriormente,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \right| = \int_0^{2\pi} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r x \right| dx. \quad (2.5.13)$$

De (2.5.11) e (2.5.13) chega-se então a

$$c_{k_1, \dots, k_l} = 1 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r x \right| dx.$$

Mas daí,  $c_{k_1, \dots, k_l} > 2$  se e somente se

$$\int_0^{2\pi} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r x \right| dx > 2\pi.$$

Para mostrar isso, seja  $f : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}$  dada por  $f(x) = -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r x$  e consideremos as funções  $f^+$  e  $f^-$  de  $[0, 2\pi]$  em  $\mathbb{R}$  definidas por

$$f^+(x) = \begin{cases} f(x), & \text{se } f(x) \geq 0; \\ 0, & \text{se } f(x) < 0 \end{cases}$$

e

$$f^-(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } f(x) \geq 0; \\ -f(x), & \text{se } f(x) < 0. \end{cases}$$

Valem as relações  $|f| = f^+ + f^-$  e  $f = f^+ - f^-$ , sendo que  $f^+$  e  $f^-$  são funções contínuas, pois  $f$  é contínua. Podemos escrever então:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} |f(x)| dx &= \int_0^{2\pi} [2f^+(x) - f^+(x) + f^-(x)] dx = \\ &= \int_0^{2\pi} [2f^+(x)] dx + \int_0^{2\pi} [-f(x)] dx = \int_0^{2\pi} [2f^+(x)] dx + 2\pi. \end{aligned}$$

Devemos mostrar que

$$\max_{[0, 2\pi]} f(x) = \max_{[0, 2\pi]} f^+(x) > 0,$$

pois daí segue que  $\int_0^{2\pi} [f^+(x)] dx > 0$  e, portanto,  $\int_0^{2\pi} |f(x)| dx > 2\pi$ . Considere para  $n > 4k_l$ , o grafo  $G = \overline{C}^i(n, k_1, \dots, k_l)$ . Seus autovalores são  $n - 1 - 2l$  e  $-1 - \sum_{i=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n}$  para  $j = 1, 2, \dots, n - 1$ . O segundo maior autovalor de  $G$  é igual a  $-1 - \sum_{i=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j_0}{n}$  para algum  $j_0 \in \{1, 2, \dots, n - 1\}$ . Como visto anteriormente, no grafo  $\overline{C}^i(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$  o vértice  $u$  é adjacente a todos os vértices de  $V - \{u\}$  exceto  $u \pm k_r \pmod{n}$ ,  $r = 1, 2, \dots, l$ . Então, para cada  $u \in \{0, 1, \dots, n - 1\}$ , entre os vértices  $u, u + k_l, u + 2k_l$  e  $u + 3k_l$  de  $G$  reduzidos módulo  $n$ , temos que  $\{u, u + 2k_l\}$ ,  $\{u, u + 3k_l\}$  e  $\{u + k_l, u + 3k_l\}$  são pares de vértices adjacentes, enquanto  $\{u, u + k_l\}$ ,  $\{u + k_l, u + 2k_l\}$  e  $\{u + 2k_l, u + 3k_l\}$  são pares de vértices não-adjacentes. Portanto, o subgrafo de  $G$  induzido pelos vértices  $u, u + k_l, u + 2k_l$  e  $u + 3k_l$  é isomorfo a  $P_4$ , cujo segundo maior autovalor é igual a  $\frac{-1 + \sqrt{5}}{2} \approx 0.618$ . Pelo Teorema de Entrelaçamento para matriz de adjacência (ver comentário após o Exemplo 2.2), o segundo maior autovalor de  $G$  é, no mínimo, igual ao segundo maior autovalor de qualquer subgrafo induzido de  $G$ . Portanto,

$$-1 - \sum_{i=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j_0}{n} \geq \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} > 0,$$

como queríamos. ■

## 2.6 Exercícios

1. Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices,  $m$  arestas e autovalores  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Mostre que  $\sum_{1 \leq i < j \leq n} \lambda_i \lambda_j = -m$ .

2. Desenhe uma representação do grafo cuja matriz de adjacência é

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Para este grafo, determine o polinômio característico, o grau máximo, o grau mínimo e o diâmetro. O cálculo dos autovalores desse grafo não é trivial. Como é possível afirmar que seu índice está compreendido entre 3,33 e 5?

3. Os grafos cúbicos da Figura 2.9 ilustram a capa do clássico livro de teoria dos grafos [49]. Prove que eles são dois a dois não isomorfos. Verifique, entre eles se há algum par coespectral.

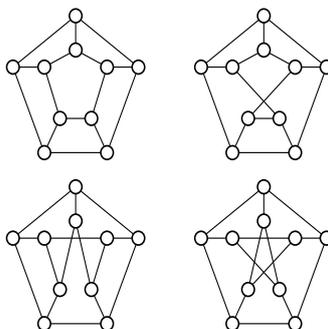


Figura 2.9: Grafos cúbicos de ordem 10

4. Dentre os grafos da Figura 2.9, chame de  $H$  aquele que tem um único par de ciclos disjuntos de comprimento 4. Calcule quantos ciclos de comprimento 5 tem  $H$ .
5. O grafo do canto inferior direito da Figura 2.9 é conhecido na literatura como o *grafo de Petersen* e é denotado por  $P$ . O grafo  $P$  é muito utilizado como contraexemplo de grafos que não satisfazem certas propriedades. Para este grafo determine:

- (i) sua matriz de adjacência;
  - (ii) seu índice, sem fazer nenhum cálculo;
  - (iii) os coeficientes  $a_2$  e  $a_3$  do seu polinômio característico, também sem o uso do cálculo do determinante.
6. O grafo de Petersen tem um autovalor igual a 3 com multiplicidade algébrica igual a 1. Esta afirmação é verdadeira? Prove que a soma de seus autovalores ao quadrado é igual a 30. Responda estas questões sem fazer nenhum cálculo exaustivo.
  7. Grafos com a mesma sequência de graus sempre têm polinômios característicos iguais? Justifique sua resposta.
  8. Um grafo como o da Figura 2.10, constituído por um caminho  $P_t$  e uma clique  $K_{n-t}$  com um único vértice em  $K_{n-t} \cap P_t$  é conhecido como *pipa*. Mostre que o número mínimo de autovalores distintos do grafo pipa é  $t + 1$ .

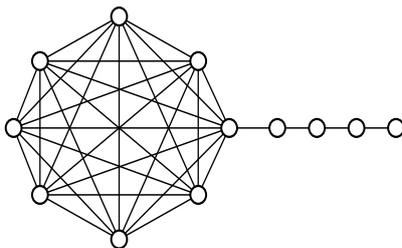


Figura 2.10: Um grafo pipa.

9. É possível determinar grafos não isomorfos para uma mesma sequência de graus? Em caso negativo, justifique sua resposta. Em caso positivo, apresente um par de grafos com a mesma sequência de graus.
10. Mostre que grafos isomorfos têm matrizes de adjacência semelhantes.

11. Mostre que a matriz de adjacência do grafo complementar de um grafo  $G$  de ordem  $n$  é  $A(\overline{G}) = J - I_n - A(G)$ , onde  $J$  é a matriz cujas entradas são todas iguais a 1.
12. Determine a matriz de adjacência de  $\overline{P}$ , sabendo-se que  $P$  é o grafo de Petersen. Determine também os coeficientes  $a_2$  e  $a_3$  de seu polinômio característico, utilizando somente informações estruturais de  $\overline{P}$ .
13. O **cubo** é o grafo da Figura 2.11. Prove que o cubo é bipartido. Determine o espectro do cubo sem calcular o determinante.

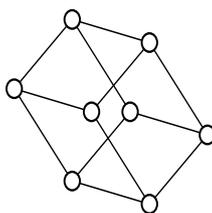


Figura 2.11: O grafo cubo

14. Encontre um grafo que tenha índice estritamente maior que seu grau mínimo e estritamente menor que seu grau máximo.
15. Mostre que se  $H$  é um subgrafo de um grafo  $G$  então  $ind(H) \leq ind(G)$ . Em geral, esta propriedade só é válida para o índice de  $G$ . Sendo assim, encontre um grafo  $G$  em que  $\lambda_2(H) > \lambda_2(G)$ . No entanto, se  $H$  é um subgrafo induzido de  $G$  tem-se que  $\lambda_2(H) \leq \lambda_2(G)$ . Prove este fato.
16. Mostre que a propriedade acima se verifica no grafo cubo.

## 2.7 Notas bibliográficas

Este e os demais capítulos desta monografia abordam as principais matrizes que representam grafos. Em particular, este capítulo é voltado exclusivamente para a matriz de adjacência, mas nenhuma das

referências seguintes são voltadas exclusivamente para ela. Sendo assim, serão indicações recorrentes nos próximos capítulos. O primeiro livro em Teoria Espectral de Grafos deve-se a D.Cvetković, M.Doob e H. Sachs [24], já está na terceira edição, [25], e tem como enfoque principal propriedades estruturais de grafos relacionados com a matriz de adjacência. No entanto, para o estudante que deseja se iniciar na área, esta não deve ser a primeira escolha. Para estes, recomendamos as seguintes e clássicas referências: Biggs [12], Godsil & Royle [40] e Beineke & Wilson, [10]. Recentemente, D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić lançaram o livro introdutório [32], que veio suprir uma lacuna há muito tempo existente. Em língua portuguesa, embora ainda não haja disponível um livro introdutório de Teoria Espectral de Grafos publicado em larga escala, podemos recomendar o excelente texto de Donadelli [36].

## Capítulo 3

# Matriz de incidência

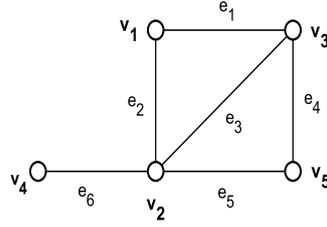
### 3.1 Introdução

A matriz de incidência de um grafo fornece uma descrição das relações de incidência das arestas nos vértices do grafo. Tem grande importância teórica como veremos no próximo capítulo, onde algumas de suas propriedades serão utilizadas na demonstração de resultados sobre a matriz Laplaciana, ainda que isto não apareça explicitamente no enunciado. O mesmo pode ser observado com relação à utilização da matriz de incidência na obtenção de propriedades do grafo-linha de um grafo, como veremos ainda neste capítulo.

### 3.2 Matriz de incidência e grafo-linha de um grafo

**Definição 3.1.** A *matriz de incidência* de um grafo  $G$  com  $n$  vértices e  $m$  arestas, denotada por  $B(G)$ , é a matriz de ordem  $n \times m$  cujas entradas são:

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } e_j \text{ é uma aresta incidente no vértice } v_i; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Figura 3.1: Grafo  $G$ 

**Exemplo 3.1.** Para o grafo  $G$  da figura 3.1, a matriz de incidência é

$$B(G) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

**Lema 3.1.** Sejam  $G$  um grafo com  $m$  arestas,  $B = B(G)$  sua matriz de incidência,  $\ell(G)$  o seu grafo-linha e  $A_\ell$  a matriz de adjacência de  $\ell(G)$ . Então  $B^T B = 2I_m + A_\ell$ .

Demonstração: Considere  $\alpha_{ij} = (B^T B)_{ij}$ . Tem-se que  $\alpha_{ij}$  é o produto interno da  $i$ -ésima linha de  $B^T$  com a  $j$ -ésima coluna de  $B$ . Logo  $\alpha_{ij} = 1$  se as arestas  $e_i$  e  $e_j$  de  $G$  têm um vértice em comum e  $\alpha_{ij} = 0$ , em caso contrário; além disso,  $\alpha_{ij} = 2$ , se  $i = j$ .

Tomemos agora  $\beta_{ij} = (A_\ell)_{ij}$ . Então  $\beta_{ij} = 1$ , se as arestas  $e_i$  e  $e_j$  de  $G$  incidem em um mesmo vértice: neste caso, se  $i \neq j$ ,  $(2I_m + A_\ell)_{ij} = 1$ , senão  $(2I_m + A_\ell)_{ij} = 2$ . Finalmente, se  $e_i$  e  $e_j$  não têm vértice comum em  $G$  então  $\beta_{ij} = 0$ . Isto prova o lema. ■

**Proposição 3.1.** Se  $\lambda$  é um autovalor do grafo-linha  $\ell(G)$  de um grafo  $G$  então  $\lambda \geq -2$ .

Demonstração: Como  $B^T B = 2I + A_\ell$  e  $B^T B$  é matriz semi-definida positiva, se  $\lambda$  é autovalor do grafo-linha então existe vetor  $v$  não nulo

tal que

$$(B^T B)v = (2I + A_\ell)v = 2v + \lambda v = (2 + \lambda)v.$$

Logo,  $2 + \lambda$  é autovalor de  $B^T B$  e, portanto,  $2 + \lambda \geq 0$ . Isto implica em  $\lambda \geq -2$ . ■

Apesar de restritiva, a condição da proposição anterior não é suficiente para caracterizar grafos-linha, isto é, existem grafos cujos autovalores são todos maiores ou iguais a  $-2$  e não são grafos-linha. A caracterização dos grafos que têm menor autovalor igual a  $-2$  foi obtida em 1976 [17].

**Lema 3.2.** *Sejam  $B = B(G)$  a matriz de incidência de um grafo  $G$  com  $n$  vértices e  $D$  a matriz diagonal  $n \times n$  cujas entradas correspondem aos graus dos vértices de  $G$ . Então  $BB^T = D + A$ , onde  $A$  é a matriz de adjacência de  $G$ .*

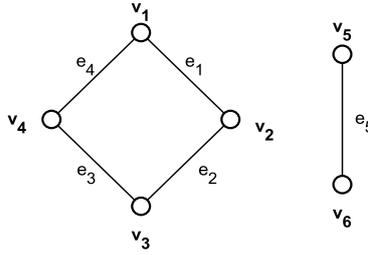
Demonstração: Se  $i = j$ , o produto da  $i$ -ésima linha de  $B$  pela  $j$ -ésima coluna de  $B^T$  é o grau do vértice  $v_i$  em  $G$ . Se  $i \neq j$ , a entrada  $ij$  em  $BB^T$  é 1 ou 0, conforme  $v_i$  e  $v_j$  sejam ou não adjacentes em  $G$ . ■

**Lema 3.3.** *Sejam  $B = B(G)$  a matriz de incidência de um grafo  $G$ ,  $\ell(G)$  o seu grafo-linha e  $A_\ell$  a matriz de adjacência de  $\ell(G)$ . Se existe vetor  $v \neq 0$  tal que  $Bv = 0$  então  $-2$  é autovalor de  $A_\ell$ .*

Demonstração: Já vimos que  $B^T B = 2I + A_\ell$ . Seja  $v \neq 0$  tal que  $Bv = 0$ . Daí  $(B^T B)v = B^T(Bv) = B^T 0 = 0$ . Logo  $(2I + A_\ell)v = 2Iv + A_\ell v = 2v + A_\ell v = 0$ , ou seja,  $A_\ell v = -2v$ . Como  $v \neq 0$  temos que  $-2$  é autovalor de  $A_\ell$ . ■

**Lema 3.4.** *Sejam  $B = B(G)$  a matriz de incidência de um grafo  $G$  que contém um ciclo de comprimento par. Então existe um vetor  $v \neq 0$  tal que  $Bv = 0$ .*

Demonstração: Seja  $e_1, e_2, \dots, e_{2k}$  um ciclo de comprimento  $2k$  em  $G$ . Tome o vetor  $v$  tal que  $v_i = (-1)^i$  para  $i, 1 \leq i \leq 2k$  e  $v_i = 0$  para  $i > 2k$ . Verifica-se que  $Bv = 0$ . ■

Figura 3.2: Grafo  $H$ 

**Exemplo 3.2.** Para o grafo  $H$  da figura 3.2, o vetor

$$v = [(-1)^1, (-1)^2, (-1)^3, (-1)^4, 0]^T$$

satisfaz

$$Bv = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Decorre imediatamente dos dois últimos lemas que se  $G$  contém um ciclo de comprimento par então  $-2$  é autovalor de  $\ell(G)$ . A recíproca é também verdadeira [23]. Prova-se de modo semelhante que  $G$  tem dois ciclos ímpares na mesma componente conexa se e somente se  $-2$  é autovalor de  $G$  [24].

**Proposição 3.2.** Se  $G$  é um grafo  $k$ -regular com  $n$  vértices e  $m$  arestas então  $P_{\ell(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} P_G(\lambda - k + 2)$ .

Demonstração: Considere as matrizes

$$U = \begin{bmatrix} \lambda I_n & -B \\ 0 & I_m \end{bmatrix} \text{ e } V = \begin{bmatrix} I_n & B \\ B^T & \lambda I_m \end{bmatrix},$$

onde  $B$  é a matriz de incidência do grafo  $G$ . Então

$$UV = \begin{bmatrix} \lambda I_n - BB^T & 0 \\ B^T & \lambda I_m \end{bmatrix} \text{ e } VU = \begin{bmatrix} \lambda I_n & 0 \\ \lambda B^T & \lambda I_m - B^T B \end{bmatrix}.$$

Como  $\det(UV) = \det(VU)$  então  $\lambda^m \det(\lambda I_n - BB^T) = \lambda^n \det(\lambda I_m - B^T B)$ . Logo,

$$\begin{aligned} p_{\ell(G)}(\lambda) &= \det(\lambda I_m - A_\ell) = \det((\lambda + 2)I_m - B^T B) = \\ &= (\lambda + 2)^{m-n} \det((\lambda + 2)I_n - BB^T) = (\lambda + 2)^{m-n} \det((\lambda + 2 - k)I_n - A) = \\ &= (\lambda + 2)^{m-n} p_G(\lambda - k + 2). \end{aligned}$$

■

**Corolário 3.1.** *Se  $G$  é grafo regular de grau  $k$  com*

$$\text{spect}(G) = \begin{bmatrix} k & \lambda_1 & \cdots & \lambda_{s-1} \\ 1 & m_1 & \cdots & m_{s-1} \end{bmatrix}$$

então

$$\text{spect}(\ell(G)) = \begin{bmatrix} 2k - 2 & k - 2 + \lambda_1 & \cdots & k - 2 + \lambda_{s-1} & -2 \\ 1 & m_1 & \cdots & m_{s-1} & m - n \end{bmatrix}.$$

Demonstração: Segue imediatamente da proposição anterior. ■

**Exemplo 3.3.** *Seja  $G = K_5$ . Como*

$$\text{spect}(K_5) = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix},$$

o Corolário 3.1 garante que

$$\text{spect}(\ell(K_5)) = \begin{bmatrix} 6 & 1 & -2 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}.$$

Como  $\overline{\ell(K_5)}$  é um grafo regular, pois  $K_5$  é regular, segue da Proposição 2.8, que

$$\text{spect}(\overline{\ell(K_5)}) = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -2 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}.$$

No Exemplo 1.12, vimos que  $\overline{\ell(K_5)}$ , complementar do grafo-linha de  $K_5$ , é conhecido como grafo de Petersen.

### 3.3 Exercícios

1. Desenhe um grafo desconexo com 9 vértices, grau máximo 3 e 2 componentes conexas. Para este grafo, determine as matrizes de adjacência e de incidência.
2. Considere a matriz de incidência de um grafo  $G$  dada abaixo:

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- (a) Dê o grau máximo e o grau mínimo do grafo.
  - (b) Desenhe o grafo  $G$ .
3. Mostre que se duas árvores têm grafos-linha isomorfos então elas são isomorfas.
  4. Diga se cada afirmação abaixo é verdadeira ou falsa, justificando sua resposta.
    - (a) A soma das entradas de cada linha da matriz de incidência de um grafo  $k$ -regular é igual a  $k$ ;
    - (b) A soma das entradas de cada coluna da matriz de incidência de um grafo é constante;
    - (c) Se a matriz de incidência de um grafo é  $n \times m$  então a matriz de incidência de seu complementar é também  $n \times m$ ;
    - (d) O número de triângulos do grafo  $\ell(K_4)$  é zero;
    - (e) O número de vértices isolados de um grafo corresponde ao número de linhas nulas na matriz de incidência.
  5. Mostre que  $G$  é um grafo bipartido se e somente se  $D(G) + A(G)$  e  $D(G) - A(G)$  são semelhantes.

6. Seja  $G$  um grafo-linha tal que  $u$  e  $v$  são vértices de  $G$  com o mesmo conjunto de vértices adjacentes. Mostre que  $u = v$ .
7. Prove que um grafo conexo é isomorfo ao seu grafo-linha se e somente se ele é um ciclo.
8. Se  $G$  é o grafo da Figura 3.1 encontre  $v \neq 0$  tal que  $Bv = 0$ . Podemos dizer que  $-2$  é autovalor de  $l(G)$ ? Justifique.

### 3.4 Notas bibliográficas

Matriz de incidência de um grafo e o conceito de grafo-linha são dois tópicos abordados em Teoria Algébrica e Espectral dos Grafos. Por isso, as indicações feitas aqui não poderiam ser outras que não aquelas já citadas nas Notas Bibliográficas do Capítulo 2. No entanto, gostaríamos de acrescentar uma referência interessante dedicada aos grafos-linha e suas generalizações. Trata-se do livro recente de Cvetković, Rowlinson and Simić [30] em que são tratados os autovalores da matriz de adjacência de grafos-linha. Além desse, podemos destacar entre os livros já citados, aqueles em que o leitor poderá encontrar os tópicos deste capítulo abordados com mais profundidade. Em Harary [49] há um capítulo inteiro dedicado aos grafos-linha e em Godsil e Royle [40] há, pelo menos, duas subseções sobre matrizes de incidência.



## Capítulo 4

# Matriz Laplaciana

### 4.1 Introdução

A matriz Laplaciana de um grafo e, em especial, seu maior e segundo menor autovalores, desempenham papel relevante em diversas aplicações. Neste capítulo, apresentamos o conhecido Teorema da matriz-árvore, que, em sua versão espectral (Corolário 4.2), determina o número de árvores geradoras de um grafo em função dos autovalores dessa matriz. Vemos ainda aplicações do estudo desses autovalores em otimização combinatória, em Química e em Biologia.

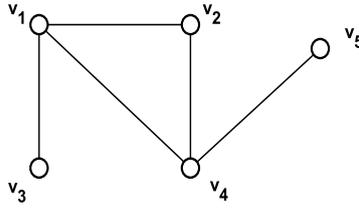
### 4.2 Conceitos e resultados preliminares

**Definição 4.1.** *Seja  $D$  a matriz diagonal dos graus dos vértices de um grafo  $G$  (ou seja, a matriz  $D$  tal que  $D_{ii} = d(v_i)$ ) e seja  $A$  a matriz de adjacência de  $G$ . A matriz*

$$L = D - A$$

*é chamada **matriz Laplaciana** ou **Laplaciano** do grafo  $G$ . Quando necessário, usaremos  $L(G)$  em lugar de  $L$ .*

**Exemplo 4.1.** *Para o grafo  $G$  da Figura 4.1, temos*

Figura 4.1: Grafo  $G$ 

$$D = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad e \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo,

$$L = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

**Definição 4.2.** O espectro do Laplaciano  $L$  de um grafo  $G$ , denotado por  $\zeta(G)$ , é a matriz-linha cujos elementos são todos os autovalores de  $L$  ordenados de forma não crescente. Assim, se  $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_n$  são os autovalores de  $L$  então

$$\zeta(G) = (\mu_1, \dots, \mu_n).$$

**Exemplo 4.2.** Para os grafos  $G_1$  e  $G_2$  da Figura 4.2, temos  $\zeta(G_1) = (4, 3, 1, 0)$  e  $\zeta(G_2) = (4, 3, 2, 1, 0, 0, 0)$ . Notar que o número de componentes conexas de cada grafo coincide exatamente com a multiplicidade do 0, que é autovalor Laplaciano de ambos. Estes fatos valem para todos os grafos, como mostramos na sequência.

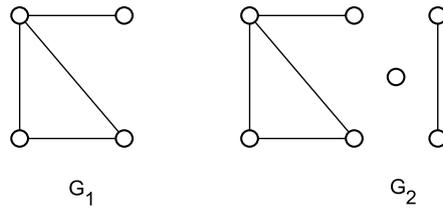


Figura 4.2: Grafos  $G_1$  e  $G_2$ .

A próxima definição considera excepcionalmente que ao grafo  $G$  é atribuída alguma orientação.

**Definição 4.3.** *Considere que as arestas de um grafo  $G$  possuem uma orientação. A **matriz  $\beta$  de incidência com respeito a uma orientação** é aquela cujas entradas são*

$$\beta_{ij} = \begin{cases} +1, & \text{se } v_i \text{ é o vértice onde chega } e_j ; \\ -1, & \text{se } v_i \text{ é o vértice de onde parte } e_j ; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

*Não é difícil provar que  $L = \beta\beta^T$ . Segue daí que o Laplaciano  $L$  é uma matriz semidefinida positiva que tem, portanto, todos os seus autovalores maiores ou iguais a zero.*

**Lema 4.1.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e seja  $\beta$  a matriz de incidência de  $G$  com respeito a uma orientação dada. Então o posto  $r(\beta)$  de  $\beta$  é  $n - \omega$ , onde  $\omega$  é o número de componentes conexas de  $G$ .*

Demonstração: Sejam  $G_1, \dots, G_\omega$  as componentes conexas do grafo  $G$ , cada  $G_i$  com  $n_i$  vértices. Então  $\beta$  tem uma decomposição em blocos de modo que, para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq \omega$ ,  $\beta^{(i)}$  é a matriz de incidência (com respeito à orientação fixada) da  $i$ -ésima componente conexa de

$G$ . Assim,

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta^{(1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \beta^{(2)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \beta^{(\omega-1)} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta^{(\omega)} \end{bmatrix}.$$

Para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq \omega$ , como a soma dos elementos de cada coluna de  $\beta^{(i)}$  é nula, o posto desta matriz é, no máximo,  $n_i - 1$ , ou seja,  $r(\beta^{(i)}) \leq n_i - 1$ . Para concluirmos que  $r(\beta) = n - \omega$ , basta então mostrar que  $r(\beta^{(i)}) = n_i - 1$  para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq \omega$ . Para este fim, fixado  $i$ , mostremos que o posto de  $(\beta^{(i)})^T$ , que coincide com o posto de  $\beta^{(i)}$ , é exatamente  $n_i - 1$ , mostrando que o núcleo  $N((\beta^{(i)})^T)$  de  $(\beta^{(i)})^T$  tem dimensão 1. Basta então exibir uma base para este subespaço, a saber,  $\mathbf{1} = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$ . Ora, claramente,  $\mathbf{1}^T \beta^{(i)} = \mathbf{0}$ , ou seja,  $\mathbf{1} \in N((\beta^{(i)})^T)$ . Só falta mostrar que  $\mathbf{1}$  gera  $N((\beta^{(i)})^T)$ .

Seja então  $x \in N((\beta^{(i)})^T)$ . Consideremos duas coordenadas  $x_l$  e  $x_k$  quaisquer de  $x$ , relacionadas respectivamente aos vértices  $v_l$  e  $v_k$  de  $G_i$ . Como  $G_i$  é conexo, existe um subconjunto  $\{v_{j_1}, v_{j_2}, \dots, v_{j_r}\}$  onde  $l = j_1$  e  $k = j_r$ , tais que existe uma aresta entre  $v_{j_p}$  e  $v_{j_{(p+1)}}$ , para cada  $p = 1, 2, \dots, r - 1$ . Correspondendo a cada uma das  $r - 1$  arestas  $\{v_{j_p}, v_{j_{(p+1)}}\}$ , existe uma coluna  $c_p$  em  $\beta^{(i)}$  (não necessariamente a  $p$ -ésima) cujas entradas de ordem  $j_p$  e  $j_{(p+1)}$  em  $c_p$  valem uma 1 e outra -1, sendo as outras iguais a zero. Como  $x^T \beta^{(i)} = \mathbf{0}$ , segue-se que  $x^T c_p = \mathbf{0}$ , e daí,  $x_{j_p} = x_{j_{(p+1)}}$ . Mas isto vale para todo  $p = 1, 2, \dots, r - 1$ . Logo,  $x_l = x_k$ , para cada  $l$  e  $k$ . Logo  $x = \alpha \mathbf{1}$ , para algum escalar  $\alpha$  e assim,  $\mathbf{1}$  gera  $N((\beta^{(i)})^T)$ . ■

**Proposição 4.1.** *O posto  $r(L)$  da matriz Laplaciana  $L$  de um grafo  $G$  com  $n$  vértices é  $n - \omega$ , onde  $\omega$  é o número de componentes conexas de  $G$ .*

Demonstração: A afirmação decorre diretamente do lema anterior. De fato, o posto de  $L$  é igual ao posto da matriz de incidência  $\beta$  com respeito a (qualquer) orientação considerada sobre  $G$ , pois  $L = \beta \beta^T$ . ■

Segue da proposição anterior que 0 é o menor autovalor da matriz Laplaciana de qualquer grafo. Este fato, no entanto, pode ser provado diretamente, como é feito no item (i) da próxima proposição.

**Proposição 4.2.** *Sejam  $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$  os autovalores da matriz Laplaciana  $L$  de um grafo  $G$ . Então:*

- (i)  $\mu_n = 0$  com autovetor associado  $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$ ;
- (ii)  $G$  é conexo se, e somente se,  $\mu_{n-1} > 0$ ;
- (iii) se  $G$  é regular de grau  $k$  então cada  $\mu_i = k - \lambda_{n-i}$ , onde  $\lambda_i$  é autovalor da matriz de adjacência  $A$  de  $G$ .

Demonstração: (i) Basta notar que a soma dos elementos de uma linha qualquer de  $L$  é zero, logo  $L \cdot \mathbf{1} = 0 = 0 \cdot \mathbf{1}$ .

(ii) Pela proposição anterior,  $G$  é conexo se, e somente se o posto de  $L$  é  $n - 1$ , o que prova a afirmação.

(iii) Segue direto da definição de  $L$ , observando que se  $G$  é regular de grau  $k$  então

$$D = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & k \end{bmatrix}.$$

Para a matriz Laplaciana vale um resultado de entrelaçamento, conhecido como *Teorema de entrelaçamento para matriz Laplaciana*, análogo ao Teorema 2.2. A prova é também decorrência do Teorema 2.1.

**Teorema 4.1.** *Seja  $G = G(V, E)$  grafo com  $n$  vértices e seja  $e \in E$ . Se  $G' = G + \{e\}$  então  $\mu_j(G) \leq \mu_j(G') \leq \mu_{j+1}(G)$ , para todo  $j \in \{1, 2, \dots, n - 1\}$ .*

Como  $\sum_{i=1}^n (\mu_i(G') - \mu_i(G)) = 2m + 2 - 2m = 2$ , pelo menos uma das desigualdades acima deve ser estrita.

### 4.3 O teorema da matriz-árvore

A determinação do número de árvores geradoras de um grafo é um dos problemas mais antigos e famosos da Teoria de Grafos e foi resolvido por Kirchhoff, que em 1847, estudando circuitos elétricos, provou o resultado que ficou conhecido como *Teorema da matriz-árvore*. Além da importância em contextos diversos como a representação de moléculas em Química e o desenho de redes, do ponto de vista da Matemática, o estudo deste problema se constitui numa bela aplicação de conceitos básicos de Álgebra Linear, teoria de determinantes e de grafos. O desenvolvimento que apresentamos a seguir pode ser encontrado em [12].

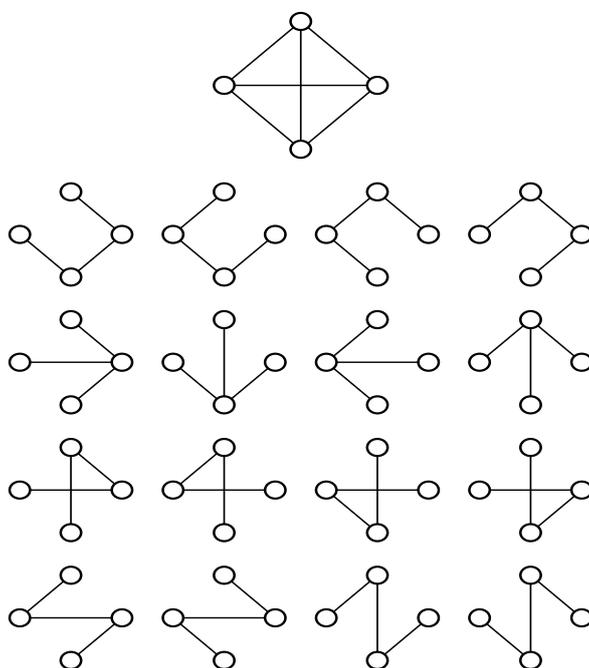


Figura 4.3:  $K_4$  e suas 16 árvores geradoras.

**Definição 4.4.** Uma **árvore geradora** de um grafo  $G$  é um subgrafo que tem os mesmos vértices de  $G$  e é uma árvore.

Claramente, grafos desconexos não possuem árvores geradoras. Por outro lado, todo grafo conexo tem pelo menos uma árvore geradora (se o grafo não é uma árvore, podemos remover uma aresta de cada vez, de cada ciclo, até não haver mais ciclos; o subgrafo obtido será uma árvore geradora do grafo inicial). Um grafo pode ter um número elevado de árvores geradoras, dependendo de quantos vértices e ciclos possua. Na Figura 4.3, vemos o grafo  $K_4$  e suas 16 árvores geradoras.

O Teorema da matriz-árvore na sua versão original, afirma que o número de árvores geradoras de um grafo é dado por qualquer cofator de sua matriz Laplaciana. Apesar da abrangência do resultado, veremos posteriormente que, dependendo do tipo de grafo, sua aplicação pode requerer cálculos bastante elaborados.

Em toda esta seção,  $G$  é um grafo conexo com  $n$  vértices  $v_1, v_2, \dots, v_n$  e  $m$  arestas  $e_1, e_2, \dots, e_m$ , cuja matriz Laplaciana é  $L$ . Por  $\beta$ , denotamos a matriz de incidência de  $G$  com respeito a uma orientação (como se poderá constatar, os resultados não dependerão da orientação escolhida). Indicamos por  $J$  a matriz quadrada de ordem  $n$  cujas entradas são todas iguais a 1.

**Lema 4.2.** *A matriz adjunta de  $L$ , denotada  $adj(L)$ , é um múltiplo de  $J$ .*

Demonstração: Pela Proposição 4.1, a matriz  $L$  tem posto igual a  $n - 1$ , pois  $G$  é conexo. Além disso, o núcleo de  $L$  tem dimensão 1 e é gerado por  $\mathbf{1} = [1 \dots 1]^T$ . Por outro lado, como

$$L \cdot adj(L) = det(L) \cdot I = 0 \cdot I = \mathbf{0}$$

(onde  $\mathbf{0}$  é a matriz nula de ordem  $n$ ), então cada coluna de  $adj(L)$  pertence ao núcleo de  $L$ , sendo assim um múltiplo do vetor  $\mathbf{1}^T$ . Mas  $L$  é matriz simétrica; logo  $adj(L)$  é simétrica e tem, portanto, todas as entradas iguais. O resultado está provado. ■

**Lema 4.3.** *Qualquer submatriz quadrada de  $\beta$  tem determinante 0, 1 ou  $-1$ .*

Demonstração: Seja  $S$  uma submatriz quadrada de  $\beta$ . Se cada coluna de  $S$  tem duas entradas não nulas então estas entradas são 1 e  $-1$

e, portanto, cada coluna tem soma igual a zero. Logo  $S$  é singular e  $\det(S) = 0$ . Suponhamos agora que pelo menos uma coluna de  $S$  tenha exatamente uma entrada não nula. Neste caso, expandimos o determinante de  $S$  em termos desta coluna e obtemos  $\det(S) = \pm \det(S')$ , onde  $S'$  é matriz com uma linha e uma coluna menos do que  $S$ . Continuando este processo, chegamos a determinante nulo ou a uma entrada não nula de  $\beta$  e, portanto, o resultado está provado. ■

**Lema 4.4.** *Considere qualquer submatriz de  $\beta$  obtida tomando-se  $n-1$  de suas colunas. Esta matriz de ordem  $n \times (n-1)$  corresponde a um subgrafo  $H$  de  $G$  contendo todos os seus vértices. Então, removida qualquer linha da submatriz, a matriz resultante  $\beta'$  é quadrada de ordem  $n-1$  e tem  $|\det(\beta')| = 1$  ou  $0$ , conforme o subgrafo  $H$  seja ou não uma árvore (se for árvore,  $H$  será uma árvore geradora de  $G$ ).*

Demonstração: Sem perda de generalidade, removamos a  $n$ -ésima linha da submatriz. Pelo Lema 4.3,  $|\det(\beta')| = 1$  ou  $0$ . Suponhamos inicialmente que o subgrafo  $H$  não seja uma árvore. Com  $n$  vértices e  $n-1$  arestas,  $H$  é necessariamente desconexo e, portanto, tem uma componente que não contém o vértice  $v_n$ . Como as colunas de  $\beta'$  correspondentes às arestas desta componente somam zero (pois cada aresta liga dois vértices da mesma componente), as linhas de  $\beta'$  são linearmente dependentes e, portanto,  $\det(\beta') = 0$ .

Suponhamos agora que  $H$  seja uma árvore. Então podemos renomear suas arestas e vértices (diferentes de  $v_n$ ) da seguinte maneira: chamemos  $u_1 \neq v_n$  a um vértice de grau 1 de  $H$  (qualquer árvore tem pelo menos dois vértices de grau 1, [49]). Chamemos de  $y_1$  a aresta que incide em  $u_1$ . Seja  $u_2 \neq v_n$  um vértice extremo de  $H - \{u_1\}$  e seja  $y_2$  a aresta incidente em  $u_2$ . Continuando este processo, notamos que cada aresta  $y_i$  incide no vértice  $v_i$  e em algum vértice  $v_j$  com  $j > i$ . Mas esta renomeação dos vértices de  $H$  determina uma nova matriz  $\beta''$  que pode ser obtida de  $\beta'$  por permutação de suas linhas. Daí  $|\det(\beta')| = |\det(\beta'')|$ . Além disso,  $\beta''$  é uma matriz triangular inferior cujas entradas na diagonal principal são  $\pm 1$ . Portanto,  $|\det(\beta')| = |\det(\beta'')| = 1$ . ■

O Teorema da matriz-árvore afirma que o número de árvores geradoras de  $G$  é igual a qualquer cofator de  $L$ . Mais precisamente:

**Teorema 4.2** (Teorema da matriz-árvore).

$$\text{adj}(L) = \tau(G) \cdot J,$$

onde  $\tau(G)$  indica o número de árvores geradoras de  $G$

Demonstração: Pelo Lema 4.2, basta mostrar que qualquer cofator de  $G$  é  $\tau(G)$ . Seja  $\beta_0$  a matriz obtida de  $\beta$  pela retirada de sua última linha. Retirando-se também a última linha e a última coluna de  $L$ , observamos que a submatriz obtida é exatamente  $\beta_0 \beta_0^t$ . Assim,  $\det(D_0 D_0^t)$  é o cofator do elemento  $l_{nn}$  de  $L$ . Expandindo este determinante pela fórmula de Binet-Cauchy [50], obtemos

$$\det(\beta_0 \beta_0^t) = \sum_U \det(\beta_U) \det(\beta_U^t),$$

onde o somatório é considerado sobre todos os subconjuntos  $U$  de  $\{1, \dots, n\}$  com  $n - 1$  elementos. Assim,  $\beta_U$  denota a submatriz quadrada de  $\beta_0$  cujas colunas correspondem exatamente aos elementos em  $U$ . Pelos Lemas 4.3 e 4.4,  $\det(\beta_U) \neq 0$  se e somente se o subgrafo cujas arestas estão em  $U$  e tem todos os vértices de  $G$  é uma árvore geradora de  $G$ , quando então  $\det(\beta_U) = 1$  ou  $-1$ . Como  $\det(\beta_U) = \det(\beta_U^t)$  temos que  $\det(\beta_0 \beta_0^t) = \tau(G)$ . Daí,  $\text{adj}(L) = \tau(G)J$ . ■

**Exemplo 4.3.** Vamos calcular o número de árvores geradoras do ciclo  $C_n$ . O Laplaciano de  $C_n$  é

$$L(C_n) = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}_n.$$

Para determinarmos  $\tau(C_n)$ , calculemos o cofator de ordem  $1 \times 1$  do seu Laplaciano. Temos que

$$\Delta_{11} = (-1)^2 \det \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}_{(n-1)}.$$

Somemos agora as linhas 2, 3, ...,  $n - 1$  à primeira linha, obtendo a seguinte matriz, cujo determinante é igual ao da anterior:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}_{(n-1)}.$$

Somamos então a primeira linha à segunda e obtemos

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}_{(n-1)}.$$

Repetindo este processo  $n - 2$  vezes chegamos à matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & n-3 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & n-4 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & n \end{bmatrix}_{(n-1)},$$

que é uma matriz triangular superior com determinante igual ao de  $\Delta_{11}$  e valendo  $n$ . Logo,  $\tau(C_n) = n$ .

**Exemplo 4.4.** Vamos calcular o número de árvores geradoras do grafo completo  $K_n$ . É fácil verificar que o Laplaciano de  $K_n$  é  $L(K_n) = nI - J$ , ou seja,

$$L = \begin{bmatrix} n-1 & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & -1 & n-1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & n-1 \end{bmatrix}_n. \quad (4.3.1)$$

Calculando o cofator de ordem  $1 \times 1$  de  $L$  obtemos:

$$\begin{aligned} \Delta_{11} &= (-1)^2 \det \begin{bmatrix} n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & n-1 & \dots & -1 \\ -1 & -1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & n-1 \end{bmatrix}_{(n-1)} \\ &= \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -1 & n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & -1 & n-1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & n-1 \end{bmatrix}_{(n-1)} \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

$$= \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n \end{bmatrix}_{(n-1)} = n^{n-2} \quad (4.3.3)$$

A matriz em 4.3.2 foi obtida da anterior somando-se as linhas 2, 3, ...,  $n - 1$  à primeira linha. Já a matriz em 4.3.3 foi obtida de 4.3.2 somando-se a primeira linha a todas as outras, chegando assim a uma matriz triangular superior, cujo determinante é exatamente  $n^{n-2}$ . Portanto,  $\tau(K_n) = n^{n-2}$  (isto implica em  $\text{adj}(nI - J) = n^{n-2}J$ ).

Os dois próximos resultados são corolários do Teorema da matriz-árvore que serão utilizados na determinação do número de árvores geradoras de alguns tipos de grafos.

**Corolário 4.1.** *O número de árvores geradoras de  $G$  é dado por*

$$\tau(G) = n^{-2} \det(J + L).$$

Demonstração: É fácil ver que  $nJ = J^2$  e que  $JL = LJ = \mathbf{0}$ . A seguinte sequência de igualdades, que usa a fórmula final do Exemplo 4.4, prova então o resultado:

$$\begin{aligned} (nI - J)(J + L) &= nJ + nL - J^2 - JL = nL; \\ \text{adj}[(nI - J)(J + L)] &= \text{adj}(nL); \\ \text{adj}(J + L)\text{adj}(nI - J) &= \text{adj}(nL); \\ \text{adj}(J + L)n^{n-2}J &= n^{n-1}\text{adj}(L); \\ \text{adj}(J + L)J &= n\tau(G)J; \\ (J + L)\text{adj}(J + L)J &= (J + L)n\tau(G)J; \\ \det(J + L)J &= n\tau(G)J^2; \\ \det(J + L)J &= n^2\tau(G)J; \\ \tau(G) &= n^{-2}\det(J + L). \end{aligned}$$

O primeiro item do resultado a seguir fornece  $\tau(G)$  em função dos autovalores não nulos da matriz Laplaciana de  $G$ .

**Corolário 4.2.** *Se  $\mu_1, \dots, \mu_{n-1}$  são os autovalores não nulos de  $L$  então*

$$\tau(G) = \frac{\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_{n-1}}{n}.$$

Além disso, se  $G$  é um grafo  $k$ -regular então

$$\tau(G) = n^{-1} \prod_{r=1}^{s-1} (k - \lambda_r)^{m_r} = n^{-1} p'_G(k),$$

onde  $p'_G$  denota a derivada do polinômio característico  $p_G$  da matriz de adjacência  $A$  de  $G$  e, para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq s-1$ ,  $\lambda_i$  é um autovalor de  $A$  com multiplicidade  $m_i$ .

Demonstração: Como  $L$  e  $J$  comutam, é possível mostrar que os autovalores de  $J + L$  são a soma dos correspondentes autovalores de  $L$  e  $J$ . Os autovalores de  $J$  são  $n$ , com multiplicidade 1, e 0 com multiplicidade  $n-1$ . Logo, os autovalores de  $J + L$  são  $n, \mu_1, \dots, \mu_{n-1}$ . Como o determinante é o produto dos autovalores, pelo Corolário 4.1 temos o resultado.

Agora, se  $G$  é um grafo  $k$ -regular, segue da Proposição 4.2 que cada autovalor  $\lambda$  de  $A$  é igual a  $k - \mu$ , onde  $\mu$  é um autovalor do Laplaciano. A primeira igualdade segue agrupando-se os autovalores de  $A$  de acordo com as suas multiplicidades. Além disso, derivando o polinômio característico de  $A$  que é dado por

$$p_G(x) = (x - k)(x - \lambda_1)^{m_1} \cdots (x - \lambda_r)^{m_r},$$

obtemos

$$p'_G(x) = (x - \lambda_1)^{m_1} \cdots (x - \lambda_r)^{m_r} + \Phi,$$

onde  $\Phi$  é a soma de produtos contendo o termo  $(x - k)$ . Logo,  $p'_G(k) = (k - \lambda_1)^{m_1} \cdots (k - \lambda_r)^{m_r}$ . Daí,

$$\tau(G) = n^{-1} \prod_{r=1}^{s-1} (k - \lambda_r)^{m_r} = n^{-1} p'_G(k).$$

**Exemplo 4.5.** *Suponhamos que  $G$  seja  $k$ -regular. Determinaremos o número de árvores geradoras do grafo-linha de  $G$ . Do Corolário 4.2, temos que*

$$\tau(G) = n^{-1}p'_G(k) \quad e \quad \tau(\ell(G)) = m^{-1}p'_{\ell(G)}(2k-2),$$

pois  $\ell(G)$  é  $(2k-2)$ -regular. A partir da Proposição 3.2, obtemos então

$$p'_{\ell(G)}(\lambda) = (m-n)(\lambda+2)^{m-n-1}p_G(\lambda+2-k) + (\lambda+2)^{m-n}p'_G(\lambda+2-k).$$

Quando  $\lambda = 2k-2$  obtemos

$$p'_{\ell(G)}(2k-2) = (m-n)(2k)^{m-n-1}p_G(k) + (2k)^{m-n}p'_G(k).$$

Então,  $p'_{\ell(G)}(2k-2) = (2k)^{m-n}p'_G(k)$ . Daí

$$\tau(\ell(G)) = m^{-1}p'_{\ell(G)}(2k-2) = m^{-1}(2k)^{m-n}p'_G(k) = m^{-1}n(2k)^{m-n}\tau(G).$$

Como  $2m = nk$ , chegamos a

$$\tau(\ell(G)) = m^{-1}2mk^{-1}2^{m-n}k^{m-n}\tau(G) = 2^{m-n+1}k^{m-n-1}\tau(G).$$

Para  $G = K_4$ , por exemplo,  $\tau(\ell(G)) = 2^3 \cdot 3 \cdot 16 = 384$ .

Nos dois próximos exemplos, determinamos o número de árvores geradoras de alguns grafos circulantes, usando os resultados da Seção 2.3.1.

**Exemplo 4.6.** *Número de árvores geradoras do grafo  $M_h$  (Möbius Ladder): Como  $M_h$  é um grafo 3-regular, usando o espectro de  $M_h$  calculado no Exemplo 2.9, o Corolário 4.2 nos diz que o número de suas árvores geradoras é dado por*

$$\tau(M_h) = \frac{1}{2h} \prod_{k=1}^{2h-1} (3 - 2\cos(\frac{k\pi}{h}) - (-1)^k).$$

**Exemplo 4.7.** *Número de árvores geradoras do hiperoctaedro  $H_s$ . Como  $H_s$  um grafo  $(2s-2)$ -regular, usando o espectro calculado no Exemplo 2.10 e o Corolário 4.2, obtemos*

$$\tau(H_s) = \frac{1}{2s} \prod_{i=1}^2 (2s-2-\lambda_i)^{m_i} = \frac{1}{2s} (2s-2)^s (2s)^{s-1} = 2^{2s-2} (s-1)^s s^{s-2}.$$

Para o último exemplo, precisamos dos seguintes lemas:

**Lema 4.5.**  $L(G) + L(\overline{G}) = nI - J$ .

Demonstração:

$$L(G) + L(\overline{G}) = D - A + \overline{D} - \overline{A} = D + \overline{D} - (A + \overline{A}),$$

onde  $D$  (respectivamente,  $\overline{D}$ ) é a matriz diagonal dos graus de  $G$  (respectivamente,  $\overline{G}$ ). Mas

$$D = \begin{bmatrix} k_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & k_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & k_n \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$\overline{D} = \begin{bmatrix} n - (k_1 + 1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n - (k_2 + 1) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n - (k_n + 1) \end{bmatrix}.$$

Logo,

$$D + \overline{D} = \begin{bmatrix} n - 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n - 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n - 1 \end{bmatrix}.$$

Sabemos ainda que  $A + \overline{A}$  é a matriz com diagonal principal igual a zero e todas as outras entradas iguais a 1. Portanto,  $D + \overline{D} - (A + \overline{A}) = nI - J$ . ■

**Lema 4.6.** *Seja  $\sigma_G(\mu) = \det(\mu I - L)$  o polinômio característico de  $L$ . Então*

- (i) *Se  $G$  é desconexo,  $\sigma_G(\mu)$  é o produto dos polinômios característicos das suas componentes conexas;*

(ii) Se  $G$  é  $k$ -regular e  $p_G(\lambda)$  é o polinômio característico de  $A$  então  
 $\sigma_G(\mu) = (-1)^n p_G(k - \mu)$ ;

(iii)  $\tau(G) = n^{-2} \sigma_{\overline{G}}(n)$ .

Demonstração: (i) Decorre da definição de polinômio característico.

(ii) Neste caso, temos que  $L = kI - A$ . Logo

$$\begin{aligned} \det(\mu I - L) &= \det(\mu I - (kI - A)) = \det((\mu - k)I + A) = \\ &= (-1)^n \det((k - \mu)I - A) = (-1)^n p_G(k - \mu). \end{aligned}$$

(iii) Pelo Lema 4.5, temos que  $L + \overline{L} = nI - J$ . Pelo Corolário 4.1,

$$\tau(G) = n^{-2} \det(J + L) = n^{-2} \det(nI - \overline{L}) = n^{-2} \sigma_{\overline{G}}(n).$$

■

**Exemplo 4.8.** *Número de árvores geradoras do grafo multipartido completo. Consideremos o grafo  $s$ -partido completo  $G = K_{a_1, a_2, \dots, a_s}$ , onde  $a_1, a_2, \dots, a_s \in \mathbb{N}$  com  $a_1 + a_2 + \dots + a_s = n$ . Embora este grafo não seja necessariamente regular, seu complementar o é:  $\overline{G}$  consiste de  $s$  componentes conexas isomorfas a  $K_{a_1}, K_{a_2}, \dots, K_{a_s}$ . Usando (ii) do lema anterior, chegamos a*

$$\begin{aligned} \sigma_{K_a}(\mu) &= (-1)^a p_{K_a}(a - 1 - \mu) (-1)^a (a - \mu^{a-1} (-\mu)) = \\ &= [(-1)(a - \mu)]^{a-1} \mu = \mu(\mu - a)^{a-1}. \end{aligned}$$

Consequentemente, aplicando (i) e (iii) do Lema 4.6, temos

$$\begin{aligned} \tau(G = K_{a_1, a_2, \dots, a_s}) &= n^{-2} \sigma_{\overline{G}}(n) = n^{-2} \prod_{i=1}^s \sigma_{K_{a_i}}(n) = \\ &= n^{-2} n(n - a_1)^{a_1-1} \dots n(n - a_s)^{a_s-1} = \\ &= n^{s-2} (n - a_1)^{a_1-1} \dots (n - a_s)^{a_s-1}. \end{aligned}$$

Em particular, para grafos bipartidos completos temos  $\tau(K_{a,b}) = b^{a-1} a^{b-1}$ .

Grafo $G$	Conectividade algébrica $a(G)$
Grafo completo	$a(K_n) = n$
Caminho	$a(P_n) = 2(1 - \cos \frac{\pi}{n})$
Ciclo	$a(C_n) = 2(1 - \cos \frac{2\pi}{n})$
Grafo bipartido completo	$a(K_{p,q}) = \min\{p, q\}$
Estrela $K_{1,q}$ , $q > 1$	$a(K_{1,q}) = 1$
Cubo $m$ -dimensional	$a(Cb_m) = 2$
Grafo de Petersen	$a(P) = 2$

Tabela 4.1: Alguns grafos para os quais  $a(G)$  é conhecido.

Operações	$a(G)$ e $a(G_i)$ , $i = 1, 2$
Grafo complementar $\bar{G}$ of $G$	$a(\bar{G}) = n - \mu_1$
$G_1$ obtido removendo-se uma aresta de $G$	$a(G_1) \leq a(G)$
$G_1$ obtido removendo-se $k$ vértices de $G$	$a(G) \leq a(G_1) + k$
$G_1$ obtido adicionando-se uma aresta a $G$	$a(G) \leq a(G_1) \leq a(G) + 2$
União de arestas $G = G_1 \cup G_2$	$a(G_1) + a(G_2) = a(G)$
Produto cartesiano $G = G_1 \times G_2$	$a(G) = \min\{a(G_1); a(G_2)\}$

Tabela 4.2: Relações entre  $a(G)$  e  $a(G_i)$ , onde  $G_i$  é resultado de alguma operação em  $G$ .

### 4.4 Conectividade algébrica

**Definição 4.5.** *O segundo menor autovalor do Laplaciano de  $G$ ,  $\mu_{n-1}$ , é chamado **conectividade algébrica** do grafo  $G$  e será denotado de agora em diante por  $a(G)$ . O maior autovalor do Laplaciano de  $G$ ,  $\mu_1$ , é chamado **índice do Laplaciano** de  $G$ .*

A conectividade algébrica desempenha um papel fundamental no estudo de um grafo. Este autovalor está associado a diferentes e importantes invariantes de grafos, tais como número isoperimétrico e diâmetro dentre outros. Foi comprovado recentemente que grafos com conectividade algébrica grande (em comparação com o grau máximo) têm propriedades importantes em várias aplicações [64]. As Tabelas 4.1 e 4.2 apresentam os valores da conectividade algébrica de alguns grafos.

A próxima proposição estabelece uma relação entre a conectividade algébrica de um grafo e o índice do Laplaciano do seu complementar.

**Proposição 4.3.** *Se o espectro do Laplaciano de um grafo  $G$  é  $\zeta(G) = (\mu_1, \dots, \mu_{n-1}, 0)$  então o espectro de  $\overline{G}$  é*

$$\zeta(\overline{G}) = (n - \mu_{n-1}, \dots, n - \mu_1, 0).$$

Demonstração: Já vimos que o vetor-coluna  $\mathbf{1}$  é autovetor associado ao autovalor 0 de  $L$ . Como  $L$  é uma matriz simétrica podemos tomar  $w_1, w_2, \dots, w_{n-1}$  autovetores associados a  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}$  respectivamente, de modo que  $w_i$  seja ortogonal a  $\mathbf{1}$ , para todo  $i$ ,  $1 \leq i \leq n-1$ . Assim,  $\mathbf{1} \cdot w_i = 0$ , para todo  $i$ ,  $1 \leq i \leq n-1$ . Afirmamos que, para todo  $i$ ,  $1 \leq i \leq n-1$ ,  $w_i$  é autovetor de  $\overline{G}$  associado a  $n - \mu_i$ . De fato, pelo Lema 4.5,  $L(\overline{G}) = nI - J - L(G)$ , onde  $J$  é a matriz quadrada de entradas iguais a 1. Portanto,  $L(\overline{G})w_i = (nI - J - L(G))w_i = nIw_i - Jw_i - L(G)w_i = nw_i - 0 - \mu_i w_i = (n - \mu_i)w_i$ , provando assim o resultado. ■

**Corolário 4.3.** *Seja  $\zeta(G) = (\mu_1, \dots, \mu_{n-1}, 0)$  o espectro do Laplaciano de um grafo  $G$ . Então  $\mu_1 \leq n$  e  $\mu_1 = n$  se e somente se  $\overline{G}$  é desconexo.*

Demonstração: Como  $a(\overline{G}) = n - \mu_1(G)$  e  $a(\overline{G}) \geq 0$  temos que  $\mu_1(G) \leq n$ . Além disso,  $\overline{G}$  é desconexo se e somente se  $a(\overline{G}) = 0$ . Portanto,  $\overline{G}$  é desconexo se e somente se  $\mu_1(G) = n$ . ■

**Exemplo 4.9.** *A estrela  $K_{1,n}$  de  $n+1$  vértices tem o índice do Laplaciano igual a  $n+1$ . Em particular,  $\zeta(K_{1,6}) = (7, 1, 1, 1, 1, 1, 0)$  e  $\zeta(\overline{K_{1,6}}) = (6, 6, 6, 6, 6, 0, 0)$  -vide Figura 4.4.*

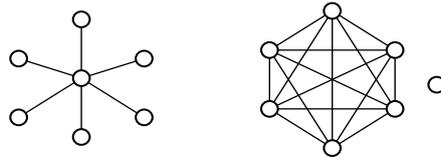


Figura 4.4: A estrela  $K_{1,6}$  tem  $\mu_1 = 7$ .

É importante ressaltar que também é possível exibir grafos coespectrais não isomorfos em relação à matriz Laplaciana, como mostra a Figura 4.5.

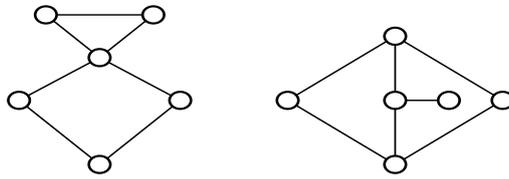


Figura 4.5: Grafos Laplacianos coespectrais não isomorfos.

Veremos agora alguns limites superiores e inferiores para a conectividade algébrica e o índice do Laplaciano, em função de outros parâmetros de grafos. Vamos inicialmente definir outros tipos de conectividade de um grafo.

**Definição 4.6.** A *conectividade de vértices* de um grafo, denotada por  $k(G)$ , é o menor número de vértices que, ao serem retirados, tornam o grafo desconexo.

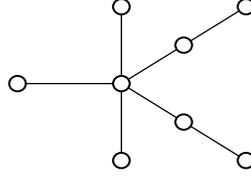
**Definição 4.7.** A *conectividade de arestas*, denotada por  $k'(G)$ , é o menor número de arestas que, ao serem retiradas, tornam o grafo desconexo.

A conectividade algébrica e as conectividades de vértices e de arestas estão relacionadas de acordo com o resultado abaixo, provado por Fiedler [37].

**Proposição 4.4.** Se  $G$  não é o grafo completo então  $a(G) \leq k(G) \leq k'(G)$ .

Como a conectividade de arestas é menor ou igual ao grau mínimo de um grafo, podemos reescrever a proposição anterior como  $a(G) \leq k(G) \leq k'(G) \leq \delta(G)$ .

**Exemplo 4.10.** O grafo  $G$  da Figura 4.6 tem conectividade algébrica  $a = 0,3820$  e  $k = k' = \delta = 1$ .

Figura 4.6: Grafo  $G$ 

Kirkland *et al.* [53] caracterizaram os grafos  $G$  para os quais  $a(G) = k(G)$ .

**Proposição 4.5.** *Para todo grafo  $G$  temos que  $a(G) \leq \frac{n}{n-1}\delta(G)$ .*

Demonstração: Temos que  $a(G) = \min\{v^T Lv; v \neq 0, v \perp \mathbf{1}\}$ . Consideremos  $\tilde{L} = L - a(I - \frac{1}{n}J)$ . Verificamos que  $\tilde{L}\mathbf{1} = 0$ . Se  $y \in \mathbb{R}^n$  podemos escrever  $y = c_1\mathbf{1} + c_2x$ , onde  $x \in \{\mathbf{1}\}^\perp$  e  $|x| = 1$ . Logo  $y^T \tilde{L}y = c_2^2(x^T Lx - a) \geq 0$ . Isto é,  $\tilde{L}$  é semidefinida positiva, o que implica  $\tilde{l}_{ii} \geq 0$ , para todo  $i = 1, \dots, n$  e, portanto,  $l_{ii} - a(1 - \frac{1}{n}) = l_{ii} - a(\frac{n-1}{n}) \geq 0$ , para todo  $i = 1, \dots, n$ . Como  $\delta(G) = d_i$ , para algum  $i = 1, \dots, n$ , e  $d_i = l_{ii}$ , a prova está completa. ■

**Proposição 4.6.** *Para todo grafo  $G$  temos que  $\frac{n}{n-1}\Delta(G) \leq \mu_1(G) \leq 2\Delta(G)$ .*

Demonstração: A Proposição 4.5 usada para  $\bar{G}$  fornece  $a(\bar{G}) \leq \frac{n}{n-1}\delta(\bar{G})$ . A primeira desigualdade segue daí, fazendo-se as substituições  $a(\bar{G}) = n - \mu_1(G)$  e  $\delta(\bar{G}) = n - 1 - \Delta(G)$ . A outra desigualdade segue do fato de que  $\mu_1 = \max_i \mu_i$ . Em particular,  $\mu_1 \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{k=1}^n |l_{ik}| = \max_{1 \leq i \leq n} 2d_i = 2\Delta$ . ■

A conectividade algébrica está também relacionada com o diâmetro do grafo através da desigualdade  $diam(G) \geq \frac{4}{na(G)}$  [65]. Existem ainda alguns limites superiores para o diâmetro, também em função da conectividade algébrica.

Até 1990 supunha-se que, em qualquer coleção de árvores com o mesmo número de vértices, a conectividade algébrica decrescia con-

forme o diâmetro cresce. Grone e Merris [44] deram contraexemplos para essa conjectura. Um deles é apresentado na Figura 4.7:

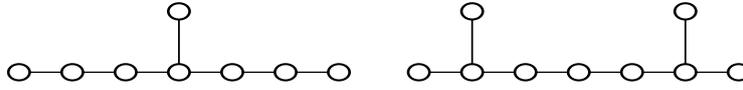


Figura 4.7: Contraexemplo de Grone e Merris

## 4.5 Autovalores e o problema do corte maximal

**Definição 4.8.** *Seja  $G = G(V, E)$  um grafo simples valorado de ordem  $n$ , onde  $V = \{1, 2, \dots, n\}$  é o conjunto de vértices de  $G$  e  $E = \{\{i, j\} / i, j \in V\}$  o conjunto de arestas. Assim, a cada  $\{i, j\} \in E$  é atribuído um peso  $c_{ij} \in \mathbb{R}$ . Um **corte** é um conjunto  $\partial(S) = \{\{i, j\} / i \in S, j \notin S\}$ , para algum  $S \subset V$ . O problema trata de achar um corte em  $G$  tal que maximize a seguinte função:*

$$c(\partial(S)) = \sum_{\{i,j\} \in \partial(S)} c_{ij}$$

O **corte maximal** de  $G$ , denotado por  $mc(G)$  é o número definido por

$$mc(G) = \max_{S \subset V} c(\partial(S)) = \max_{S \subset V} \sum_{\{i,j\} \in \partial(S)} c_{ij} = \max_{S \subset V} \sum_{i \in V, j \in V-S} c_{ij}.$$

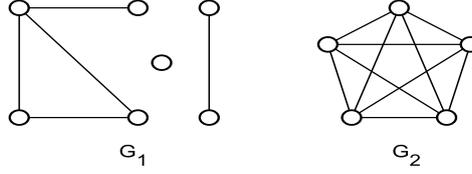
Se  $G$  é não valorado, os pesos são dados por

$$c_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{i, j\} \in E; \\ 0, & \text{se } \{i, j\} \notin E. \end{cases}$$

Neste caso, o corte maximal de  $G$  é dado por

$$mc(G) = \max_{S \subset V} c(\partial(S)) = \max_{S \subset V} |\partial(S)|.$$

**Exemplo 4.11.** *Para os grafos  $G_1$  e  $G_2$  da Figura 4.8, temos que  $mc(G_1) = 4$  e  $mc(G_2) = 6$ .*

Figura 4.8:  $G_1$  e  $G_2$ .

No que se segue, considerando  $G$  um grafo valorado,  $L(G)$  é a matriz Laplaciana valorada de  $G$  definida abaixo:

$$l_{ij} = \begin{cases} -c_{ij}, & \text{se } i \neq j; \\ \sum_{k=1}^n c_{ik}, & \text{se } i = j. \end{cases}$$

**Lema 4.7.** *Seja  $G$  um grafo valorado e  $\mu_1(G)$ , o índice do Laplaciano  $L(G)$ . Então  $mc(G) \leq \mu_1 \frac{|S|(n-|S|)}{n}$ , para todo subconjunto  $S$  de vértices.*

Demonstração: Temos que  $\mu_1 = \max_{x \neq 0} \frac{x^T Lx}{x^T x}$  e  $x^T Lx = \sum_{i,j \in E} c_{ij}(x_i - x_j)^2$ . Dado  $S \subset V$ , defina  $x$  por

$$x_i = \begin{cases} n - s, & \text{se } i \in S; \\ -s, & \text{se } i \notin S, \end{cases}$$

onde  $s = |S|$ . Como

$$\sum_{i,j \in E} c_{ij}(x_i - x_j)^2 = \sum_{i,j \in \partial(S)} c_{ij}(x_i - x_j)^2 = n^2 \sum_{i,j \in \partial(S)} c_{ij} = n^2 c(\partial(S))$$

e  $x^T x = s(n-s)^2 + (n-s)s^2 = s(n-s)n$  temos que  $\mu_1 \geq \frac{nc(\partial(S))}{s(n-s)}$ .

Isto prova o resultado. ■

**Exemplo 4.12.** *Para o grafo  $G$  da Figura 4.9 tem-se  $mc(G) = 4$  e  $\mu_1 = 4$ . Para  $S = \{v_1, v_2\}$ , tem-se então que  $4 \leq 4 \frac{2 \cdot 5}{7}$ .*

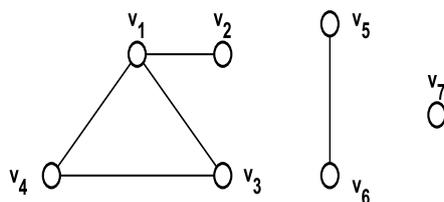


Figura 4.9: Grafo  $G$

**Teorema 4.3.** *Seja  $G$  um grafo valorado. Então  $mc(G) \leq \mu_1 \frac{n}{4}$ .*

Demonstração: É fácil verificar que são verdadeiras as seguintes equivalências:

$$(n - 2s)^2 \geq 0 \Leftrightarrow n^2 - 4s(n - s) \geq 0 \Leftrightarrow s(n - s) \leq \frac{n^2}{4}.$$

Logo, pode-se concluir que

$$nc(\partial(S)) \leq \mu_1 s(n - s) \leq \mu_1 \frac{n^2}{4}.$$

Isto implica em  $c(\partial(S)) \leq \mu_1 \frac{n}{4}$ . Portanto,

$$\max_{S \subset V} c(\partial(S)) \leq \mu_1 \frac{n}{4}.$$

■

**Exemplo 4.13.** *Para o grafo do exemplo anterior temos*

$$\max_{S \subset V} c(\partial(S)) = 4 \leq 4 \frac{7}{4} = \mu_1 \frac{n}{4}.$$

#### 4.5.1 Corte maximal e autovalores em algumas classes de grafos

Para algumas classes especiais de grafos, os limites superiores para o corte maximal são obtidos a partir do índice do Laplaciano:

- grafos completos:  $\mu_1(K_n) = n$  e  $mc(K_n) = \frac{n^2}{4} = n\frac{n}{4}$ .
- grafos bipartidos  $r$ -regulares:  $\mu_1(G) = 2r$  e  $mc(G) = 2r\frac{n}{4}$ .

No que se segue apresentaremos algumas classes de grafos nas quais o limite superior obtido no Teorema 4.3 é atingido.

**Definição 4.9.** *Consideremos grafos de ordem par. Diremos que um grafo  $G$  é **exato** se  $mc(G) = \mu_1\frac{n}{4}$*

Alguns exemplos de grafos exatos, com possíveis restrições sobre a paridade de alguns parâmetros, são: grafos completos, grafos bipartidos  $r$ -regulares,  $\ell(K_{4k+1})$  e o complementar de  $\ell(K_{m,n})$ .

**Definição 4.10.** *Um grafo é dito **semirregular** quando cada um dos seus vértices está a uma distância igual a 2 do mesmo número de vértices.*

Note-se a analogia com a noção de grafo regular, onde cada vértice está a uma distância igual a 1 do mesmo número de vértices.

**Proposição 4.7.** *Seja  $G$  um grafo bipartido  $(r, s)$ -semirregular onde  $r$  e  $s$  são pares. Então  $\ell(G)$  é exato.*

Demonstração: O conjunto de arestas  $E(G)$  pode ser decomposto em dois subgrafos  $(r, s)$ -semirregulares que formam uma bipartição ótima de  $\ell(G)$ . ■

**Proposição 4.8.** *Seja  $n \leq m$ ,  $n$  par. Então  $\overline{\ell(K_{m,n})}$  é exato.*

Demonstração: Temos que  $\mu_1\overline{\ell(K_{m,n})} = n(m-1)$ . O corte maximal é obtido por  $\partial(\{\{i, j\}/i = 1, \dots, \frac{n}{2}, j = 1, \dots, m\})$ . ■

**Proposição 4.9.**  *$\ell(K_{4k+1})$  é exato.*

Demonstração:  $\ell(K_{4k+1})$  possui um fator  $2r$ -regular, que é o corte maximal no grafo-linha. ■

Introduziremos a seguir o número  $\varphi(G)$ , definido para cada grafo valorado  $G$ , que, como mostraremos, é sempre um limite superior para o corte maximal  $mc(G)$ .

**Definição 4.11.**  $\varphi(G) = \min_{\sum u_j = 0} \frac{1}{4} n \mu_{\max}(L + U)$ , onde  $U = \text{diag}(u)$  é a matriz diagonal com entradas  $u_i$  na diagonal e  $\mu_{\max}$  é o autovalor máximo da matriz  $L + U$ . O mínimo é tomado sobre todos os vetores  $u \in \mathbb{R}^n$ , satisfazendo  $\sum u_i = 0$ . A cada vetor  $u$  tal que  $\sum u_i \geq 0$  chamamos um **vetor corretor** (a entrada  $u_i$  está associada ao vértice  $i$ ).

**Lema 4.8.** Temos que  $mc(G) \leq \frac{1}{4} n \mu_{\max}(L + U)$ , para todo vetor corretor  $u$ .

Demonstração: Dado  $S \subset V$ , defina  $x$  por

$$x_i = \begin{cases} 1, & \text{se } i \in S; \\ -1, & \text{se } i \notin S. \end{cases}$$

Então,

$$x^T L x = \sum_{\{i,j\} \in E} c_{ij} (x_i - x_j)^2 = 4 \sum_{i \in S, j \notin S} c_{ij}.$$

Mas,  $x^T U x = \sum u_i (x_i)^2 = \sum u_i \geq 0$ . Se  $S$  induz o corte maximal,  $4mc(G) = x^T L x \leq x^T (L + U) x$ . Aplicando o princípio de Rayleigh ao vetor  $x$ ,  $4mc(G) \leq x^T (L + U) x \leq n \mu_{\max}(L + U)$  ■

**Lema 4.9.** A função  $\varphi$  da Definição 4.11 é tal que:

- (i) Se cada  $c_{ij}$  é multiplicado por algum real  $k$  positivo,  $\varphi$  é também multiplicado por  $k$  ( $\varphi$  é homogênea positiva);
- (ii) Se  $G$  e  $G'$  possuem os mesmos vértices e funções pesos  $c$  e  $c'$ , satisfazendo  $c_{ij} \leq c'_{ij}$  para todo par de vértices, então  $\varphi(G) \leq \varphi(G')$  ( $\varphi$  é monótona).

Demonstração: (i) Seja  $G'$  o grafo com função peso  $c'$  tal que  $c'_{ij} = k c_{ij}$ . Então

$$x^T L_{G'} x = k x^T L_G x$$

e

$$x^T (L_{G'} + kU) x = x^T L_G x + k x^T U x = k x^T (L_G + U) x.$$

Para todo  $x$  autovetor de  $L_G + U$  associado a  $\mu_{\max}(L_G + U)$  temos

$$\frac{x^T(L_{G'} + kU)x}{x^T x} = \frac{kx^T(L_G + U)x}{x^T x} = k\mu_{\max}(L_G + U).$$

Para todo  $x$  autovetor de  $L_{G'} + kU$ , associado a  $\mu_{\max}(L_{G'} + kU)$  temos

$$\frac{kx^T(L_G + U)x}{x^T x} = \frac{x^T(L_{G'} + kU)x}{x^T x} = \mu_{\max}(L_{G'} + kU).$$

Logo

$$\mu_{\max}(L_{G'} + kU) = k\mu_{\max}(L_G + U).$$

Daí,

$$\min_{ku} \frac{1}{4} n \mu_{\max}(L_{G'} + kU) = \min_u \frac{1}{4} n \mu_{\max}(L_{G'} + U) = k \min_u \frac{1}{4} n \mu_{\max}(L_G + U).$$

(ii) Para todo  $u$  e para todo vetor  $x$ , temos

$$x^T L_G x = \sum c_{ij}(x_i - x_j)^2 \leq \sum c'_{ij}(x_i - x_j)^2 \leq x^T L_{G'} x.$$

Isto acarreta

$$x^T(L_{G'} - L_G)x \geq 0.$$

Se  $x$  é autovetor de  $L_{G'} + U$ ,

$$\frac{x^T(L_G + U)x}{x^T x} \leq \frac{x^T(L_{G'} + U)x}{x^T x} = \mu_{\max}(L_{G'} + U).$$

Se  $x$  é autovetor de  $L_G + U$ ,

$$\mu_{\max}(L_G + U) = \frac{x^T(L_G + U)x}{x^T x} \leq \mu_{\max}(L_{G'} + U).$$

■

Observe que um limite superior trivial para  $mc(G)$  é a soma de todos os pesos não negativos das arestas.

**Teorema 4.4.** *Seja  $G$  um grafo valorado com função peso  $c$ . Então,  $\varphi(G) \leq \sum_{c_e \geq 0} c_e$ .*

Demonstração: Seja  $c'_{ij} = \max(0, c_{ij})$ , para todos pares de vértices e seja  $G'$  o grafo valorado correspondente. Como  $\varphi(G) \leq \varphi(G')$ , podemos assumir que  $c$  é não negativo. Seja  $m = \sum c_{ij}$ , e considere o vetor corretor definido por  $u_i = \frac{4m}{n} - 2 \sum_j c_{ij}$ . Para todo  $x$ ,

$$\begin{aligned} x^T(L+U)x &= \sum c_{ij}(x_i - x_j)^2 + \sum_i u_i x_i^2 \\ &= \sum c_{ij}(x_i + x_j)^2 + \sum_i \left(\frac{4m}{n} - 2 \sum_j c_{ij}\right) x_i^2 \\ &= \frac{4m}{n} x^T x - \sum c_{ij}(x_i + x_j)^2 \leq \frac{4m}{n} x^T x. \end{aligned}$$

Se  $x$  é o autovetor associado ao maior autovalor  $\mu_{max}$  de  $L+U$ ,  $x^T(L+U)x = \mu_{max}(L+U)x^T x \leq \frac{4m}{n} x^T x$ . Daí,  $\mu_{max}(L+U) \leq \frac{4m}{n}$  e  $\varphi(G) \leq m$ . ■

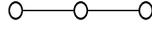


Figura 4.10: Grafo  $G$

**Exemplo 4.14.** *Considere o grafo  $G$  da Figura 4.10. Temos  $n = 3$ ,  $mc(G) = 2$  e  $\mu_1(G) = 3$ . Pelo Teorema 4.3, obtemos o seguinte limite superior para  $mc(G)$ :  $mc(G) \leq 3\frac{3}{4} = 2,5$ .*

*Usando o vetor corretor construído na prova do Teorema 4.4, temos:  $m = 2$ ;  $u_1 = \frac{2}{3}$ ;  $u_2 = -\frac{4}{3}$ ;  $u_3 = \frac{2}{3}$  e  $\mu_{max}(L+U) = \frac{24}{9}$ . Nesse caso o limite superior coincide com  $mc(G)$ :  $\frac{24}{9}\frac{3}{4} = 2$ .*

Observe que a prova do Teorema 4.4 nos indica uma boa escolha para o vetor corretor. Certamente uma escolha inadequada do vetor corretor pode resultar num limite ruim.

**Exemplo 4.15.** Considere a estrela  $S_n = K_{1,n-1}$  com o vetor corretor nulo. Então

$$\frac{1}{4}n\mu_{\max}(L + U) = \frac{1}{4}n\mu_1(L) = \frac{1}{4}n^2,$$

enquanto  $mc(S_n) = n - 1 = \varphi(S_n)$ .

Para  $S_4$  temos

$$\frac{1}{4}4\mu_1(L) = \frac{1}{4}16 = 4.$$

Se considerarmos  $u = [-3, 1, 1, 1]$  teremos

$$\frac{1}{4}4\mu_{\max}(L + U) = \frac{1}{4}4 \cdot 3 = 3 = mc(S_4).$$

## 4.6 Aplicações

Nesta seção veremos algumas importantes aplicações da Teoria Espectral de Grafos à Química e à Biologia. Usaremos a conectividade algébrica e o índice do Laplaciano de grafos associados a moléculas e analisaremos o tipo de informação obtida através desses parâmetros, em cada caso.

### 4.6.1 Carbonos quaternários e grau máximo de vértices

Uma árvore com grau máximo menor ou igual a 4 é um grafo molecular representando isômeros de alcanos (se  $n$  é o número de vértices o grafo representa um isômero de  $C_nH_{2n+2}$ ). Temos que  $\Delta = 1$  é satisfeito apenas pelo etano e  $\Delta = 2$  é satisfeito apenas pelos isômeros de cadeia linear (normal) de alcanos, ou seja, sem ramificações. Temos ainda que  $\Delta = 3$  indica que a molécula possui apenas carbonos terciários e, finalmente,  $\Delta = 4$  indica a presença de pelo menos um carbono quaternário.

A partir da desigualdade abaixo [46], relacionando grau máximo e maior autovalor do Laplaciano,

$$\Delta + 1 < \mu_1 < \Delta + 1 + 2\sqrt{\Delta - 1},$$

conhecendo  $\mu_1$  podemos detectar a presença de carbono quaternário.

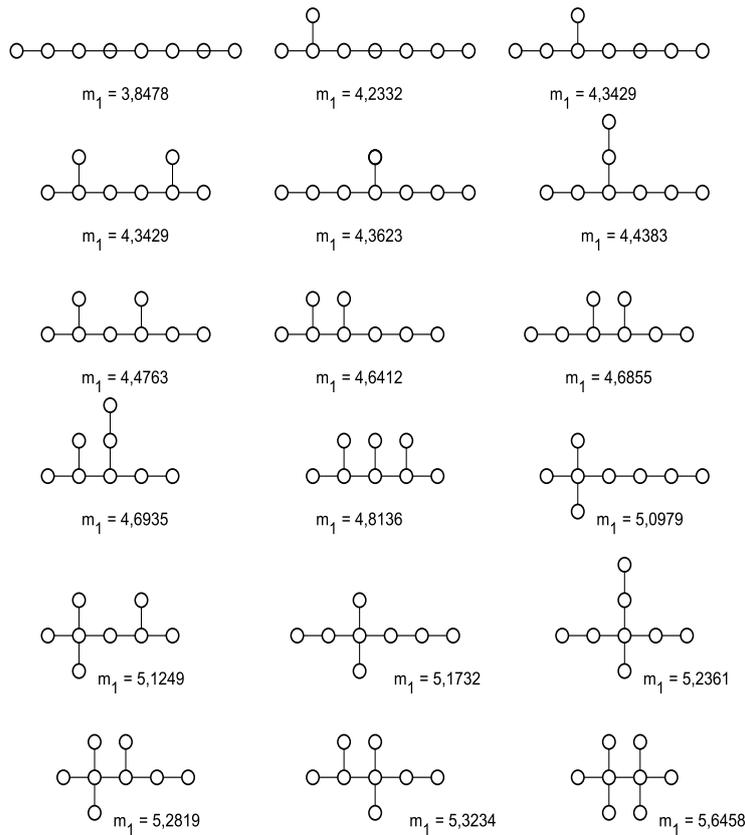


Figura 4.11: Isômeros do octano; aqui  $m_1$  é o maior autovalor do Laplaciano.

Na Figura 4.11, onde apresentamos as árvores químicas dos isômeros do octano, observamos a presença de carbonos quaternários (correspondendo a  $\Delta = 4$ ), nos casos em que  $\mu_1 > 5$ .

#### 4.6.2 RNA (*ribonucleic acid*) e conectividade algébrica

Este exemplo pode ser encontrado em [52]. O dobramento da molécula de *RNA* mensageiro forma estruturas secundárias e terciárias. Por exemplo, consideremos um *RNA* mensageiro de fita simples, cuja sequência de bases nitrogenadas é dada por

CGCUCUGUUUACCAGGUCAGGUCCGA  
 AGGAAGCAGCCAAGGCAGAGCCCC

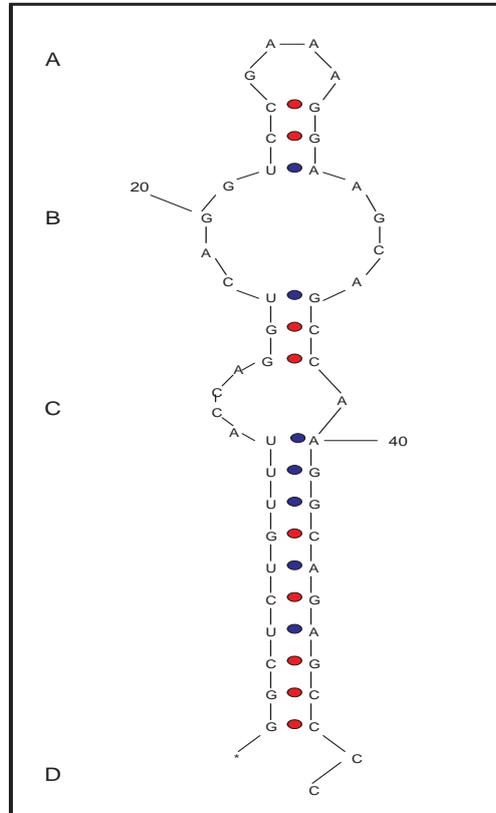


Figura 4.12: Estrutura secundária do *RNA*

A estrutura secundária é dada na Figura 4.12 e corresponde ao grafo da Figura 4.13.

Moléculas de *RNA* biologicamente correlacionadas tendem a ter estruturas secundárias similares. Portanto, comparar grafos de *RNA* pode ser útil para identificar moléculas de *RNA* que são estruturalmente, funcionalmente ou evolutivamente correlacionadas. O segundo menor valor do Laplaciano (conectividade algébrica) é uma medida de compacidade do grafo: conectividade algébrica grande indica um



Figura 4.13: Grafo correspondente à estrutura secundária do *RNA*

grafo compactado, enquanto conectividade algébrica pequena indica que o grafo é alongado.

As árvores da Figura 4.14 ilustram a relação entre conectividade algébrica e a estrutura do grafo. Em todas elas, a conectividade de vértices e a conectividade de arestas são iguais a 1; apenas a conectividade algébrica varia, correspondendo às diversas topologias destas árvores.

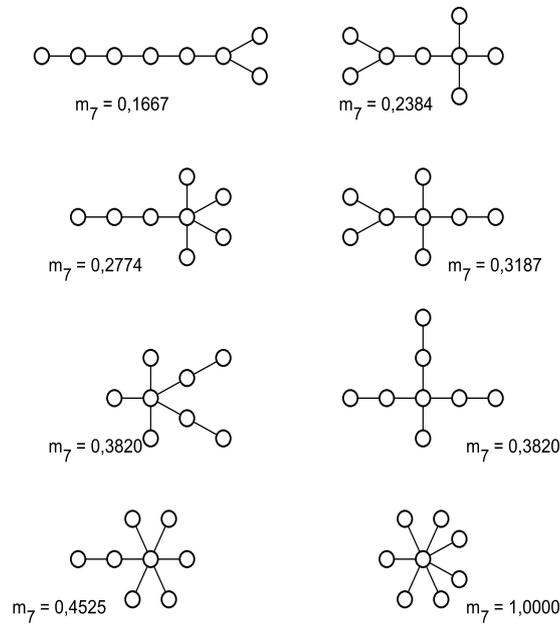


Figura 4.14: Árvores de ordem 8 com conectividades algébricas  $m_7$  crescentes.

### 4.6.3 Potencial de ionização

Em Química encontramos algumas aplicações da matriz Laplaciana e seu espectro. Artigos recentes têm explorado a ligação entre Teoria Espectral de Grafos e propriedades químicas. Em [46], Gutman, Vidović e Stevanović afirmam que o maior autovalor do Laplaciano de um grafo molecular é um parâmetro importante no estudo do espectro fotoeletrônico dos hidrocarbonetos saturados. O potencial de ionização dos alcanos é expresso por  $\alpha + (\mu_i - 2)\beta$ ,  $1 \leq i \leq n$ , onde  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes empíricas e  $(\mu_1, \dots, \mu_n)$  é o espectro do Laplaciano. Assim, o maior autovalor do Laplaciano representa o primeiro potencial de ionização do respectivo alcano.

## 4.7 Exercícios

1. Determine o espectro do grafo e o espectro da matriz Laplaciana do grafo  $G$  da Figura 4.15.

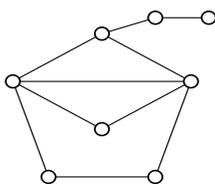


Figura 4.15: Grafo  $G$ .

2. Determine os espectros da matriz de adjacência e da matriz Laplaciana do grafo  $G$  da Figura 4.16. Em que classe especial de grafos ele se encaixa?

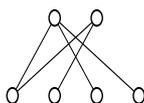


Figura 4.16: Grafo  $G$ .

3. Um grafo é **autocomplementar** se ele é isomorfo ao seu complementar. Mostre que  $\ell(K_{3,3})$  é autocomplementar. Determine os autovalores de  $K_{3,3}$  e de seu Laplaciano.
4. Mostre que todo grafo  $G$  com conectividade de vértices  $\kappa(G) = 2$  contém um ciclo.
5. Mostre que se  $T$  é uma árvore com pelo menos 3 vértices então  $a(G) \leq 1$ . Mostre também que a igualdade é válida somente se a árvore é uma estrela, ou seja, um grafo isomorfo a  $K_{1,n}$ .
6. Seja  $e$  uma aresta de um grafo  $G$ . Prove que  $a(G - \{e\}) = a(G) - 2$  se e somente se  $G = K_n$ .
7. Determine a conectividade algébrica de  $C_5$  e  $P_5$ . Qual delas é a maior? Suponha que cada um desses grafos modele uma rede que liga 5 computadores num pequeno laboratório universitário. Qual das duas redes é menos vulnerável com relação à interrupção da comunicação entre os computadores?
8. Considere um grafo  $G$  cuja sequência de graus é dada por  $d(G) = [2, 3, 4, 4, 3, 2]$ . Desenhe um grafo com esta sequência de graus e calcule a sua conectividade algébrica. Este grafo tem o ciclo  $C_6$  como seu subgrafo? Dê a conectividade algébrica desse ciclo. Qual dos grafos tem maior conectividade algébrica? Se ambos modelassem uma rede, qual delas seria mais vulnerável?
9. Seja  $B$  a matriz de incidência de um grafo  $G$  e para uma orientação qualquer de  $G$ , seja  $\beta$  a matriz de incidência do grafo orientado. Prove que  $G$  é bipartido se e somente se existir uma matriz diagonal  $M$  com entradas  $\pm 1$  tal que  $M\beta = B$ .
10. Seja  $G$  o grafo cubo dado na Figura 2.11. Determine as matrizes de incidência  $B$  e  $\beta$ , essa última com respeito a uma orientação atribuída arbitrariamente. Como já vimos, esse é um grafo bipartido, logo existe uma matriz diagonal  $M$  tal que  $M\beta = B$ . Determine  $M$ .
11. Seja o grafo  $G$  dado na Figura 4.15. Dê uma orientação  $o_1$  para  $G$  e determine a matriz de incidência  $\beta_{o_1}$  correspondente a essa

orientação. Atribua uma outra orientação  $o_2$  para  $G$  e determine  $\beta_{o_2}$ . Verifique se  $\beta_{o_1}^T \beta_{o_1} = \beta_{o_2}^T \beta_{o_2}$ . Será este um resultado que vale para qualquer grafo  $G$ ? Para uma resposta afirmativa, prove o resultado. Em caso contrário, apresente um contraexemplo.

12. Grafos com a mesma sequência de graus sempre têm polinômios característicos iguais e polinômios característicos dos seus Laplacianos também iguais? Justifique sua resposta.

## 4.8 Notas bibliográficas

Para este capítulo dedicado à matriz Laplaciana, cabe uma nota sobre um livro bem conceituado entre pesquisadores que aplicam a técnica espectral de grafos em Ciência da Computação. A autora é F. Chung [19], que introduz o conceito de Laplaciano normalizado de um grafo. Muitos resultados, quando decorrentes da definição de matriz Laplaciana usual aqui estudada, são válidos somente para grafos regulares. Segundo a autora, a vantagem de se adotar o conceito da matriz Laplaciana normalizada é que os resultados podem ser estendidos para grafos em geral. No entanto, o livro de Chung não é recomendado para estudantes que estejam se iniciando na área. Novamente, indicamos os livros de Teoria Algébrica e/ou Espectral de Grafos, citados nas Notas Bibliográficas do Capítulo 2, com destaque para os livros do Godsil & Royle [40] e Beineke & Wilson [10]. Ambos têm capítulos especiais dedicados à matriz Laplaciana de um grafo.

Vale relatar aqui também, que mais de vinte anos após ter introduzido o conceito de energia de um grafo, I. Gutman, juntamente com B. Zhou, estabeleceu em 2006, em [48], um conceito de energia em termos dos autovalores da matriz Laplaciana. O novo conceito foi concebido de modo a preservar certas propriedades análogas às do invariante original. De lá para cá, a investigação sobre as propriedades da energia Laplaciana tem sido objeto de estudo de muitos pesquisadores. Para maiores detalhes, além do artigo original, recomendamos [79], pela lista de referências que contém.

## Capítulo 5

# Matriz distância e matriz Laplaciana sem sinal

### 5.1 Introdução

O estudo dos coeficientes e das raízes dos polinômios característicos das matrizes de adjacência e Laplaciana de um grafo tem recebido muita atenção dos pesquisadores, como já vimos nos capítulos especialmente dedicados a tais matrizes. No entanto, dado que estes polinômios não são suficientes para fornecer invariantes de grafos capazes de caracterizá-los, nem mesmo nos casos mais simples como as árvores, o estudo de outras matrizes relacionadas a um grafo merece também a nossa atenção. Assim, vamos dedicar este capítulo às matrizes distância e Laplaciana sem sinal.

### 5.2 Matriz distância

Sob a ótica espectral, os primeiros e interessantes invariantes de um grafo oriundos da matriz distância surgiram no estudo de árvores para modelar problemas de comunicação e transferência de dados, [42]. De lá para cá, alguns outros artigos foram publicados sobre este assunto, com destaque para [21], [22], [61], [65] e, mais recentemente, para [6] e [7]. Na literatura de Química, o maior autovalor da matriz distância

funciona como um descritor da estrutura de árvores e parece inferir sobre a extensão de ramificação e de pontos de ebulição de alcanos, quando estes são modelados por árvores, [3] e [78]. Além disso, o importante índice de Wiener, que veremos aqui, é definido a partir da matriz distância de um grafo e há inúmeros artigos publicados nesta direção, [3], [4], [35], [54], [55], [62], [66], [68] e [78].

**Definição 5.1.** *Seja  $G = G(V, E)$  um grafo conexo com  $n$  vértices. Para cada par  $v_i$  e  $v_j \in V$ , seja  $d_{ij} = d(v_i, v_j)$ , a distância do vértice  $v_i$  ao vértice  $v_j$ . Consideremos que para todo  $v_i$ ,  $d(v_i, v_i) = d_{ii} = 0$ . A **matriz distância**  $\Theta(G)$  de  $G$  é a matriz quadrada de ordem  $n$  em que as linhas e colunas são indexadas pelos vértices de  $G$  e cuja entrada correspondente a  $(v_i, v_j)$  é  $d_{ij}$ .*

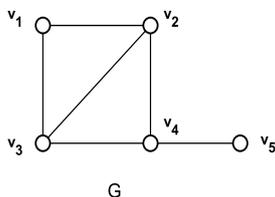


Figura 5.1: Grafo G.

**Exemplo 5.1.** *A matriz distância  $\Theta(G)$  do grafo  $G$  da Figura 5.1 é*

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

O **polinômio característico da matriz distância**  $\Theta(G)$  é  $p_{\Theta(G)}(\theta) = \det(\Theta(G) - \theta I)$  e seus autovalores são dados em ordem não crescente por  $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_n$ . Para o grafo da Figura 5.1, temos  $\theta_1 = 6,2161$ ,  $\theta_2 = -0,4521$ ,  $\theta_3 = -1$ ,  $\theta_4 = -1,1971$  e  $\theta_5 = -3,5669$ .

**Proposição 5.1.** *Seja  $G$  um grafo conexo de ordem  $n$  e seja  $\Theta(G)$  a sua matriz distância. Se  $n_+(G)$  é o número de autovalores positivos de  $\Theta(G)$  e  $n_-(G)$ , o número de autovalores negativos, então  $n_+(G) \leq n - 1$  e  $n_-(G) \leq n - 1$ .*

Demonstração:  $\Theta(G)$  é uma matriz simétrica, portanto seus autovalores  $\theta_i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , são todos números reais. Além disso, seu traço é zero.

Como este é a soma dos  $n$  autovalores da matriz, então  $\sum_{i=1}^n \theta_i = 0$ .

Assim o número máximo de autovalores positivos (respectivamente, negativos) da matriz é  $n - 1$ . ■

Em 1978, o polinômio característico da matriz distância  $p_{\Theta(G)}(\theta)$  aparece pela primeira vez, num problema de comunicação de dados estudado por Graham e Lovász, [42], que pode ser descrito da seguinte maneira: deseja-se rotular cada vértice  $v$  de um grafo  $G$  com uma  $N$ -upla  $F(v) = (f_1(v), f_2(v), \dots, f_N(v))$  de tal modo que cada  $f_i(v) \in \{0, 1, *\}$  e  $F$  “preserve as distâncias” em  $G$ . Isto significa que para dois vértices quaisquer  $u$  e  $v$  de  $G$ , a distância entre as  $N$ -uplas dada por

$$d(F(u), F(v)) = |\{i \in \{1, 2, \dots, N\} : \{f_i(u), f_i(v)\} = \{0, 1\}\}| \quad (5.2.1)$$

deve ser igual à distância entre os pares de vértices do grafo, ou seja,

$$d(F(u), F(v)) = d(u, v). \quad (5.2.2)$$

Por exemplo, sejam os vértices  $a$ ,  $b$  e  $c$  de um grafo  $G$  aos quais associamos, respectivamente, as seguintes duplas  $F(a) = (0, 0)$ ,  $F(b) = (0, 1)$  e  $F(c) = (1, *)$ . Se  $a$ ,  $b$  e  $c$  são os vértices do triângulo  $K_3$  então as duplas a eles associadas preservam as suas respectivas distâncias em  $K_3$ . É fácil mostrar que, para  $N$  suficientemente grande, é sempre possível encontrar um grafo conexo tal que as  $N$ -uplas atribuídas aos vértices satisfazem a equação (5.2.2). O problema difícil, e portanto mais interessante, é o de determinar o menor valor de  $N$ ,  $\min N = N(G)$ , para o qual existe uma atribuição  $F$  que verifica (5.2.2). Como citado em [42], Graham and Pollak provaram a seguinte proposição que nos dá um limitante superior para este número.

**Proposição 5.2.** *Seja  $G$  um grafo conexo de ordem  $n$  rotulado por  $N(G)$ -uplas. Se  $n_+(G)$  e  $n_-(G)$  são, respectivamente, os números de autovalores positivos e negativos da matriz distância  $\Theta(G)$ , então*

$$N(G) \geq \max\{n_+(G), n_-(G)\}.$$

A matriz distância nos fornece uma série de invariantes interessantes. Um deles, muito utilizado em Química, é definido a seguir.

**Definição 5.2.** *O índice de Wiener  $W$  de um grafo conexo  $G$  é a soma das distâncias entre os pares não ordenados dos vértices de  $G$ , o que corresponde à soma das entradas acima (ou abaixo) da diagonal da matriz  $\Theta(G)$ . Mais formalmente,*

$$W = \sum_{1 \leq i < j \leq n} d_{ij},$$

onde  $d_{ij}$  é a distância entre os pares não ordenados dos vértices  $v_i, v_j$  do grafo  $G$ .

Em (5.2.3), representamos o índice de Wiener de forma matricial, onde  $\mathbf{1}$  denota a matriz coluna  $n \times 1$  com todas as entradas iguais a 1:

$$W = \frac{\mathbf{1}^T \Theta \mathbf{1}}{2}. \quad (5.2.3)$$

**Exemplo 5.2.** *O índice de Wiener para o grafo da Figura 5.1, cuja matriz distância é dada no Exemplo 5.1, é calculado como segue:*

$$(\mathbf{1}^T \Theta) \mathbf{1} = [ 7 \ 5 \ 5 \ 5 \ 8 ] \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Assim,  $(\mathbf{1}^T \Theta) \mathbf{1} = 30$  e  $W = 15$ .

### 5.3 Matriz distância de uma árvore

Até hoje, muito pouco se sabe sobre o polinômio característico da matriz distância de um grafo qualquer. No entanto, é surpreendente que o determinante da matriz distância de uma árvore não dependa de sua estrutura, mas somente de sua ordem, como afirma a Proposição 5.3, cuja prova está em [43].

**Proposição 5.3.** *Se  $T$  é uma árvore com  $n \geq 2$  vértices então o determinante de sua matriz distância é  $\det(\Theta(T)) = (-1)^{n-1}(n-1)2^{n-2}$ .*

**Lema 5.1.** *Se  $T$  é uma árvore com  $n$  vértices e  $\beta$  sua matriz de incidência associada a uma orientação arbitrária então  $\beta^T \Theta \beta = -2I_{n-1}$ .*

Demonstração: Sejam  $\beta = [b_{ij}]$  a matriz de incidência e  $\Theta = [d_{ij}]$  a matriz distância de  $T$ . Temos que  $b_{is}d_{ij}b_{jt} = 0$ , exceto quando  $i$  é um vértice inicial da aresta  $e_s$ , que associa a entrada  $-1$  na posição  $(i, s)$  e  $j$  é um vértice inicial da aresta  $e_t$ , que também associa a entrada  $-1$  na posição  $(j, t)$  da matriz  $\beta$ . Assim,  $b_{is} = b_{jt} = -1$ . Sejam então as arestas  $e_s = \{x, i\}$  e  $e_t = \{z, j\}$  da árvore  $T$ , onde  $x$  e  $z$  são os vértices finais associados ao valor 1 em  $\beta$ . Assim,  $\sum_{i,j \in V} b_{is}d_{ij}b_{jt} = d_{ij} - d_{iz} - d_{xj} + d_{xz}$ . Temos os seguintes casos a considerar: (1) Se  $s = t$ , as arestas  $e_s$  e  $e_t$  são iguais. Assim,  $d_{ij} = d_{xz} = 0$  e  $d_{iz} = d_{jx} = 1$ . Logo,  $\sum_{i,j \in V} b_{is}d_{ij}b_{jt} = -2$ . (2) Se  $s \neq t$  então  $i = j$  ou  $x = z$ . No primeiro caso,  $d_{ij} = 0$ ;  $d_{xz} = 2$  e  $d_{iz} = d_{xj} = 1$ . Isto implica que  $\sum_{i,j \in V} b_{is}d_{ij}b_{jt} = 0$ . O segundo caso é análogo. Falta-nos ainda considerar os 4 vértices distintos  $i, j, x$  e  $z$  na árvore  $T$ . Neste caso, ou  $x$  pertence ao único caminho de  $i$  a  $z$ , passando por  $e_t$  ou  $i$  pertence ao caminho de  $x$  a  $z$ , passando também por  $e_t$ . Como estes são casos semelhantes, vamos considerar apenas o primeiro deles que nos levará às seguintes igualdades:  $d_{ij} = d_{xj} + 1$  e  $d_{iz} = d_{xz} + 1$ . Daí,  $\sum_{i,j \in V} b_{is}d_{ij}b_{jt} = d_{xj} + 1 - d_{xz} + 1 - d_{ij} = 0$ . ■

**Corolário 5.1.** *Para qualquer árvore  $T$ , a matriz distância  $\Theta(T)$  é invertível e tal que  $n_+(T) = 1$  e  $n_-(T) = n - 1$ .*

A prova do Corolário 5.1 é deixada como exercício (veja Exercício 3 da Seção 5.6).

O único autovalor positivo  $\theta_1$  de  $\Theta(T)$  é um invariante muito utilizado em aplicações de Química, pois ele serve para inferir sobre a ramificação e pontos de ebulição dos alcanos, quando este é modelado por uma árvore, [78].

Como vimos no Capítulo 3 e utilizamos há pouco no Lema 5.1, para um grafo não orientado  $G$ ,  $B$  é sua matriz de incidência e, quando atribuímos a  $G$  uma orientação qualquer, consideramos a matriz de incidência  $\beta$  com respeito a esta orientação. Além disso, vimos que  $\beta\beta^T = L(G)$ , quando  $L(G)$  é a matriz Laplaciana de  $G$ . Tomemos  $K = \beta^T\beta$  que também é de ordem  $m$ . No caso em que  $G$  é uma árvore  $T$ , a próxima proposição mostra que os  $n - 1$  autovalores da matriz  $-2K^{-1}$  entrelaçam-se com os  $n$  autovalores de  $\Theta(T)$ .

**Proposição 5.4.** *Seja  $T$  uma árvore de ordem  $n$ . Se  $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_n$  são os autovalores da matriz distância  $\Theta(T)$  e  $\kappa_1 \geq \kappa_2 \geq \dots \geq \kappa_{n-1}$  são os autovalores de  $K(T)$  então  $0 > \frac{-2}{\kappa_1} \geq \theta_2 \geq \frac{-2}{\kappa_2} \geq \dots \geq \frac{-2}{\kappa_{n-1}} \geq \theta_n$ .*

Demonstração: Sabemos que  $\beta$  é uma matriz de posto  $n - 1$  e como  $T$  é uma árvore,  $m = n - 1$ . Logo,  $\beta$  tem  $n - 1$  colunas linearmente independentes. Nós vamos aplicar o procedimento de ortonormalização de Gram-Schmidt sobre estas colunas, o que pode ser feito por uma sequência finita de operações. Assim, existe uma matriz  $M$  de ordem  $n - 1$  cujas colunas formam um conjunto de vetores ortonormais. Sabemos ainda que os vetores-coluna de  $\beta$  e os de  $\beta M$  geram um mesmo espaço vetorial e que em cada coluna de  $\beta$  há exatamente duas entradas não nulas, uma 1 e outra,  $-1$ . Seja  $\mathbf{1}$  a matriz coluna  $n \times 1$  com todas as entradas iguais a 1. Sendo  $\mathbf{1}$  ortogonal a toda coluna de  $\beta$ , temos que  $\mathbf{1}$  será ortogonal a toda coluna de  $\beta M$ . Em particular, a matriz particionada  $U = (\beta M \mid \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{n}})$  é também ortogonal. Façamos

$$U^T \theta(G) U = \begin{bmatrix} M^T \beta^T \Theta \beta M & \frac{M^T \beta^T R}{\sqrt{n}} \\ \frac{R^T \beta M}{\sqrt{n}} & \frac{2W}{n} \end{bmatrix},$$

onde  $R = \Theta \mathbf{1}$  é o vetor-coluna resultante das somas das linhas de  $\Theta(T)$

e  $W = \frac{\mathbf{1}^T \Theta \mathbf{1}}{2}$  é o índice de Wiener, dado pela equação (5.2.3). Sabemos que a relação de semelhança entre matrizes preserva o espectro. Em particular, preserva o espectro da matriz distância  $\Theta(T)$ . Do Lema 5.1, a submatriz principal de  $U^T \Theta(T) U$  é  $-2M^T M$ .

Recordemos, agora, que para  $K = \beta^T \beta$ , a matriz  $M$  foi escolhida de modo que as colunas de  $\beta M$  fossem ortonormais. Assim,  $M^T K M = M^T L(T)^T L(T) M = I_{n-1}$  e então  $M^{-1} K^{-1} (M^T)^{-1} = I_{n-1}$ . Ou seja  $K^{-1} = M M^T$ . Isso nos leva a concluir que  $K^{-1}$  e  $M^T M$  têm também o mesmo espectro. Assim, ao aplicarmos o entrelaçamento de Cauchy, Teorema 2.1, chegaremos ao resultado desejado. ■

**Corolário 5.2.** *Seja  $T$  uma árvore de ordem  $n$ . Se  $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_n$  são os autovalores da matriz distância  $\Theta(T)$  e  $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_{n-1}$ , os autovalores positivos da matriz Laplaciana  $L(T)$ , então  $0 > \frac{-2}{\mu_1} \geq \theta_2 \geq \frac{-2}{\mu_2} \geq \dots \geq \frac{-2}{\mu_{n-1}} \geq \theta_n$ .*

A prova do Corolário 5.2 decorre do Exercício 6, da Seção 5.6.

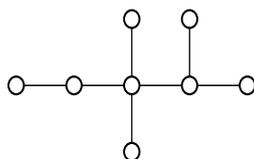


Figura 5.2: Árvore  $T$ .

**Exemplo 5.3.** *Seja  $T$  a árvore da Figura 5.2. Os autovalores da matriz Laplaciana  $L(T)$  são 5, 32340; 3, 41421; 2, 35793; 1; 1; 0, 58579; 0, 31867; 0. Os autovalores da matriz  $K = \beta^T \beta$  de ordem 7, são exatamente os autovalores positivos de  $L(T)$ . Ao tomarmos os autovalores de  $\Theta(T)$ , 16, 0683; -0, 3869; -0, 6625; -1, 2355; -2; -2; -3, 5063; -6, 2770, e aplicarmos o Corolário 5.2, obtemos  $0 > \frac{-2}{5,32340} = -0,37569 \geq -0,3869 \geq \frac{-2}{3,41421} = -0,58578 \geq -0,6625 \geq \frac{-2}{2,35793} = -0,8482 \geq -1,2355 \geq \frac{-2}{1} = -2 \geq -2 \geq \frac{-2}{1} = -2 \geq -2 \geq \frac{-2}{0,58579} = -3,41419 \geq -3,5063 \geq \frac{-2}{0,31867} = -6,2760 \geq -6,2770$ .*

Em geral, as entradas de  $\Theta(G)$  são muito maiores que as respectivas entradas da matriz de adjacência  $A(G)$ . Assim, os coeficientes de  $p_{\Theta(G)}$  tendem a ser muito maiores que seus correspondentes em  $p_G$ . Consequentemente, poderíamos pensar que  $p_{\Theta(G)}$  tem mais chance de nos levar a distinguir árvores não isomorfas que o polinômio característico da matriz de adjacência. No entanto, aqui nossa intuição falha, pois tanto numa quanto na outra matriz, à medida que  $n$  cresce, cresce também o número de pares de árvores não isomorfas e coespectrais a elas relacionadas, [59]. Na Figura 5.3 está o menor par de árvores coespectrais relativamente às respectivas matrizes de adjacência. Ambas têm 8 vértices e são não isomorfas. Já na Figura 5.4, estão as menores árvores com os polinômios característicos das respectivas matrizes distância iguais. Ambas são não isomorfas e têm 17 vértices. Este último exemplo é devido a McKay, [59].

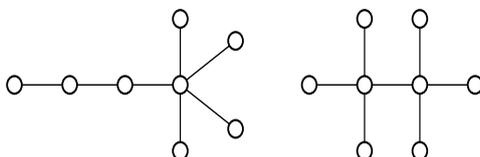


Figura 5.3: O menor par de árvores não isomorfas com o mesmo espectro em relação às suas respectivas matrizes de adjacência

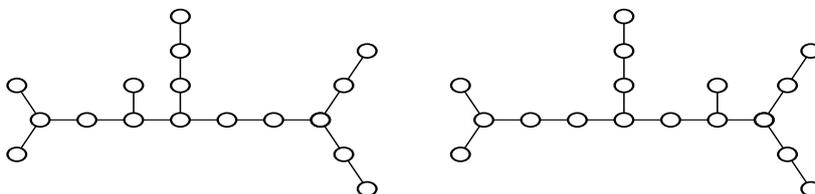


Figura 5.4: O menor par de árvores não isomorfas com o mesmo espectro em relação às suas respectivas matrizes distância

Para terminar a seção, vamos enunciar a Proposição 5.5, que relaciona o índice de Wiener de uma árvore com os autovalores de sua matriz Laplaciana. Embora sua demonstração fuja ao escopo deste

texto (ela pode ser encontrada em [65]), o objetivo de inserirmos este resultado aqui é para observarmos como os invariantes de um mesmo grafo determinados por matrizes diferentes se relacionam de alguma forma.

**Proposição 5.5.** *Sejam  $T$  uma árvore de ordem  $n$  e  $\mu_i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , os autovalores da matriz Laplaciana  $L(T)$ . Temos que  $W(T) = n \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\mu_i}$ .*

## 5.4 Matriz Laplaciana sem sinal

A matriz Laplaciana sem sinal, via espectro e invariantes dele derivados, embora não seja suficiente para permitir a caracterização de grafos, parece garantir a existência de um número muito maior de grafos que podem ser caracterizados pelo seu espectro que a Laplaciana, que por sua vez parece mostrar-se mais eficiente que a matriz de adjacência no auxílio à realização desta tarefa, [31] e [80]. De acordo com Cvetković [31], simulações feitas por Dam e Hammers [33] confirmam tais suspeitas. Além disso, Zhu e Wilson [80] estenderam as simulações de Dam e Hammers [33], confirmando que o espectro da matriz Laplaciana sem sinal é mais eficaz no reconhecimento de grafos, se comparado ao espectro da matriz de adjacência e, até mesmo, da Laplaciana, dentre outras matrizes por eles testadas, [2] e [31].

**Definição 5.3.** *A matriz Laplaciana sem sinal de um grafo  $G$  é dada por  $Q = D + A$ , onde  $D$  é a matriz diagonal cujas entradas são os graus dos seus vértices e  $A$  é a sua matriz de adjacência. O polinômio característico da matriz Laplaciana sem sinal é denotado por  $p_Q(\lambda)$  e seus autovalores são denotados por  $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ , sendo  $q_1$  o índice de  $Q$ .*

De acordo com a definição acima, se nos reportarmos ao Capítulo 3, veremos que a matriz Laplaciana sem sinal já é nossa conhecida. Do Lema 3.2, ela é exatamente a matriz  $BB^T$ , onde  $B$  é a matriz de incidência associada a um grafo não orientado. Também vimos, no Lema 3.1, que vale a seguinte equação matricial para um grafo  $G$  com

$m$  arestas:  $B^T B = 2I_m + A(\ell(G))$ , onde  $I_m$  é a matriz identidade de ordem  $m$  e  $A(\ell(G))$  é a matriz de adjacência do grafo-linha de  $G$ .

O resultado a seguir mostra a relação entre os polinômios característicos da matriz de adjacência do grafo-linha e da matriz Laplaciana sem sinal de um grafo.

**Proposição 5.6.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas,  $\ell(G)$  o seu grafo-linha e  $Q$  a sua matriz Laplaciana sem sinal. Temos que  $p_{\ell(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} p_Q(\lambda + 2)$ .*

Demonstração: Sejam  $A(G)$  a matriz de adjacência de  $G$ ,  $B$  sua matriz de incidência e  $D(G)$  a matriz diagonal dos graus de seus vértices. A prova decorre das seguintes identidades  $BB^T = A(G) + D(G)$  e  $B^T B = \ell(G) + 2I_m$ , oriundas dos Lemas 3.1 e 3.2. ■

Tal como ocorre com a matriz de adjacência, é possível expressar o número de arestas de um grafo em função de um dos coeficientes de  $p_Q(\lambda)$ , como nos diz a próxima proposição.

**Proposição 5.7.** *O número de arestas de um grafo  $G$  com  $n$  vértices é igual a  $\frac{-p_1}{2}$ , onde  $p_1$  é o coeficiente de  $\lambda^{n-1}$  no polinômio característico de  $Q$ .*

Demonstração: O traço da matriz Laplaciana sem sinal é a soma dos graus dos vértices de  $G$ , que por sua vez é  $2m$ , onde  $m$  o número de arestas de  $G$ . Pelo mesmo resultado de teoria de matrizes utilizado na demonstração de 2.1, este valor é também a soma das raízes do polinômio característico de  $Q$  e o valor  $-p_1$  do coeficiente do termo  $\lambda^{n-1}$  deste polinômio. Assim,  $m = \frac{-p_1}{2}$ . ■

A Proposição 5.8 dá um limite superior e outro inferior para o índice de  $Q(G)$  em função dos graus dos vértices de  $G$ .

**Proposição 5.8.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas, cuja sequência de graus é dada por  $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$ . Para todos  $v_i$  e  $v_j$  vértices adjacentes em  $G$ ,  $\min\{d_i + d_j\} \leq q_1 \leq \max\{d_i + d_j\}$ .*

Demonstração: O grafo-linha  $\ell(G)$  de  $G$  tem seu máximo autovalor igual a  $q_1 - 2$ . Seja  $e_{ij}$  uma aresta de  $G$  cujos vértices terminais são  $v_i$

e  $v_j$ . Faça  $u$  ser o vértice de  $\ell(G)$  correspondente à aresta  $e_{ij}$ . É lógico que o grau de  $u$  é igual a  $d_i + d_j - 2$ . Então, temos que

$$\min\{d_i + d_j - 2\} \leq q_1 - 2 \leq \max\{d_i + d_j - 2\}.$$

Daí e do Proposição 5.6, temos o resultado. ■

Para todo grafo  $G$ , sabemos que a matriz Laplaciana  $L(G)$  é uma matriz positiva semidefinida e singular. Consequentemente,  $\mu_n = 0$ . Além disso, se  $G$  é conexo então  $\mu_{n-1} \neq 0$  e este valor é conhecido como *conectividade algébrica* do grafo. Embora  $Q$  seja também positiva semidefinida, ela não é necessariamente singular. Isso só acontece quando  $G$  é um grafo bipartido, como podemos ver na próxima proposição. Diferentemente do restante destas Notas, as demonstrações de algumas das proposições desta seção dependem de resultados não provados aqui, mas que podem ser encontrados em [24] e [29].

**Proposição 5.9** ([31]). *A matriz Laplaciana sem sinal de um grafo  $G$  é singular se e somente se  $G$  é um grafo bipartido.*

Demonstração: Suponhamos que a matriz Laplaciana sem sinal  $Q$  de um grafo  $G$  seja singular, ou seja, que  $\det(Q) = 0$ . Logo,  $Q$  tem um autovalor nulo e do Proposição 5.6, o autovalor  $-2$  em  $\ell(G)$  terá no mínimo multiplicidade  $m - n + 1$ , onde  $n$  é a ordem de  $G$  e  $m$  é o número de suas arestas. Do Teorema 2.2.4 [29], segue que  $G$  é bipartido. No outro sentido, suponhamos que  $G$  não é bipartido; novamente do Teorema 2.2.4, [29],  $\ell(G)$  tem  $-2$  como autovalor com multiplicidade  $m - n$ . Assim,  $Q$  não poderá ter autovalor nulo. Logo,  $\det(Q) \neq 0$ . ■

**Proposição 5.10.** *Para grafos bipartidos, o espectro da matriz Laplaciana sem sinal é igual ao espectro da Laplaciana, ou seja, para todo  $i$ ,  $1 \leq i \leq n$ ,  $q_i = \mu_i$ .*

Demonstração: Como  $G$  é bipartido, seu conjunto de vértices pode ser particionado em dois subconjuntos  $V_1$  e  $V_2$  tais que se dois vértices são adjacentes então eles estão em subconjuntos distintos. Seja  $U$  a

matriz diagonal com  $u_{ii} = 1$ , se  $v_i \in V_1$  e  $u_{ii} = -1$ , se  $v_i \in V_2$ . Temos que  $U$  é invertível com  $U^{-1} = U$ . Sejam  $A$ , a matriz de adjacência, e  $D$  a matriz diagonal dos graus dos vértices de  $G$ . Sendo  $D$  e  $U$  ambas matrizes diagonais, elas comutam entre si. Além disso, é fácil mostrar que  $UAU^{-1} = -A$ . Usando todos estes fatos, podemos mostrar que  $ULLU^{-1} = Q$ . Logo,  $L$  e  $Q$  são matrizes semelhantes e, por isso, seus polinômios característicos são iguais. Consequentemente, elas têm o mesmo espectro. ■

Para os grafos regulares, a Proposição 5.11, que pode ser encontrada em [31], mostra que o espectro da matriz Laplaciana sem sinal pode ser determinado tanto a partir do espectro da matriz de adjacência de  $G$  como da sua matriz Laplaciana. Isto é muito interessante, pois com este resultado, toda a teoria já desenvolvida para as matrizes de adjacência e Laplaciana pode ser diretamente transferida para a Laplaciana sem sinal, pelo menos para os grafos regulares.

**Proposição 5.11.** *Sejam  $G$  um grafo regular de grau  $r$ ,  $L$  sua matriz Laplaciana e  $Q$  sua matriz Laplaciana sem sinal. Temos que  $p_G(\lambda) = p_Q(\lambda+r)$  e  $\sigma_G(\lambda) = (-1)^n p_Q(2r-\lambda+r)$ , onde  $\sigma_G(\lambda)$  indica o polinômio característico de  $L$ .*

Demonstração: Para provar a primeira equação é suficiente lembrar que  $D = rI$  e  $A = Q - rI$  e, para provar a segunda, basta recordarmos que  $L = 2D - Q = 2rI - Q$ . ■

Da Proposição 5.10 e como  $\sigma_G(\lambda) = p_Q(\lambda)$ , ao aplicar a Proposição 5.11, temos que, para grafos regulares bipartidos, o polinômio característico da matriz Laplaciana sem sinal é independente das duas equações dadas no último resultado. Ainda temos que os graus e o número de componentes conexas de um grafo regular podem ser determinados do polinômio característico da matriz Laplaciana sem sinal do grafo, conforme a Proposição 5.12, [29].

**Proposição 5.12.** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas. Então  $G$  é regular se e somente se  $nq_1 = 4m$  e, neste caso, os graus de seus vértices são iguais a  $\frac{q_1}{2}$  e o número de componentes é a multiplicidade*

de  $q_1$ .

Demonstração: Seja  $G$  um grafo  $r$ -regular. Do Teorema 3.22 em [24], temos que  $r$  é o índice de  $G$  e do Teorema 3.23, também em [24], este é um autovalor simples do grafo. Sendo  $G$  regular,

$$m = \frac{nr}{2}. \quad (5.4.4)$$

Da Proposição 5.11,  $q_1 = 2r$  e este é um autovalor simples de  $Q$ . Ao substituirmos  $r = \frac{q_1}{2}$  na equação 5.4.4, temos  $4m = nq_1$ . O número de componentes decorre de que para um grafo regular conexo,  $q_1$  é um autovalor simples de  $G$ . ■

## 5.5 Coespectralidade e aplicações

O espectro de um grafo é largamente utilizado em teoria dos grafos para caracterizar suas propriedades estruturais. No entanto, o espectro não tem sido muito empregado quando se deseja associar e/ou comparar dois desses grafos. Há duas fortes razões para isso. A primeira é que, como já vimos, dois ou mais grafos podem compartilhar o mesmo espectro e a segunda, é que o espectro muda drasticamente com uma pequena troca feita no grafo, por exemplo, inserção, troca ou retirada de uma ou mais arestas e/ou de vértices. Embora esses fatores sejam negativos, quando se pensa no emprego do espectro em problemas relacionados à comparação de grafos, não é necessariamente verdade que eles não possam ser aplicados a tais problemas pois, como sabemos, eles são muito úteis nas áreas de visão computacional e reconhecimento de padrões, onde a utilização da representação de grafos pode induzir medidas de similaridades dos padrões a serem reconhecidos. Em geral essas medidas são definidas empiricamente. Por isso, Zhu e Wilson procuram mostrar em seu artigo [80], como o ferramental da Teoria Espectral de Grafos pode ser aplicado para determinar mais formalmente tais medidas. Dado que há diversas matrizes associadas a grafos, dentre elas as de adjacência, Laplaciana e Laplaciana sem sinal, aqui estudadas, seria muito útil uma análise comparativa entre as

mesmas, para se tentar determinar quais produzem um número menor de pares de grafos coespectrais não isomorfos. Isto é o que veremos a seguir.

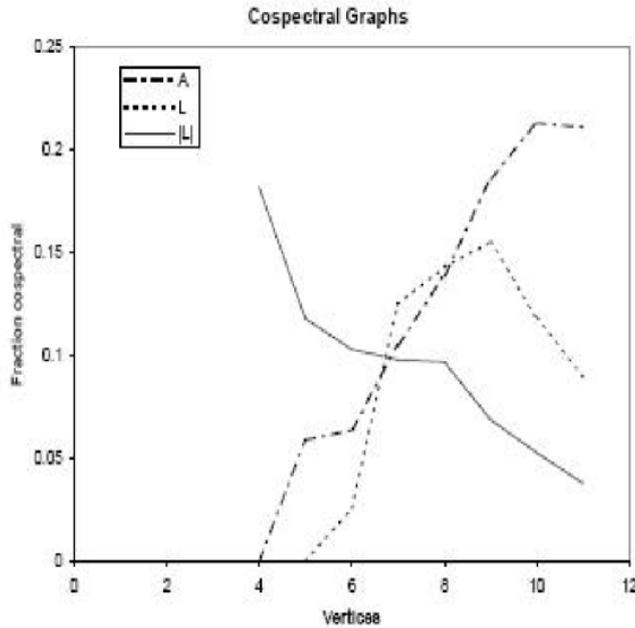


Figura 5.5: Índice de incerteza de grafos coespectrais até 11 vértices.

**Definição 5.4.** *Se dois grafos  $G$  e  $H$  são não isomorfos e coespectrais com respeito a uma matriz  $M$  então eles formam um par coespectral com respeito a  $M$ . Seja  $\mathcal{G}_n$  um conjunto finito de grafos de ordem  $n$ , e  $\mathcal{G}_n^*$  um subconjunto em que cada grafo tem um par coespectral em  $\mathcal{G}_n - \mathcal{G}_n^*$  com respeito a  $M$ . De acordo com [31], a razão  $\frac{|\mathcal{G}_n^*|}{|\mathcal{G}_n|}$  é chamada de **incerteza coespectral de ordem  $n$  com respeito a  $M$** .*

A incerteza coespectral de ordem  $n \leq 11$  com respeito à matriz de adjacência, denotada por  $r_n$ , e com respeito à matriz Laplaciana sem sinal, denotada por  $s_n$ , determinadas por Haemers e Spence e citadas em [31], estão na Tabela 5.1. A incerteza coespectral com respeito à matriz Laplaciana, denotada por  $\ell_n$ , será utilizada mais adiante na

n	4	5	6	7	8	9	10	11
$r_n$	0	0.059	0.064	0.105	0.139	0.186	0.213	0.211
$s_n$	0.182	0.118	0.103	0.098	0.097	0.069	0.053	0.038

Tabela 5.1: Incertezas coespectrais para  $A(G)$  e a  $Q(G)$ , com  $G$  até 11 vértices

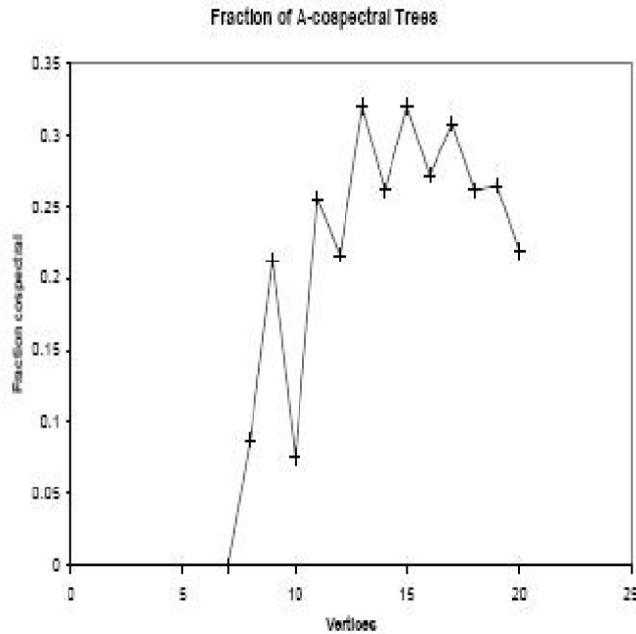


Figura 5.6: Índice de incerteza associado à  $A(G)$ , com  $G$  de até 21 vértices.

Tabela 5.2. De acordo com [80], esses pesquisadores investigaram a coespectralidade de grafos de até 11 vértices. Segundo eles, a matriz de adjacência parece a pior representação, a matriz Laplaciana é superior e a matriz Laplaciana sem sinal é melhor ainda, em termos de não produzir um grande número de pares coespectrais de grafos. A Laplaciana sem sinal contribui com um máximo de 3.8% desses pares, para grafos de até 11 vértices, conforme a Figura 5.5 e a Tabela 5.1. Isso parece uma taxa muito boa, se comparada com as taxas das outras matrizes e se considerado o número de vértices dos grafos (ainda pequeno) nas simulações realizadas.

Ainda de acordo com [80], Schwenk mostrou que para  $n$  suficientemente grande, “quase todas as árvores” são coespectrais, ou seja, a menos de um número finito delas, as demais constituem pares não isomorfos coespectrais. Isto não é muito bom, na medida que desejamos uma representação de grafos com uma pequena percentagem de grafos com tais propriedades. Foi então que Zhu e Wilson, [80], decidiram estender as simulações feitas anteriormente pelos pesquisadores já citados e investigaram a coespectralidade das árvores de até 21 vértices. Veja as Figuras 5.6 e 5.7 e a Tabela 5.2.

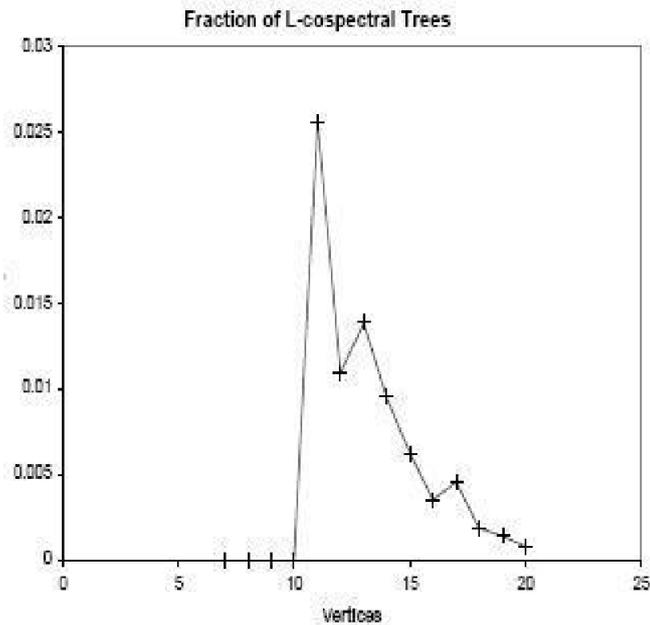


Figura 5.7: Índice de incerteza associado à  $L(G)$  com  $G$  de até 21 vértices.

Como as árvores são grafos bipartidos, segundo a Proposição 5.10, seus espectros em relação às matrizes Laplaciana e Laplaciana sem sinal coincidem. Assim, podemos constatar que, no caso das árvores, a incerteza coespectral associada à matriz Laplaciana (e, portanto à Laplaciana sem sinal) é muito menor (próximo a zero) que aquela correspondente à matriz de adjacência (em torno de 22%). Embora isto

$n$	$\sharp(T)$	$r_n$	$\ell_n = s_n$	$A(T)\&L(T)$
8	23	0.087	0	0
9	47	0.213	0	0
10	106	0.075	0	0
11	235	0.255	0.0255	2
12	551	0.216	0.0109	2
13	1301	0.319	0.0138	2
14	3159	0.261	0.0095	10
15	7741	0.319	0.0062	2
16	19320	0.272	0.0035	14
17	48629	0.307	0.0045	40
18	123867	0.261	0.0019	38
19	317955	0.265	0.0014	64
20	823065	0.219	0.0008	148
21	2144505	0.213	0.0005	134

Tabela 5.2: Índices coespectrais para  $A(T)$ ,  $L(T)$  e  $A(T)\&L(T)$ .

não contrarie o resultado de Schwenk para as árvores, podemos esperar que com relação aos pares coespectrais de grafos não isomorfos, mesmo para as árvores, a matriz Laplaciana sem sinal é, sem dúvida, uma boa escolha para representação dos grafos. A Tabela 5.2 discretiza os resultados ilustrados nas Figuras 5.6 e 5.7, [80].

Naturalmente que os índices coespectrais  $r_n$  e  $\ell_n$ , nas 3<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> colunas da Tabela 5.2, correspondem, respectivamente, às matrizes  $A(T)$ ,  $L(T)$  (esta última, dado que  $T$  é uma árvore, é igual a  $Q(T)$ ). Daí, podemos deduzir que a matriz Laplaciana é claramente superior à de adjacência para as árvores das ordens consideradas. Além disso, a sequência gerada por esses índices tende a decrescer, sugerindo que eles podem ser desprezíveis para árvores muito grandes. A tendência da sequência gerada pelos índices da matriz de adjacência é menos definida, mas parece decrescer depois de 15 vértices. Os resultados de Zhu e Wilson, [80], parecem confirmar aqueles de Haemers e Spence. A última coluna da Tabela 5.2 mostra o número de pares de árvores que são ao mesmo tempo coespectrais em relação a  $A$  e a  $L$  e sendo, cada valor considerado de  $n$ , muito pequeno. Como é possível que as árvores (no caso geral, os grafos) de cada par não sejam correla-

cionados entre si, a combinação desses dois espectros (no caso das árvores) e de três ou mais espectros (no caso dos grafos) poderia ser utilizada nos problemas de comparação e/ou relacionamento de grafos tão necessários para o reconhecimento de padrões.

## 5.6 Exercícios

1. Construa um grafo conexo  $G$  e rotule seus vértices com triplas da forma  $F(v) = (f_1, f_2, f_3)$  onde  $f_i \in \{0, 1, -1, *\}$  e tal que  $F$  “preserve as distâncias” em  $G$ . É possível encontrar um grafo conexo em que os vértices fossem rotulados com duplas em vez de triplas?
2. Seja o grafo  $G$  da Figura 5.8. Calcule  $\Theta(G)$ , o índice de Wiener de  $G$  e  $p_{\Theta(G)}$ .

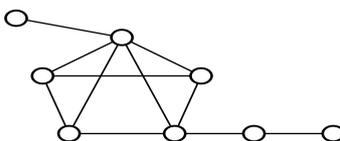


Figura 5.8: Grafo  $G$ .

3. Prove que para qualquer árvore  $T$ , sua matriz distância  $\Theta(T)$  é invertível e tal que o número de autovalores negativos de  $\Theta(T)$  é  $n - 1$ . Veja Corolário 5.1.
4. Os alcanos, também chamados parafinas, são hidrocarbonetos alifáticos saturados, de fórmula geral  $C_nH_{2n+2}$ . Eles se apresentam em cadeias lineares ou ramificadas. Os alcanos lineares são designados através de prefixos seguidos do sufixo “ano”. Por exemplo, na Figura 5.9, temos a representação do alcano, 2, 2, 4-trimetilpentano, que é utilizado para definir um tipo de combustível, [76] e a árvore  $T$  que representa este alcano. Determine o índice de Wiener para  $T$ .

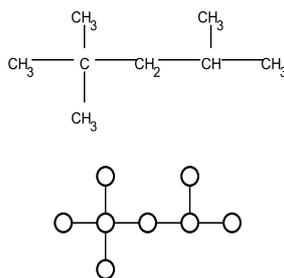


Figura 5.9: Um alcano 2,2,4-trimetilpentano e a árvore que o representa.

5. Dê uma orientação qualquer para as arestas da árvore  $T$  da Figura 5.9 e determine sua matriz de incidência  $\beta$ . Vimos na Seção 5.2 que  $K(T) = \beta^T \Theta$ . Mostre que  $K(T) = -2I_{n-1} \Theta(T)$ . Atribua à  $T$  uma outra orientação e mostre que a equação anterior independe da orientação considerada, conforme visto no Capítulo 3. Calcule os espectros da matriz distância  $\Theta(T)$  e da matriz  $K(T)$ . Verifique que os seus autovalores se entrelaçam, conforme a proposição 5.4.
6. Prove que os autovalores positivos da matriz Laplaciana de  $T$ ,  $L(T)$  são iguais aos de  $K(T)$ .
7. Quantas arestas tem um grafo  $G$  de 50 vértices, sabendo-se que o coeficiente do polinômio característico de sua matriz Laplaciana sem sinal  $Q$  é  $p_1 = -1950$ ?
8. Determine o índice  $q_1$  da matriz Laplaciana sem sinal de um grafo conexo 4-regular com 15 vértices. A partir de  $q_1$ , determine o índice  $\lambda_1$  da matriz de adjacência  $A(G)$  e o índice  $\mu_1$  da matriz Laplaciana  $L(G)$ .
9. Enumere todas as árvores não isomorfas com  $n = 8$  vértices. Verifique se há pares coespectrais em relação a  $A(T)$  e em relação a  $L(T)$ . Comprove que as taxas  $r_8$  e  $l_8$  são as dadas na Tabela 5.2.

10. Enumere todos os grafos conexos não isomorfos com  $n = 5$  vértices. Verifique se há pares coespectrais em relação a  $A(G)$ , em relação a  $L(T)$  e em relação a  $Q(G)$ . Comprove que as taxas  $r_5$ ,  $s_5$  e  $l_5$  são as dadas na Tabela 5.1.

## 5.7 Notas bibliográficas

Esse capítulo aborda as matrizes de distância e Laplaciana sem sinal, que ao contrário das matrizes tratadas nos capítulos anteriores, são muito pouco (ou quase nada) abordadas nos livros de Teoria Algébrica e/ou Espectral dos Grafos. No entanto, o interesse pelo seu estudo, para descobrir como elas podem determinar propriedades estruturais dos grafos, vem crescendo muito nos dias atuais. Isto se deve às aplicações práticas em Química e Ciência da Computação que, cada vez mais, vêm se utilizando de invariantes decorrentes dessas matrizes. Assim, as recomendações que fazemos se limitam a artigos. No caso da matriz distância, em Graham & L. Lovász podemos encontrar a caracterização do polinômio característico para as árvores, que surpreendentemente, independe de sua estrutura. Há outros artigos teóricos com esse enfoque: [6], [7], [21], [22] e [61] e muitos outros, que nos levam ao uso de invariantes aplicados à Química. Indicamos também [3], [46], [62] e [66]. Em reconhecimento de padrões e problemas de visão computacional, o uso da matriz distância aparece em [69].

Segundo Cvetković, Rowlinson & Simić [31], tendo em vista as simulações feitas em [33] e [80], o baixo índice de coespectralidade da matriz Laplaciana sem sinal é a principal motivação para o seu recente estudo. D.Cvetković e Simić vêm desenvolvendo uma Teoria Espectral de Grafos baseada nas propriedades desta matriz, [26], [27] e [28]. Temos ainda o texto de Zhu e Wilson [80], que motiva os pesquisadores em visão computacional e reconhecimento de padrões a utilizarem todo o vasto ferramental da Teoria Espectral dos Grafos, principalmente os invariantes que poderão decorrer da matriz Laplaciana sem sinal.

# Bibliografia

- [1] N.M.M. Abreu e C.S. Oliveira, “Álgebra Linear em Teoria de Grafos”, Minicurso em São Mateus, UFES, ERMAC/SBMAC, 2004.
- [2] N.M.M. Abreu e C.S. Oliveira e L.S. de Lima, Conjecturas geradas automaticamente pelo sistema AutoGraphiX: provas de algumas desigualdades para o índice da matriz Laplaciana sem sinal, em “Anais do XXXIX SBPO”, Fortaleza, 2007.
- [3] A.T. Balaban, D. Ciubotariu e Medeleanu, M., Topological indices and real number vertex invariants based on graph eigenvalues and eigenvectors, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **31** (1991) 517-523.
- [4] A.T. Balaban e M.V. Diudea, Real Number Vertex Invariants: Regressive Distance Sums and Related Topological Indices, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **33** (1993), 421-428.
- [5] R. Balakrishnan, The energy of a graph, *Linear Algebra Appl.*, **387**, 287-295(2004).
- [6] R.B. Bapat, Distance matrix of a tree with attached graphs, *Linear Algebra Appl.*, **411** (2005), 295-308.
- [7] R.B. Bapat, Determinant of the distance matrix of a tree with matrix weights, *Linear Algebra Appl.*, **416(1)** (2006), 2-7.
- [8] S. Barnett, “Matrices Methods and Applications”, Oxford University Press, New York, 1990.

- [9] J-C. Bermond, C. Delorme e J.J. Quisquater, Table of large  $(\Delta, D)$ -graphs, *Discrete Applied Mathematics*, **37/38** (1992), 575-577.
- [10] L.W. Beineke e R.J. Wilson “Topics in Algebraic Graph Theory”, Encyclopedia of Math. Appl., **102**, Cambridge, 2004.
- [11] Bell, D. C., Atkison, J. S., Carlson, J. W., Centrality for disease transmission networks, *Social Networks*, **21**(1999), 1-21.
- [12] N. Biggs, “Algebraic Graph Theory”, Great Britain, Cambridge University Press, 2a. ed., 1993.
- [13] P.O. Boaventura Netto, “Teoria, Modelos e Algoritmos em Grafos”, E. Blücher, 4a edição, 2006.
- [14] B. Bollobás, “Graph Theory: An Introductory Course”, Springer-Verlag, 1979.
- [15] Bonacich, P., Power and Centrality: A Family of Measures, *The American Journal of Sociology*, **92**(1987), 5, 1170-1182.
- [16] Borgatti, S. P., Centrality and network flow, *Social Networks*, **27**(1)(2005), 55-71.
- [17] P.J.Cameron, J.M. Goethals, J.J. Seidel e E.E. Shult, Line Graphs, roots systems, and elliptic geometry, *J. Algebra* **43** (1976), 305-327.
- [18] G. Caporossi e P. Hansen, Variable neighborhood search for extremal graphs. I. The AutoGraphiX system. *Discrete Mathematics*, **212** (2000), 29-44.
- [19] F.R.K. Chung, “Spectral Graph Theory”, CBMS, Conference Board of the Mathematical Sciences, Regional Conference Series in Mathematics, **92**, AMS, 1994.
- [20] Collatz e Sinogowitz, Spectren endlicher grafen, *Abh. Math. Sem.*, Univer. Hamburg, **21** (1957), 63-77.
- [21] K.L. Collins, Distance Matrices of Trees, MIT Thesis, 1986.

- [22] K.L. Collins, On the conjecture of Graham and Lovász about distance matrices, *Discrete Appl. Math.* **25** (1989) 27-35.
- [23] D. Cvetković, Graphs and their spectra, *Publ. Elektrotehn, Fak., Ser. Mat. Fiz., Univ. Beograd*, **354**(1971), 1-50.
- [24] D. Cvetković, M. Doob e H. Sachs “Spectra of Graphs - Theory and Application”, Pure and Applied Mathematics, Academic Press, New York, 1980.
- [25] D.Cvetković, M. Doob e H. Sachs, “Spectra of Graphs, Theory and Application”, 3<sup>a</sup> edição, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg-Leipzig, 1995.
- [26] D. Cvetković, S.K. Simić, Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, I, *Publ. Inst. Math.(Beograd)* **85 (99)** (2009) 19-33.
- [27] D. Cvetković, S.K. Simić, Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, II, *Linear Algebra Appl.* **432**(2010) 2257-2272.
- [28] D. Cvetković, S.K. Simić, Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, III, *Appl. Anal. Discrete Math.* **4** (2010) 156-166.
- [29] D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić, “Eigenspaces of graphs”, *Encyclopedia of Math. Appl.*, **66**, Cambridge, 1997.
- [30] D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić, “Spectra Generalizations of Line Graphs: On graphs with least eigenvalue  $-2$ ”, *LMS, Lecture Note Series*, **314**, Cambridge University Press, 2004.
- [31] D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić, Signless Laplacian of finite graphs, *Linear Algebra Appl.*, **423** (2007),155-171.
- [32] D. Cvetković, P. Rowlinson P. e K.Simić, *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.

- [33] E. R. van Dam e W. Haemers, Which graphs are determined by their spectrum?, *Linear Algebra Appl.*, **373**(2003), 241-272.
- [34] R. Diestel, “Graph Theory”, Graduate Texts in Mathematics, Springer, **173**(1997).
- [35] A.A. Dobrynin, R. Entringer e I. Gutman, Wiener Index of Trees: Theory and Applications, *Acta Applicandae Mathematicae: An International Survey Journal on Applying Mathematics and Mathematical Applications*, **66(3)**(2001), 211-249.
- [36] J. Donadelli, “Métodos da Álgebra Linear em Teoria de Grafos”, Relatório Técnico 002, Departamento de Informática, UFPR, 2007.
- [37] M. Fiedler, Algebraic Connectivity of Graphs, *Czechoslovak Math. J.*, **23**(1973), 298-305.
- [38] Freeman, L. C., A Set of Measures of Centrality Based on Betweenness, *Sociometry*, **40(1)**(1977), 35-41.
- [39] Freeman, L. C., Centrality in Social Networks: Conceptual Clarification, *Social Networks*, **1**(1979), 215-239.
- [40] C. Godsil e G. Royle, “Algebraic Graph Theory”, Graduate Texts in Mathematics, Springer-Verlag, 2001.
- [41] Gonçalves, J. A. M., Portugal, L. S., Boaventura Netto, P. O., As potencialidades de indicadores de centralidade no estudo de um corredor ferroviário”, em “Anais do XIX ANPET - Congresso De Pesquisa E Ensino Em Transportes”, Recife, PE, 2005.
- [42] R.L. Graham, L. Lovász, Distance Matrix Polynomial of Trees, *Advances in Math.* **29**(1978), 60-88.
- [43] R.L. Graham e O. Pollak, On the addressing problem for loop switching, *Bell. System Tech. J.*, **50**(1971), 2495-2519.
- [44] R. Grone e R. Merris, Ordering trees by algebraic connectivity, *Graphs and Combinatorics*, **6**(1990), 229-237.

- [45] I. Gutman, The energy of a graph, *Ber. Math. Statist. Sect. Forschungszentrum Graz.*, **103**(1978), 1-22.
- [46] I. Gutman, D. Vidović e D. Stevanović, Chemical applications of the Laplacian spectrum. VI. On the largest Laplacian eigenvalue of alkanes, *J. Serb. Chem. Soc.*, **67**(2002), 407-413.
- [47] I. Gutman, Topology and stability of conjugated hydrocarbons. The dependence of total  $\pi$ -electron energy on molecular topology, *J. Serb. Chem. Soc.*, **70(3)**(2005), 441-456.
- [48] I. Gutman, and B. Zhou, Laplacian energy of a graph, *Linear Algebra Appl.*, **414** (2006) 29-37.
- [49] F. Harary, "Graph Theory", Addison Wesley, 1969.
- [50] A.R. Horn e Johnson, C.R. "Matrix Analysis", Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [51] E. Hückel, Quantentheoretische Beiträge Zum Benzolproblem, *Z. Phys.*, **70**(1931), 204-286,.
- [52] <http://www.monod.biomath.nyu.edu/tutorials/spectral-analysis.html> (em 12/03/2004).
- [53] S. Kirkland, J. Moliterno, M. Neumann e B. Shader, On graphs with equal algebraic connectivity, *Linear Algebra Appl.*, **341**(2002), 45-56.
- [54] D.J. Klein, Z. Milanić, D. Plavšić e N. Trinajstić, Molecular Topological Index: A relation with the Wiener Index, *J. Chem. Inf. Compu. Sci.* **32**(1992), 304-305.
- [55] D.J. Klein, I. Lukovits, I. Gutman, On the Definition of the Hyper-Wiener Index for Cycle-Containing Structures *J. Chem. Inf. Compu. Sci.* **35**(1995), 50-52.
- [56] H.C. Longuet-Higgins, Resonance structures and MO in unsaturated hydrocarbons, *J. Chem. Phys.* **18**(1950), 265-274.

- [57] B. Luo, R.C. Wilson e E.R. Hancock, The Independent and Principal Component of Graph Spectra, in “16th International Conference on Pattern Recognition”(ICPR’02) (2002).
- [58] L. Markenzon, O. Vernet, “Representações Computacionais de Grafos”, *Notas em Matemática Aplicada*, **25**, SBMAC, 2006.
- [59] B.D. McKay, On the spectral characterization of trees, *Ars Combinatoria III*, 1977, 219-232.
- [60] B.J. McClelland, Properties of the latent roots of a matrix: the estimation of  $\pi$ -electron energies, *J. Chem. Phys.*, **54**(1971), 640-643.
- [61] R. Merris, The Distance Spectrum of a Tree, *Journal of Graph Theory*, **14(3)**(1990), 365-369.
- [62] Z. Mihalic, S. Nikolić e N. Trinajstić, Comparative Study of Molecular Descriptors Derived from the Distance Matrix, *J. Chem. Inf. Compu. Sci.*, **32**(1992), 28-37.
- [63] Z. Mihalic, D. Veljan, D. Ami, S. Nikoli, S. Dejan, D. Plavi e N. Trinajsti, The distance matrix in chemistry, *Journal of Mathematical Chemistry*, **11(1)**(1992), 223-258.
- [64] B. Mohar, The Laplacian Spectrum of Graphs, *Graph Theory, Combinatorics, and Applications*, **2**(1991), 871-898.
- [65] B. Mohar, Eigenvalues, Diameter, and Mean Distance in Graphs, *Graphs and Combinatorics*, **7**(1991), 53-64.
- [66] B. Mohar, A novel definition of the Wiener index of trees, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.*, **33**(1993), 153-154.
- [67] Poole, D., “Álgebra Linear”, Cengage Learning Editores, 2004.
- [68] M. Randić, A.F. Kleiner e L.M. DeAlba, Distance Matrices, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.*, **34**(1994), 277-286.

- [69] A. Robles-Kelly e E.R. Hancock, Edit Distance From Graph Spectra, in “Proceedings of the Ninth IEEE International Conference on Computer Vision”, (ICCV 2003), **2**, IEEE, Computer Society, 2003.
- [70] Sabidussi, G., The centrality index of a graph, *Psychometrika*, **31**(1966), 581-603.
- [71] D. Stevanović, I. Stanković, Remarks on hyperenergetic circulant graphs, *Linear Algebra Appl.*, **400**(2005), 345-348.
- [72] D. Stevanović, NewGraph system, <http://www.sgt.pep.ufrj.br/index.php> (em 24/09/2011).
- [73] J.L. Szwarcfiter, “Grafos e Modelos Computacionais”, Editora Campus, 1984.
- [74] J.L. Szwarcfiter e L. Markenzon, “Estrutura de Dados e seus Algoritmos”, 2a. edição, LTC, Livros Técnicos e Científicos, 1994.
- [75] C.T.M. Vinagre, M.T.A. Marins e R.R. Del-Vecchio, Introdução à Teoria Espectral de Grafos e Aplicações, em Anais do 60º Seminário Brasileiro de Análise, SBA, UERJ (2004).
- [76] Wikipedia, <http://pt.wikipedia.org/wiki>, em 22/04/2007.
- [77] *yEd Graph Editor* disponível em [http://www.yworks.com/en/products\\_yed\\_about.html](http://www.yworks.com/en/products_yed_about.html) acessado por último em 03/10/2011.
- [78] B. Zhou, On the largest eigenvalue of the distance matrix of a tree, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **58**(2007), 657-662.
- [79] B. Zhou, More on energy and Laplacian energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **64**(2010) 75-84.
- [80] P. Zhu, R.C. Wilson, A Study of Graph Spectra for Comparing Graphs, Relatório Técnico, Universidade de York, UK, 2005.

# Índice

- $J$ , 37
- $\mathbb{M}_n$ , 29
- $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T$ , 32
- árvore, 16
- árvore geradora, 72
- índice de  $G$ , 24
- índice de Wiener, 104
- índice do Laplaciano, 83
  
- aresta, 13
- autovalor do grafo  $G$ , 24
  
- cadeia, 15
- cadeia aberta, 15
- cadeia fechada, 15
- caminho, 15
- caracterizado pelo seu espectro, 45
- centralidade de autovetor do  $i$ -ésimo vértice, 30
- ciclo, 15
- cocktail party graph, 38
- componente conexa, 16
- comprimento de um caminho ou de um ciclo, 15
- conectividade algébrica, 83
- conectividade de arestas, 85
- conectividade de vértices, 85
- conjunto de corte, 87
  
- corte maximal de um grafo, 87
- cubo, 57
  
- diâmetro, 19
- distância entre um par de vértices, 19
  
- energia Laplaciana de um grafo, 100
- energia de um grafo, 47
- espectro de  $G$ , 24
- espectro do Laplaciano de um grafo, 68
  
- floresta, 16
  
- grafo, 13
- grafo  $k$ -partido, 16
- grafo autocomplementar, 99
- grafo bipartido, 17
- grafo bipartido completo, 17
- grafo cúbico ou 3-cubo, 22
- grafo circulante, 39
- grafo complementar de um grafo, 18
- grafo completo, 15
- grafo conexo, 15
- grafo de Petersen, 20, 55
- grafo desconexo, 16

- grafo estrela, 99  
 grafo exato, 90  
 grafo hiperenergético, 50  
 grafo regular de grau  $k$  ou  $k$ -regular, 14  
 grafo totalmente desconexo, 45  
 grafo tripartido, 17  
 grafo trivial, 13  
 grafo-linha, 17  
 grafos, 14  
 grafos coespectrais, 44  
 grafos isomorfos, 44  
 grafos moleculares, 47  
 grafos simples, 14  
 grau de um vértice, 13  
 grau máximo, 19  
 grau médio de um grafo, 19  
 grau mínimo, 18  
 hiperoctaedro, 38  
 incerteza coespectral, 114  
 invariantes de grafo, 44  
 isomorfismo, 44  
 Laplaciano de um grafo, 67  
 matriz de incidência com respeito a uma dada orientação, 69  
 matriz circulante, 40  
 matriz de adjacência, 24  
 matriz de incidência, 59  
 matriz diagonal dos graus, 67  
 matriz distância, 102  
 matriz Laplaciana, 67  
 matriz Laplaciana sem sinal, 109  
 menor principal, 25  
 Möbius Ladder, 42  
 pipa, 56  
 polinômio característico de  $G$ , 24  
 polinômio característico da matriz distância, 102  
 polinômio característico da matriz Laplaciana sem sinal, 109  
 raio espectral de um grafo, 30  
 semirregular, 90  
 subgrafo, 14  
 subgrafo induzido, 14  
 submatriz principal, 26  
 Teorema de entrelaçamento para matriz Laplaciana, 71  
 Teorema do entrelaçamento para matriz de adjacência, 29  
 triângulo, 15  
 união de grafos, 18  
 vértice, 13  
 vértices adjacentes, 13  
 vetor corretor, 91