

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Matemática Pura e Aplicada - CCENS

RELATÓRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

*Introdução à Teoria dos Grafos e Algumas Aplicações*

Discente: *Lucas Pereira Barbosa*

Orientador: *Prof. Dr. Victor do Nascimento Martins (DMPA - UFES)*

AGOSTO/2019

---

# SUMÁRIO

<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>1 Teoria Elementar dos Grafos</b>	<b>5</b>
1.1 Conceitos Básicos . . . . .	5
1.2 Ciclos, Caminhos e conexidade . . . . .	6
1.3 Passeio de Euler . . . . .	7
1.4 Tipos Especiais de Grafos . . . . .	8
1.5 Euler e as Pontes de Königsberg . . . . .	10
1.5.1 Introdução . . . . .	10
1.5.2 Elementos Matemáticos . . . . .	11
<b>2 Álgebra de Matrizes</b>	<b>13</b>
2.1 Matrizes . . . . .	13
2.2 Diagonalização . . . . .	19
2.2.1 Diagonalização de Matrizes Simétricas . . . . .	21
<b>3 Introdução à Teoria Espectral dos Grafos</b>	<b>23</b>
3.1 Matriz de Adjacência . . . . .	23
3.2 Isomorfismos de Grafos . . . . .	28
3.3 Relação entre Parâmetros de Grafos . . . . .	29
3.4 Energia de Grafos . . . . .	32
3.5 Aplicações . . . . .	34
3.5.1 Transporte (Estações de metrô - Matriz de adjacência) . . . . .	34
3.5.2 Química (Espectro da matriz de Adjacência e Carbonos quartenários )	36
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>39</b>

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Matemática Pura e Aplicada - CCENS

RESUMO

INTRODUÇÃO À TEORIA DOS GRAFOS E ALGUMAS APLICAÇÕES

*Este subprojeto propõe o estudo da teoria dos grafos utilizando técnicas de álgebra linear. Temos associado a um grafo determinada matriz denominada matriz de adjacência. Neste trabalho procuramos fazer uma introdução à teoria de matrizes para então estudar algumas propriedades das matrizes de adjacência que nos dão algumas características estruturais do grafo. A teoria espectral dos grafos estudada neste trabalho, trata-se de um híbrido entre álgebra linear, teoria dos grafos e combinatória. Nela estudamos definições como as de polinômio característico de um grafo, espectro de um grafo, o raio espectral, isomorfismo de grafos, dentre outras, para finalmente, procurar entender algumas aplicações práticas da teoria. A principal justificativa para a realização desse subprojeto foi introduzir o estudante no âmbito da pesquisa matemática através de tópicos não vistos durante a graduação, assim como apresentá-lo uma maneira interessante de mesclar áreas distintas dentro da matemática. O projeto foi desenvolvido através do estudo e de exposições semanais pelo estudante ao orientador sobre os tópicos abordados.*

**Palavras chaves:** Matriz de adjacência, autovalores e autovetores, grafos, espectro de um grafo, conexidade.

---

# INTRODUÇÃO

Um grafo  $G = G(V, E)$  é uma estrutura composta, essencialmente, por dois subconjuntos. O subconjunto denotado por  $V$  é o conjunto de vértices e o subconjunto  $E$  é o conjunto das arestas do grafo. Os vértices em um grafo são representados graficamente através de pontos e as arestas por ligações entre esses pontos. Outra forma de representar um grafo é através da matriz de adjacência. Neste trabalho, temos como objetivo estudar as propriedades a respeito dessa matriz que representa o grafo de um ponto de vista algébrico. A matriz de adjacência de um grafo  $G$  com  $n$  vértices, com conjunto de vértices  $V = v_1, \dots, v_n$ , é a matriz quadrada  $A(G)$  de ordem  $n$  com elementos

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } (v_i, v_j) \in E, v_i, v_j \in V; \\ 0, & \text{para qualquer outro caso.} \end{cases}$$

Em razão de que várias das propriedades de um grafo podem ser deduzidas através do espectro de matrizes associadas a ele, o ramo da teoria dos grafos estudada aqui é denominada *Teoria Espectral dos Grafos*. Essa teoria teve início na química e na teoria quântica. Tendo como exemplo, podemos representar as moléculas de hidrocarboneto através de um grafo, tomando os átomos como os vértices e as ligações entre eles como as arestas. Como mencionado em [1], em 1931, Huckel verificou que os autovalores de um grafo  $G$  estavam relacionados a energia das ligações  $\pi$  associadas à molécula.

Motivados pelo *survey* de Abreu, [4], a respeito da ligação entre Álgebra Linear, Matemática Discreta e Combinatória com Origens na Química no estudo da teoria dos grafos, buscamos aprofundar um pouco mais nos conceitos básicos da teoria a partir de [1, 5].

Dentre os diversos exemplos de aplicações dessa teoria temos algumas em determinadas situações reais, como na otimização de redes de telecomunicações e desenvolvimento do fluxo de transportes. Além disso, o campo de investigação dos grafos abrange diversas áreas das

engenharias, química,, computação e a matemática.

Neste trabalho, o nosso foco é relacionar as propriedades entre o grafo e seu espectro. Veremos que há uma série de propriedades de grafos que podem ser deduzidas de seus autovalores, e vice-versa. Porém, em geral, grafos não são univocamente determinados a partir do seu espectro, onde o espectro de um grafo é o conjunto dos autovalores de sua matriz de adjacência juntamente com suas respectivas multiplicidades algébricas

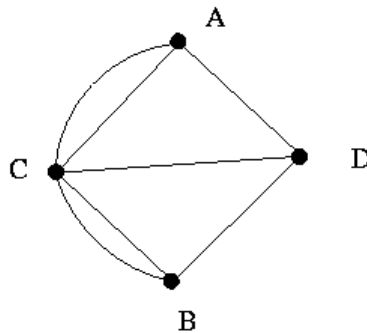
$$\text{spect}G = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & \lambda_s \\ m_A(\lambda_1) & \dots & m_A(\lambda_s) \end{bmatrix}$$

Podemos verificar também várias propriedades dos grafos analisando a própria matriz de adjacência  $A(G)$  e o seu polinômio característico

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

Entretanto, vale ressaltar que não é possível determinar um grafo a partir de um espectro, ou seja, apresentado um espectro de grafo, nem sempre podemos identificar o grafo que possui esse conjunto de autovalores como seu espectro.

Este trabalho é dividido em três capítulos. No Capítulo 1 procuramos fazer um breve resumo da teoria básica dos grafos. Primeiras definições e origem da teoria, através do clássico problema das sete pontes. Apresentamos alguns conceitos básicos da teoria elementar dos grafos, os tipos de grafos, as conexidades entre os vértices, o problema das pontes e os elementos matemáticos utilizados para solucionar um passeio de Euler, que segundo [3] e [7] foi definido a partir do problema das pontes de Königsberg representado pelo grafo abaixo:



Além disso, procuramos neste capítulo, estabelecer as notações que serão utilizadas no decorrer do trabalho.

O objetivo do Capítulo 2, é apresentar ferramentas de álgebra linear para auxiliar no entedimento das seções subsequentes relacionadas a teoria espectral. Procuramos apresentar

os principais conceitos envolvendo matrizes entre outros resultados de álgebra linear baseados em [2, 6]. Este capítulo tem por objetivo munir o leitor dos conhecimentos mínimos necessários sobre matrizes e determinantes que são indispensáveis para entendimento e compreensão de todo o conteúdo da pesquisa feita aqui. Utilizamos de uma linguagem mais simples que segundo [2] pode ser facilmente compreendida por alunos de quaisquer cursos de Engenharia, Matemática, Física e Computação, uma vez que a teoria dos grafos se aplica em qualquer um desses cursos.

Por fim, no Capítulo 3 apresentamos uma introdução à Teoria Espectral dos Grafos. Finalizamos o capítulo com uma breve seção contendo algumas aplicações relacionadas com todo o conteúdo visto, tais como a demonstração da estrutura dos hidrocarbonetos e a energia dos grafos relacionada a ela. Também aplicamos o conceito de matriz de adjacência ao cálculo do número de caminhos entre dois vértices quaisquer de um grafo para então responder a seguinte questão: escolhendo dois vértices quaisquer, sempre existe um caminho no grafo que os ligue? Para isso, basta o grafo ser conexo. Além disso, conseguimos determinar o número de caminhos de comprimento  $l$  utilizando a matriz de adjacência. Basta efetuar  $A^l$ , onde  $l$  é o comprimento desejado. Cada entrada  $a_{i,j}$  na matriz  $A^l$  nos dá o número de caminhos de comprimento  $l$  entre os vértices  $v_i, v_j$ . Portanto, se a equação  $A^1 + A^2 + A^3 + \dots + A^{n-1}$  nos dá somente entradas diferentes de zero, garantimos a conexidade do grafo.

O projeto de Pesquisa no qual este Subprojeto está vinculado tem por objetivo estudar a Teoria Espectral dos Grafos, sendo assim este projeto procurou munir o estudante de toda uma base teórica suficiente para adentrar-se em pesquisas na Teoria Espectral dos Grafos, o que possibilita o estudante a prosseguir seus estudos na área em questão.

---

---

# CAPÍTULO 1

---

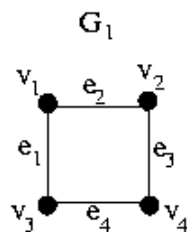
## TEORIA ELEMENTAR DOS GRAFOS

### 1.1 Conceitos Básicos

A estrutura dos grafos admite representações, por exemplo, graficamente ou em forma de lista. Para que um grafo  $G(V, E)$  fique bem definido devemos ter dois conjuntos: conjunto de arestas, denotado por  $E(G)$  e o conjunto de vértices, denotado por  $V(G)$ . De maneira simples, a estrutura de um grafo é definida por esses dois conjuntos. Quando existe uma ou mais arestas ligando dois vértices, dizemos que esses vértices são **adjacentes** e que as arestas são **incidentes** nos vértices. O número de vértices de um grafo  $G$  será denotado por  $n$  e o número de arestas de  $G$  por  $m$ .

O **grau** de um vértice  $v$  é dado pelo número de arestas incidentes sobre  $v$  e denotado por  $d(v)$ . Quando temos um vértice com uma aresta de saída ligada a ele mesmo como a aresta de chegada, temos um **laço**. Toda vez que tivermos esse caso, contamos as duas extremidades da aresta para definir o grau do vértice que possui o laço. Quando dois vértices estiverem ligados por mais de uma aresta, dizemos que o par de vértices adjacentes possui **arestas múltiplas**. Dizemos que um grafo é **simples** quando ele não possui laço e arestas múltiplas.

**Exemplo 1.1** *No grafo abaixo,  $E(G_1) = (e_1, e_2, e_3, e_4)$  e  $V(G) = (v_1, v_2, v_3, v_4)$ . Como podemos ver, qualquer par de vértices possui apenas uma aresta incidente, e assim temos um grafo simples.*



Um vértice de grau 0 é dito **isolado**; um vértice de grau 1 é dito **pendente**. A sequência de graus de um grafo é dada de forma decrescente. Por exemplo, seja um grafo  $G$  aleatório e sua sequência de graus é dada por  $(4, 3, 3, 3, 2, 2, 1)$ . O menor grau de um vértice em  $G$  é o **grau mínimo**, e denotaremos por  $\delta$ , e o maior é o **grau máximo**, denotado por  $\Delta$ . No nosso caso temos  $\Delta = 4$  e  $\delta = 1$ .

**Teorema 1.1** *A soma dos graus de um grafo é igual ao dobro do número de arestas.*

$$\sum_{v \in V(G)} d(v) = 2.m$$

Isto se dá pelo fato de contarmos as arestas duas vezes nos vértices em que ela incide, como se uma extremidade fosse a saída e conseqüentemente a outra extremidade a chegada.

**Corolário 1.1** *Todo grafo  $G$  possui um número par de vértices ímpares.*

**Demonstração:** A prova do nosso resultado se dá por contradição ao primeiro. Seja  $n$  o número de vértices de  $G$  com grau ímpar. Assuma, agora, que  $n$  seja ímpar. Segue que o somatório dos graus dos vértices de  $G$  é ímpar o que contradiz o nosso primeiro resultado. Logo, o número de vértices de grau ímpar de  $G$  é sempre par. ■

Outra definição importante na teoria dos grafos é o conceito de vizinhança, a qual podemos classificar de duas formas: **vizinhança fechada** e **vizinha aberta**. O conjunto de vértices adjacentes a um vértice  $v$  qualquer é chamado vizinhança aberta de  $v$ , e denotaremos por  $N(v)$ . A vizinhança fechada consiste na união da vizinhança aberta de  $v$  com o próprio vértice  $v$ , e é denotada por  $N[v] = N(v) \cup \{v\}$ .

## 1.2 Ciclos, Caminhos e conexidade

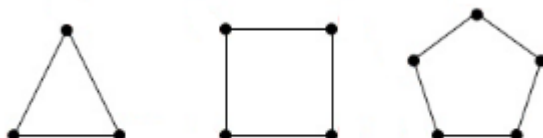
Uma sequência finita  $v_0, v_1, \dots, v_n$  de vértices de um grafo  $G$  é dita uma **cadeia** de  $v_0$  a  $v_n$  quando quaisquer dois vértices consecutivos dessa sequência são adjacentes.

Um **ciclo** é um grafo  $G$  de cadeia fechada onde o conjunto  $V(G)$  é formado por uma sequência finita  $v_0, v_1, v_2, v_3, \dots, v_n$ , em que todos eles são adjacentes a outros dois vértices, ou seja, um grafo onde todos os vértices  $d_v = 2$  e  $v_0 = v_n$ . Denotaremos os ciclos por  $C_n$ .



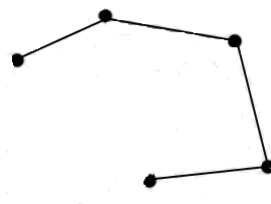
**Observação 1.1** Para obtermos um ciclo, obrigatoriamente o número de vértices deve ser igual ou maior do que três.

Os exemplos a seguir mostram os ciclos  $C_3$ ,  $C_4$  e  $C_5$  respectivamente:



Um **caminho** é um ciclo do qual retiramos uma aresta. O comprimento do caminho é dado pelo número de arestas da cadeia. Assim, o caminho que denotaremos por  $P_n$ , pode ser obtido retirando uma aresta do ciclo  $C_{n+1}$ .

O exemplo a seguir mostrar  $P_4$ , que pode ter sido tirado do ciclo  $C_5$ .



Se todas as arestas que percorremos em  $G$  são distintas, temos uma **trilha**; se  $v_0 = v_n$  então esse passeio é uma **trilha fechada**. Se, além das arestas, todos os vértices são distintos então temos novamente um caminho (que pode ser uma forma alternativa de definirmos o conceito de caminho) e se  $v_0 = v_n$  temos um ciclo (como visto anteriormente).

Tratando-se da conexidade dos grafos, dizemos que  $G$  é **conexo** se existe um caminho entre dois vértices  $v_i$  e  $v_j$  quaisquer de  $G$ . Caso contrário, dizemos que  $G$  é **desconexo**.

### 1.3 Passeio de Euler

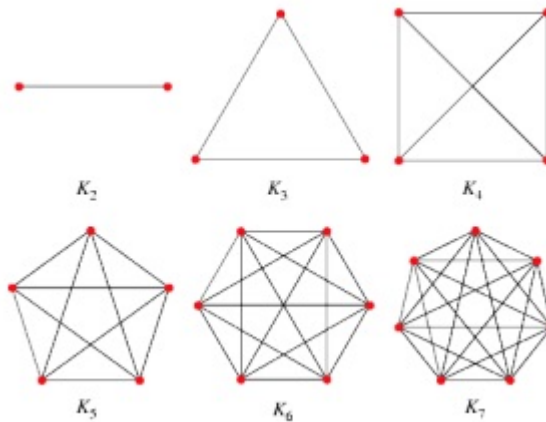
Dizemos que um grafo admite um **passeio de Euler** se existe, nesse grafo, uma trilha, do qual fazem parte todas as arestas do grafo. Isto significa que podemos passear pelas arestas do grafo, percorrendo todas elas, passando somente uma vez através de cada uma, independente da quantidade de vezes que passamos por um mesmo vértice. Se isso é possível, denominamos  $G$  um **grafo euleriano**.

Se o grafo não é euleriano mas possui uma trilha aberta de comprimento  $n$ , então ele é dito **semieuleriano**.

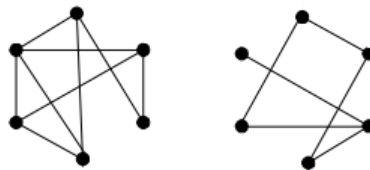
## 1.4 Tipos Especiais de Grafos

Abordaremos nesta seção alguns tipos especiais de grafos para que mais tarde possamos mostrar algumas aplicações dos mesmos.

- **Grafo Completo:** Um grafo completo é um grafo onde todo par de vértices é ligado por uma aresta. Logo o número de arestas de um grafo completo pode ser dado por:  $\frac{n(n-1)}{2}$ , onde  $n$  é nosso número de vértices. Um grafo completo com  $n$  vértices é denotado por  $K_n$ . Veja os exemplos abaixo de grafos completos.

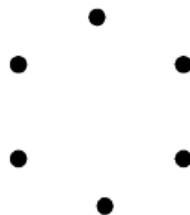


- **Grafo complementar:** Denominamos como grafo complementar simples, denotado por  $\overline{G}$ , como o grafo que possui o mesmo conjunto de vértices de  $G$ , ou seja,  $V(G) = V(\overline{G})$  tal que dois vértices distintos são adjacentes em  $\overline{G}$  e não são em  $G$ . Vejamos um exemplo de um grafo  $G$  e seu grafo complementar.

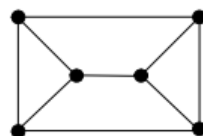


Note que um grafo é complementar ao outro, portanto, se definirmos um como sendo  $G$ , o outro é  $\overline{G}$ . Além disso  $A(G) \cup A(\overline{G})$  geram todas as possíveis arestas de  $G$ , ou seja, um grafo completo.

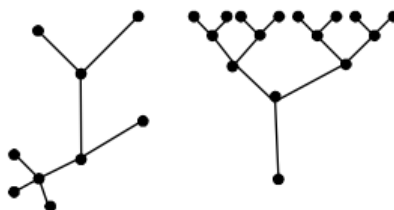
- **Grafo nulo:** Um grafo  $G$  é nulo ou vazio quando o conjunto de arestas  $A(G)$  é vazio,  $A(G) = \emptyset$ . Daí temos que esse grafo é representado apenas pelo conjunto de vértices  $V(G)$ . Veja o exemplo a seguir.



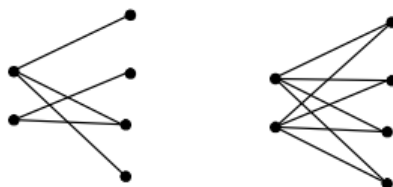
- **Grafo regular:** Um grafo  $G$  é dito regular (de grau  $k$ , ou  $k$ -regular) quando todos os seus vértices têm o mesmo grau  $k$ . Um ciclo, por exemplo, é um grafo regular de grau 2. A imagem abaixo mostra outro exemplo, porém um grafo 3-regular, isto é, todos os vértices tem grau 3.



- **Árvores:** É dito uma árvore todos os grafos conexos sem ciclos como subgrafos. Isso torna as árvores a maneira mais econômica de conectar os vértices.



- **Grafo bipartido:** É dito bipartido um grafo  $G$  em que o conjunto  $V$  de vértices pode ser particionado em dois subconjuntos disjuntos  $V_1$  e  $V_2$  tal que toda aresta de  $G$  tem uma extremidade em  $V_1$  e outra em  $V_2$ . O subconjunto  $V_1$  é dito um subconjunto independente de vértices do grafo  $G$  pois não há arestas ligando dois vértices de  $V_1$ . Temos também que  $V_2$  é um subconjunto independente de vértices de  $G$ . Além disso, se todo vértice contido em  $V_1$  for adjacente a todos de  $V_2$ , o grafo é dito **bipartido completo**. O exemplo a seguir nos mostra as duas situações.



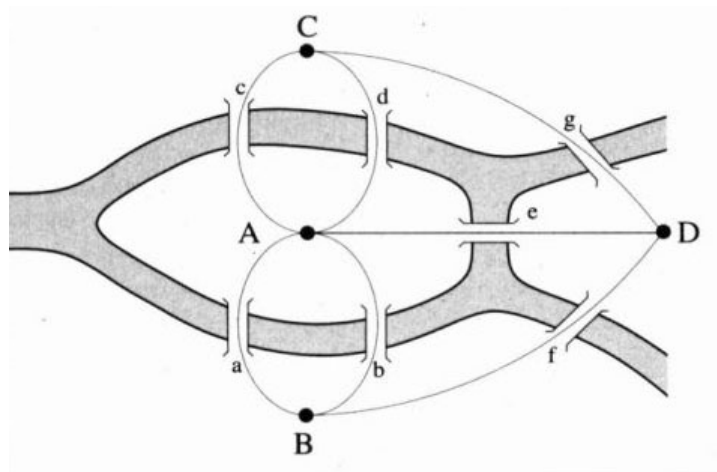
## 1.5 Euler e as Pontes de Königsberg

### 1.5.1 Introdução

Cerca de dois séculos e meio se passaram desde que a ideia dos grafos surgiu associado a vários problemas, suscitados por diversas situações ou aplicações variadas em muitos campos de pesquisa. Uma apresentação histórica resumida pode, então, mostrar como se pode construir um modelo de um grafo. O exemplo que trataremos é bastante simples e nos ajudou inicialmente no uso dos recursos da teoria.

Considerado o marco fundador da *Teoria dos grafos*, o famoso problema das pontes de Koenigsberg teve origem em 1736 na antiga Prússia Oriental - *Koenigsberg* -, atual Kaliningrado, situada em uma pequena porção da Rússia, entre a Polônia e a Lituânia. Nesse ano, *Leonard Euler*, matemático e geômetra da época, visitou a referida cidade, local de moradia de diversos intelectuais conhecidos. Logo podemos imaginar que Euler tenha se sentido atraído pelo ambiente, que deveria ser movimentado pelo fato de Koenigsberg pertencer a poderosa Liga Hanseática de comércio marítimo.

O fato é que ele, ao chegar na cidade, se deparou com um problema que vinha sendo discutido pelos intelectuais da cidade e que, embora parecesse simples, ainda não havia sido resolvido. No Pregel, rio que corta a cidade, haviam duas ilhas que, na época, eram conectadas entre si por uma ponte. As duas ilhas se ligavam ainda às margens por meio de seis pontes. O impasse consistia em encontrar o percurso para um passeio que partisse de um ponto dado, percorresse todas as pontes retornando ao ponto de partida. O problema pode ser modelado através da estrutura de um grafo, como segue abaixo.



Este esquema é uma representação gráfica do que, hoje em dia, se chama um *modelo de grafo*.

### 1.5.2 Elementos Matemáticos

Leonard Euler observou que o número de passagens de uma margem para a ilha era sempre ímpar (onde cada ponte é representada pelas arestas e cada margem, ou ilha, representada pelos vértices), isso indica que se pode passar, mas em algum momento não seria possível retornar sem repetir uma das passagens. Então, ele provou que para o passeio desejado pelos intelectuais de Königsberg ser possível, cada massa de terra deveria se ligar à outra por um número par de pontes. Como consequência da resolução do problema, teoremas e alguns conceitos foram desenvolvidos.

**Teorema 1.2** *Se um grafo admite um passeio de Euler, começando e terminando em um mesmo vértice, então todo vértice desse grafo tem grau par. Portanto, o grafo é **euleriano**.*

**Demonstração:** Considere um vértice qualquer do grafo, digamos  $A$ , e suponhamos que ele é um vértice intermediário (nem final e nem inicial) do passeio. Então, cada vez que chegamos em  $A$ , por meio de uma aresta do passeio, partimos de  $A$  logo em seguida e, assim, contadas as chegadas e partidas, teremos um número par de extremidades de arestas apoiando-se em  $A$ . Suponhamos agora que  $B$  é o vértice inicial e final do passeio. Então, calculando o grau de  $B$ , contamos um (uma extremidade de aresta) na partida, mais um na chegada e somamos dois (duas extremidades) cada vez que passamos por  $B$  (podemos ao longo do passeio, passar diversas vezes por  $B$ ). Logo,  $B$  também é um vértice par. ■

**Teorema 1.3** *Se um grafo conexo tem seus vértices todos pares, então ele admite um passeio de Euler. Além disso, esse passeio pode começar e terminar em qualquer vértice previamente escolhido.*

**Demonstração:** Consideremos um grafo em que cada um dos vértices tenha grau par. Tomemos nele um vértice  $A_0$ . Seja  $a_1$  uma aresta saindo de  $A_0$  e chegando em  $A_1$ . Se  $A_1 = A_0$ , paramos por aqui. Se  $A_1 \neq A_0$  e  $A_1$  é um vértice par, então existe uma aresta  $a_2$  saindo de  $A_1$  e chegando em  $A_2$ ,  $a_2 \neq a_1$ . Se  $A_2 = A_0$ , paramos por aqui. Se  $A_2 \neq A_0$ , prosseguimos. Existe uma aresta  $a_3$  saindo de  $A_2$  e chegando em  $A_3$ , sendo  $a_3 \neq a_0$  e  $a_3 \neq a_1$ . Assim prosseguindo, construímos uma sequência de arcos  $a_1, a_2, a_3$ , etc. até que não nos seja mais possível continuar, ou seja, até que cheguemos num vértice  $A_n$ , do qual não tenhamos mais saída. Deveremos ter, então,  $A_n = A_0$ , pois caso contrário, chegaremos no vértice  $A_n$  sem poder sair dele, após termos passado por ele (chegando e saindo) certo número de vezes e então  $A_n$  será um vértice de grau ímpar. Assim, o caminho  $a_1, \dots, a_n$  é um caminho fechado que se inicia e termina em  $A_0$ . Se esse caminho contém todas as arestas do grafo, então o nosso *passeio de Euler* está pronto. Se esse caminho não contém todas as arestas do grafo, então, como o grafo é conexo, de algum dos vértices  $A_0, \dots, A_{n-1}$ , digamos de um vértice  $A_s$ , parte um arco  $b_1$  do grafo estando  $b_1$  fora do caminho  $a_1, \dots, a_n$ . O arco  $b_1$  sai de  $B_0 = A_s$  chegando a  $B_1$ . Se  $B_1 \neq B_0$ , existe uma aresta  $b_2$ , fora do caminho  $a_1, \dots, a_n$ , saindo de  $B_1$  e chegando em  $B_2$ . Repetindo o procedimento anterior usado para construir o caminho fechado  $a_1, \dots, a_n$ , construímos um caminho fechado  $b_1, \dots, b_m$ , sendo  $B_0 = A_s$ , o ponto de

partida e chegada, com os arcos  $b_1, \dots, b_m$  todos fora do caminho  $a_1, \dots, a_n$ . Inserimos então o caminho  $b_1, \dots, b_m$  no caminho  $a_1, \dots, a_n$  por meio do vértice  $A_s$ , obtendo um caminho fechado aumentado,  $a_1, \dots, a_s, b_1, \dots, b_m, a_{s+1}, \dots, a_n$ . Se este caminho for um passeio de Euler através de todo grafo está concluído todo o teorema. Se não for novas ampliações, por novas inserções de caminhos, por meio de vértices dos caminhos fechados anteriormente construídos, acabarão por esgotar todas as arestas do grafo, provendo-nos um passeio de Euler pelo grafo. ■

**Teorema 1.4** *Se um grafo admite um passeio de Euler começando em um vértice e terminando em outro, então os vértices final e inicial do passeio são ímpares e todos os demais vértices do grafo tem grau par. Portanto, o grafo é **semi-euleriano**.*

**Demonstração:** Se um vértice  $B$  não for o fim nem o início do passeio então toda vez que chegamos a ele, no passeio, partimos em seguida e, assim, haverá um número par de arestas apoiando-se nele. Se  $C$  é o vértice inicial do passeio então, ao calcular seu grau, contamos um quando partimos de  $C$  e somamos dois cada vez que passamos por  $C$ . Assim,  $C$  é um vértice ímpar. Da mesma forma, para o vértice  $D$ , final do passeio, somamos dois cada vez que passamos por ele e mais um na chegada, sendo  $D$ , portanto, também um vértice ímpar. Assim, os vértices final e inicial são ímpares e todos os demais vértices são pares. ■

**Teorema 1.5** *Se um grafo conexo tem dois vértices ímpares e os demais todos pares, então ele admite um passeio de Euler. Esse passeio deve começar em um dos vértices ímpares e terminar no outro.*

**Demonstração:** Chame de  $A$  e  $B$  os dois vértices ímpares do grafo. Amplie o grafo criando uma nova aresta  $a$  de vértices  $A$  e  $B$ . Com a inserção da nova aresta, os vértices  $A$  e  $B$  tornam-se vértices pares. Podemos, então, iniciar um passeio de Euler no novo grafo, partindo de  $B$ , caminhando inicialmente de  $B$  a  $A$  pela aresta  $a$  e terminar o passeio em  $B$ . Concluído o passeio, descartamos a aresta  $a$  e teremos, então, um passeio de Euler, iniciado em  $A$  e finalizado em  $B$ . ■

Em vista dos teoremas vistos anteriormente, fica fácil agora saber quando um grafo admite um passeio de Euler. Igualmente fácil é determinar que o problema das pontes de Königsberg não tem solução, pois tem quatro vértices ímpares.

---

---

# CAPÍTULO 2

---

## ÁLGEBRA DE MATRIZES

### 2.1 Matrizes

Uma matriz  $A$ ,  $m \times n$ , é uma tabela de  $mn$  números dispostos em  $m$  linhas e  $n$  colunas.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Usamos também a notação  $A = (a_{ij})_{m \times n}$ . Dizemos que  $a_{ij}$  é o elemento ou a entrada de posição  $i, j$  da matriz  $A$ .

Se  $m = n$ , dizemos que  $A$  é uma matriz quadrada de ordem  $n$  e os elementos  $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$  formam a **diagonal principal** da matriz. A soma dos elementos da diagonal principal é o que chamamos de **traço** de uma matriz e denotamos por  $tr(A)$ .

Se  $A$  é uma matriz quadrada de ordem  $n$  e a diagonal principal é composta por 1 e todas as demais entradas são nulas, então a matriz é dita **matriz identidade** e denotada por  $I_n$ .

Uma matriz que só possui uma linha é chamada **matriz linha**, e uma matriz que só possui uma coluna é chamada **matriz coluna**.

**Exemplo 2.1**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 5 & 7 \\ 8 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$$

Dizemos que  $A$  é uma matriz  $3 \times 4$  e denotada por  $A_{3 \times 4}$ .

**Exemplo 2.2**

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

Dizemos que  $B$  é uma matriz quadrada, além disso,  $B$  é a matriz identidade de ordem 4, denotada por  $I_4$ .

**Exemplo 2.3**

$$C = ( 1 \ 2 \ 2 \ 1 )$$

A matriz  $C$  é dita uma matriz linha e denotada por  $C_{1 \times 4}$ .

**Exemplo 2.4**

$$D = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 8 \\ 6 \end{pmatrix}$$

A matriz  $D$  é dita uma matriz coluna e denotada por  $D_{4 \times 1}$ .

Dizemos que duas matrizes são iguais se elas têm o mesmo tamanho e os elementos correspondentes são iguais, ou seja,  $A = (a_{ij})_{m \times n}$  e  $B = (b_{ij})_{p \times q}$  são iguais se  $m = p$ ,  $n = q$  e  $a_{ij} = b_{ij}$  para  $i = 1, \dots, m$  e  $j = 1, \dots, n$ .

**Matriz transposta**

A **transposta** de uma matriz  $A = (a_{ij})_{m \times n}$  é definida pela matriz  $n \times m$

$$A^T = B$$

obtida trocando-se as linhas com as colunas, ou seja,  $b_{ij} = a_{ji}$ , para  $i = 1, \dots, n$  e  $j = 1, \dots, m$ . Escrevemos também  $[A^T]_{ij} = a_{ji}$ .



**Exemplo 2.5**

$$A = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & c_0 & d_0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \end{pmatrix}$$

então,

$$B = A^T = \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & a_2 \\ b_0 & b_1 & b_2 \\ c_0 & c_1 & c_2 \\ d_0 & d_1 & d_2 \end{pmatrix}$$

Vale lembrar que para obtermos uma matriz transposta de uma dada matriz  $A$ ,  $A$  não precisa obrigatoriamente ser quadrada.

**Matriz inversa**

Todo número real  $a$ , não nulo, possui um inverso (multiplicativo), ou seja, existe um número  $b$ , tal que  $a \cdot b = b \cdot a = 1$ . Este número é único e o denotamos por  $a^{-1}$ . Apesar da álgebra matricial ser semelhante à álgebra dos números reais, nem todas as matrizes  $A$  não nulas possuem inversa, ou seja, nem sempre existe uma matriz  $B$  tal que  $A \cdot B = B \cdot A = I$ . De início, para que os produtos  $AB$  e  $BA$  estejam definidos e sejam iguais é preciso que as matrizes  $A$  e  $B$  sejam quadradas. Portanto, somente as matrizes quadradas podem ter inversa, o que já diferencia do caso dos números reais, pois todo número não nulo tem inverso. Mesmo entre as matrizes quadradas, muitas não possuem inversa, apesar do conjunto das que não tem inversa ser bem menores do que o conjunto das que tem.

Uma matriz quadrada  $A = (a_{ij})_{n \times n}$  é **invertível**, se existe uma matriz  $B = (b_{ij})_{n \times n}$  tal que

$$AB = BA = I_n,$$

em que  $I_n$  é a matriz identidade de ordem  $n$ . A matriz  $B$  é chamada de inversa de  $A$ . Se  $A$  não tem inversa, dizemos que  $A$  é não invertível.

**Exemplo 2.6**

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

e

$$B = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

A matriz  $B$  é a inversa da matriz  $A$ , pois  $AB = BA = I_2$ .

### Matriz simétrica e antissimétrica

Trazendo a definição de matriz transposta,  $A^T$ , dizemos que uma matriz é simétrica quando  $A = A^T$ . Ou seja, os elementos que ficam em posições equidistantes da diagonal principal são iguais.

$$A = (a_{ij}) \quad \text{tal que} \quad a_{ij} = a_{ji}.$$

#### Exemplo 2.7

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 9 \\ 5 & 3 & 8 \\ 9 & 8 & 7 \end{pmatrix} = A^T$$

**Observação 2.1** O produto de uma matriz quadrada  $A$  com sua transposta  $A^T$ , e a soma de uma matriz quadrada  $A$  com sua transposta, são equivalentes a uma matriz simétrica.

A definição de uma matriz antissimétrica se diferencia da simétrica a par de um sinal. Portanto, uma matriz quadrada  $A$  é antissimétrica se  $A^T = -A$ .

#### Exemplo 2.8

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 4 \\ -3 & 0 & -6 \\ -4 & 6 & 0 \end{pmatrix}$$

Transpondo a matriz  $A$ , note que  $A^T = -A$ ;

$$A^T = \begin{pmatrix} 0 & -3 & -4 \\ 3 & 0 & 6 \\ 4 & -6 & 0 \end{pmatrix} = -A$$

**Observação 2.2** A diferença  $B = A - A^T$  entre uma matriz quadrada  $A$  e a sua transposta  $A^T$  é uma matriz antissimétrica.

### Potência de matrizes

A potenciação de matrizes é análoga à potenciação de números reais, em que:

$$A^4 = A \times A \times A \times A.$$

A operação de base é a multiplicação. No entanto, é preciso ter alguns cuidados e considerações. Primeiramente, a matriz deve ser quadrada. Essa restrição é uma consequência da definição do produto de matrizes em que o número de colunas de  $A$  deve ser igual ao número de linhas de  $B$ .

**Exemplo 2.9** Sendo assim, suponha que desejamos calcular  $A^2$ .

$$A^2 = A_{n \times p} \cdot A_{n \times p}.$$

Pela definição do produto de matrizes, a seguinte condição é necessária:  $n = p$ . Logo,

$$A^2 = A_{n \times n} \cdot A_{n \times n}.$$

Ou seja,  $A$  deve ser uma matriz quadrada, senão o produto é impossível. Obviamente, isso é válido para qualquer expoente.

Outra sutileza é o expoente zero. Um número (diferente de zero) elevado a zero é igual a 1, que é justamente o elemento neutro da multiplicação. O elemento neutro da multiplicação de matrizes é a matriz identidade:

$$AI = IA = A$$

$$A^0 = I.$$

**Observação 2.3** Note que estamos lidando apenas com expoentes inteiros positivos. A potência de matrizes para expoentes não inteiros é mais complexa e não nos interessa nesse trabalho.

### Determinante de uma matriz

Inicialmente iremos definir o determinante de matrizes  $1 \times 1$ . Para cada matriz  $A = [a]$  definimos o determinante de  $A$ , indicado por  $\det(A)$ , por  $\det(A) = a$ .

Vamos, agora, expandir a idéia para o determinante de matrizes  $2 \times 2$  e em seguida definir para matrizes de ordem maior. A cada matriz  $A$ ,  $2 \times 2$ , associamos um número real, denominado determinante de  $A$ , por:

$$\det(A) = \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}$$

Para definir o determinante de matrizes quadradas maiores, precisamos definir o que são os menores de uma matriz. Dada uma matriz  $A = (a_{ij})_{n \times n}$ , o menor do elemento  $a_{ij}$ , denotado por  $\hat{A}_{ij}$ , é a submatriz  $(n-1) \times (n-1)$  de  $A$  obtida eliminando-se a  $i$ -ésima linha e a  $j$ -ésima coluna de  $A$ .

**Exemplo 2.10** Para uma matriz  $A = (a_{ij})_{3 \times 3}$ ,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad \text{então} \quad \hat{A}_{23} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{pmatrix}$$

Agora, vamos definir os cofatores de uma matriz quadrada  $A = (a_{ij})_{3 \times 3}$ . O cofator do elemento  $a_{ij}$ , denotado por  $\hat{a}_{ij}$ , é definido por

$$\hat{a}_{ij} = (-1)^{i+j} \det(\hat{A}_{ij}),$$

ou seja, o cofator  $\hat{a}_{ij}$ , do elemento  $a_{ij}$  é igual à mais ou menos o determinante do menor  $\hat{A}_{ij}$ , sendo o mais e o menos determinados pela seguinte disposição:

$$\begin{pmatrix} + & - & + \\ - & + & - \\ + & - & + \end{pmatrix}$$

**Exemplo 2.11** Para uma matriz  $A = (a_{ij})_{3 \times 3}$ ,

$$\hat{a}_{23} = (-1)^{2+3} \det(\hat{A}_{23}) = -\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{pmatrix} = a_{31}a_{12} - a_{11}a_{32}.$$

Da mesma forma que definimos o cofator para matrizes  $3 \times 3$  usando o determinante de matrizes  $2 \times 2$ , podemos definir o cofator para matrizes  $n \times n$  supondo que sabemos como calcular o determinante de matrizes  $(n-1) \times (n-1)$ . Para isso, vamos estender a definição de cofatores para matrizes quadradas  $A = (a_{ij})_{n \times n}$ . O cofator do elemento  $a_{ij}$ , denotado por  $\hat{a}_{ij}$ , é definido por:

$$\hat{a}_{ij} = (-1)^{i+j} \det(\hat{A}_{ij}),$$

ou seja, o cofator  $\hat{a}_{ij}$ , do elemento  $a_{ij}$  é igual à mais ou menos o determinante do menor  $\hat{A}_{ij}$ , sendo o mais e o menos determinados pela seguinte disposição:

$$\begin{pmatrix} + & - & + & - & \dots & \dots \\ - & + & - & + & \dots & \dots \\ + & - & + & - & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Daí definimos o determinante de  $A$ , onde  $A$  é uma matriz  $n \times n$  por:

$$\det(A) = a_{11}\hat{a}_{11} + a_{12}\hat{a}_{12} + \dots + a_{1n}\hat{a}_{1n} = \sum_{j=1}^n a_{1j}\hat{a}_{1j},$$

em que  $\hat{a}_{1j} = (-1)^{1+j} \det(\hat{A}_{1j})$  é o cofator do elemento  $a_{1j}$ . Além disso, o determinante de  $A$  pode ser calculado fazendo-se o desenvolvimento em cofatores segundo qualquer linha ou qualquer coluna, daí temos a expressão determinada como **expansão em cofatores** do determinante de  $A$  em termos da  **$i$ -ésima linha** ou  **$i$ -ésima coluna**, como é mostrado a seguir:

$$\det(A) = a_{i1}\hat{a}_{i1} + a_{i2}\hat{a}_{i2} + \dots + a_{in}\hat{a}_{in} = \sum_{j=1}^n a_{ij}\hat{a}_{ij}, \text{ para } i = 1, \dots, n$$

$$\det(A) = a_{1j}\hat{a}_{1j} + a_{2j}\hat{a}_{2j} + \dots + a_{nj}\hat{a}_{nj} = \sum_{i=1}^n a_{ij}\hat{a}_{ij}, \text{ para } j = 1, \dots, n.$$

em que  $\hat{a}_{ij} = (-1)^{i+j} \det(\hat{A}_{ij})$  é o cofator do elemento  $a_{ij}$ .

## 2.2 Diagonalização

### Autovalores e autovetores

**Definição 2.1** Dizemos que uma matriz  $A$ ,  $n \times n$ , é diagonalizável, se existem matrizes  $P$  e  $D$  tais que  $A = PDP^{-1}$ , ou equivalentemente,  $D = P^{-1}AP$ , em que  $D$  é uma matriz diagonal.

**Exemplo 2.12** Toda matriz diagonal

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

é diagonalizável, pois

$$A = (I_n)^{-1}AI_n.$$

Vamos supor inicialmente que a matriz  $A$  seja diagonalizável. Então existe uma matriz  $P$  tal que

$$P^{-1}AP = D,$$

em que  $D$  é uma matriz diagonal. Vamos procurar tirar conclusões sobre as matrizes  $P$  e  $D$ . Multiplicando à esquerda por  $P$  ambos os membros da equação anterior, obtemos

$$AP = PD.$$

Sejam

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \text{ e } P = (V_1 \ V_2 \ \dots \ V_n),$$

em que  $V_j$  é a coluna  $j$  de  $P$ . Por um lado

$$AP = A(V_1 \ V_2 \ \dots \ V_n) = (AV_1 \ AV_2 \ \dots \ AV_n),$$

e por outro lado

$$PD = ( V_1 \ V_2 \ \dots \ V_n ) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} = ( \lambda_1 V_1 \ \lambda_2 V_2 \ \dots \ \lambda_n V_n )$$

Assim,  $AP = PD$  pode ser reescrita como,

$$( AV_1 \ AV_2 \ \dots \ AV_n ) = ( \lambda_1 V_1 \ \lambda_2 V_2 \ \dots \ \lambda_n V_n ).$$

Logo,

$$AV_j = \lambda_j V_j,$$

para  $j = 1, \dots, n$ . Ou seja, as colunas de  $P$ ,  $V_j$ , e os elementos da diagonal de  $D$ ,  $\lambda_j$ , satisfazem a equação

$$AX = \lambda X,$$

em que  $\lambda$  e  $X$  são incógnitas.

**Definição 2.2** *Seja  $A$  uma matriz  $n \times n$ . Um número real  $\lambda$  é chamado **autovalor** (real)*

*de  $A$ , se existe um vetor não nulo  $V = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{pmatrix}$  de  $\mathbb{R}^n$ , tal que*

$$AV = \lambda V.$$

*Um vetor não nulo que satisfaça essa equação é chamado **autovetor** de  $A$ .*

**Observação 2.4** *Como os autovetores são vetores não nulos, os autovalores são os valores de  $\lambda$ , para os quais o sistema  $(A - \lambda I_n)X = 0$  tem solução não trivial. Mas, este sistema homogêneo tem solução não trivial se, e somente se,  $\det(A - \lambda I_n) = 0$ . Assim, temos um método para encontrar os autovalores e os autovetores de uma matriz  $A$ .*

**Proposição 2.1** *Seja  $A$  uma matriz  $n \times n$ .*

*i) Os autovalores (reais) de  $A$  são as raízes reais do polinômio*

$$p(x) = \det(A - xI_n)$$

*ii) Para cada autovalor  $\lambda$ , os autovetores associados a  $\lambda$  são os vetores não nulos da solução do sistema*

$$(A - \lambda I_n)X = 0.$$

**Definição 2.3** *Seja  $A$  uma matriz  $n \times n$ . O polinômio*

$$p(x) = \det(A - xI_n)$$

*é chamado de **polinômio característico** de  $A$ .*

Para cada autovalor  $\lambda$ , o conjunto dos autovetores associados a ele acrescentado o vetor nulo é o conjunto solução do sistema linear homogêneo  $(A - \lambda I_n)X = 0$  e é chamado de **autoespaço** associado ao autovalor  $\lambda$ .

### 2.2.1 Diagonalização de Matrizes Simétricas

Considere o problema da identificação de uma cônica (curva no plano descrita por uma equação de segundo grau em  $x$  e  $y$ ) através da sua equação que facilmente é resolvido se a equação não possui um termo em que aparece o produto  $xy$ . Mas, ao contrário, se aparece este termo misto, temos que fazer uma mudança de coordenadas de forma que nas novas coordenadas ele não apareça. Vejamos o exemplo seguinte.

**Exemplo 2.13** *Considere o problema de identificar uma cônica representada pela equação*

$$3x^2 + 2xy + 3y^2 = 4.$$

*Usando matrizes, esta equação pode ser escrita como*

$$\begin{pmatrix} 3x + y & x + 3y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 4$$

*ou*

$$\begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 4$$

*ou ainda,*

$$X^t A X = 4,$$

*em que*

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

*Como vimos anteriormente, podemos escrever a equação como*

$$A = PDP^{-1}$$

*em que*

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \text{ e } D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Assim, podemos reescrever a equação como

$$(X^{-1}P)D(P^{-1}X) = (P^{-1}X)^{-1}D(P^{-1}X) = 4$$

Se fazemos a mudança de variáveis (ou de coordenadas)  $X = PX'$ , então como  $P^{-1}P = I_2$ , a equação se transforma em

$$(X')^{-1}DX' = 4$$

ou

$$\begin{pmatrix} x' & y' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 4$$

que pode ser escrita como,

$$2x'^2 + 4y'^2 = 4,$$

que é uma equação da elipse.

A matriz  $P$  tem a propriedade de que a sua inversa é simplesmente a sua transposta,  $P^{-1} = P^T$ . Uma matriz que satisfaz esta propriedade é chamada de **matriz ortogonal**. O que possibilitou a identificação da cônica, no exemplo anterior, foi o fato de que a matriz  $A$  é diagonalizável através de uma matriz ortogonal  $P$ . Ou seja, existe uma matriz  $P$  tal que  $A = PDP^{-1}$  e  $P^{-1} = P^T$ .

Sabemos que nem toda matriz é diagonalizável, entretanto, se uma matriz  $A$  é simétrica, então ela é diagonalizável, isto é, existe uma matriz diagonal  $D$  e uma matriz invertível  $P$  tal que  $A = PDP^{-1}$ . Além disso, para matrizes simétricas, existe uma matriz  $P$  tal que  $A = PDP^T$ . Isto porque existe uma matriz ortogonal  $P$  que faz a diagonalização, ou seja, que tem a propriedade  $P^{-1} = P^T$ . Em algumas aplicações a diagonalização com uma tal matriz é necessária, como por exemplo na identificação de cônicas.



---

---

# CAPÍTULO 3

---

## INTRODUÇÃO À TEORIA ESPECTRAL DOS GRAFOS

### 3.1 Matriz de Adjacência

**Definição 3.1** *Seja  $G$  um grafo de  $n$  vértices e  $E = E(G)$ ,  $V = V(G)$  os respectivos conjuntos de arestas e vértices de  $G$ . A **matriz de adjacência**  $A(G)$  do grafo  $G$  é uma matriz quadrada de ordem  $n$  cujas as entradas são definidas por:*

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } (v_i, v_j) \in E, v_i, v_j \in V; \\ 0, & \text{para qualquer outro caso.} \end{cases}$$

Logo,  $A(G)$  é uma matriz real e simétrica, formada por uns e zero. O traço dessa matriz é igual a zero pois não nos importa os grafos com laços nesse estudo.

O **polinômio característico do grafo** de  $G$  é determinado através da matriz  $A(G)$  e denotado por  $p_G$ , onde  $\lambda$  é dito **autovalor do grafo**  $G$  uma vez que  $\lambda$  zera  $p_G$ . Se  $A(G)$  possui os autovalores distintos, o **espectro do grafo**  $G$ , denotado por  $spectG$ , é definido por uma matriz  $2 \times s$ , onde a primeira linha é composta pelos autovalores de  $A(G)$  dispostos em ordem decrescente e a segunda por suas respectivas multiplicidade algébrica. Assim, se  $\lambda_1 > \dots > \lambda_s$  são autovalores distintos de  $A(G)$  e para  $1 \leq i \leq s$ ,  $m_A(\lambda_i)$  são as suas multiplicidades algébricas então o espectro é dado da forma:

$$spectG = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & \lambda_s \\ m_A(\lambda_1) & \dots & m_A(\lambda_s) \end{bmatrix}$$

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

A proposição a seguir é nosso primeiro exemplo de como as propriedades dos grafos são refletidas pelas propriedades algébricas de matrizes associadas a eles.

**Proposição 3.1** : *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)  $a_2 = -m$ ; onde  $m$  é o número de arestas.*
- iii)  $a_3 = -2t$ , onde  $t$  é o número de triângulos no grafo.*

**Demonstração:** Da teoria de matrizes temos que, para cada  $i$ ,  $1 \leq i \leq s$ ,  $(-1)^i a_i =$  soma dos menores principais de  $A(G)$  que tem  $i$ -linhas e  $i$ -colunas. O **menor principal** de  $A(G)$  é o determinante de qualquer submatriz de  $A(G)$  obtida pela retirada de um subconjunto de  $n - i$  linhas e do correspondente subconjunto de colunas.

- i) Daí, como o traço de qualquer  $A(G) = 0$ , temos que  $a_1 = 0$ ;
- ii) Note que qualquer menor principal com duas linhas e duas colunas com entradas não-nulas é da forma:

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

Portanto, para cada par de vértices adjacentes temos um único menor principal e cada um deles vale -1, então temos que:

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

Logo,

$$-a_2 = m, \text{ onde } m \text{ é o número de arestas.}$$

- iii) Para os menores principais com 3-linhas e 3-colunas com entradas não todas nulas, temos 3 possibilidades:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

dentre os 3, o único não-nulo é o terceiro cujo valor é igual a 2 e corresponde a vértices mutuamente adjacentes, ou seja, um triângulo. Logo

$$(-1)^3 a_3 = 2 \times t, \text{ onde } t \text{ é o número de triângulos do grafo } G.$$

Portanto,

$$a_3 = -2t$$

■

**Proposição 3.2** *O número de cadeias de comprimento  $l$  ligando os vértices  $v_i$  ao vértice  $v_j$  em um dado grafo  $G$ , é equivalente a entrada de ordem  $i \times j$  da matriz  $A^l$ , onde  $A$  é a matriz de adjacência do grafo  $G$ .*

**Demonstração:** : (Por indução em  $l$ ) Temos que para  $l = 1$  o resultado é verdadeiro pois  $A^1 = A$ . Suponhamos agora que o resultado seja 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  $v_i$  ao vértice  $v_h$  adjacente a  $v_j$ . Assim, o número de 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 então que o número de cadeias de comprimento  $L + 1$  ligando  $v_i$  a  $v_j$  é dado pela entrada de ordem  $i \times j$  da matriz  $(A^{L+1})_{ij}$ . O resultado segue por indução.

■

Podemos observar que a relação entre o número de cadeias fechadas de um grafo e as somas de potências de seus autovalores é dado pelo resultado acima. De fato, seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas. Pela proposição anterior o número total de cadeias fechadas de comprimento  $l$  em  $G$  é o traço de  $A^l$ . Como o traço de uma matriz diagonalizável é a soma de seus autovalores temos que:

número total de cadeias fechadas de comprimento  $l = \sum \lambda_i^l$

Em particular:

- i) A soma dos autovalores de  $G$  é zero pois  $tr(A) = 0$ ;
- ii) A soma dos quadrados dos autovalores é duas vezes o número de arestas, ou seja,  $tr(A^2) = 2m$ ; e portanto, se o grafo  $G$  for regular de grau  $k$  então  $\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = kn$ , uma vez que  $kn = 2m$ ;
- iii) A soma dos cubos dos autovalores é seis vezes o número de triângulos do grafo, ou seja,  $tr(A^3) = 6t$ .

Vemos então que o espectro de um grafo pode determinar o número de vértices, de arestas e de triângulos. No entanto, este fato não pode ser generalizado, pois nem sempre os ciclos de comprimento  $r$  (com  $r \geq 4$ ) são determinados em função de  $tr(A^r)$ .

**Proposição 3.3 :** *Seja  $G$  um grafo regular de grau  $k$ . Então:*

- i)  $k$  é autovalor de  $G$ .
- ii)  $G$  é 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  $v$  o vetor  $[1, 1, \dots, 1]$ . Como a soma das entradas de cada linha da matriz de adjacência  $A$  de  $G$  é  $k$ , o grau do vértice, temos que  $Av = kv$ , ou seja,  $k$  é autovalor de  $G$ .
- ii) Lembramos que um autovalor tem multiplicidade 1 se ele aparece como raiz de um fator de grau um no polinômio característico. Equivalentemente, se o espaço gerado pelos autovetores associados a este autovalor tem dimensão 1. Vamos mostrar esse último caso, isto é, qualquer autovetor associado ao autovalor  $k$  é múltiplo de um mesmo vetor.  
 $(\Rightarrow) G$  é conexo.  $\rightarrow$  Multiplicidade de  $k$  é 1.  
 Seja  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  um autovetor associado a  $k$ , isto é,

$$Ax = kx.$$

Seja  $x_s$  a entrada de maior valor absoluto em  $x$ , ou seja,

$$\max|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n| = |x_s|$$

Daí, para todo  $i$ ,  $|x_s| \geq |x_i|$ . Então,

$$k \cdot x_s = (Ax)_s = a_{s1} \cdot x_1 + a_{s2} \cdot x_2 + \dots + a_{sn} \cdot x_n$$

Daí

$$\begin{aligned} |x_s| + (k-1)|x_s| &= k|x_s| = |a_{s1}x_1 + a_{s2}x_2 + \dots + a_{sn}x_n| \\ &\leq |a_{s1}x_1| + |a_{s2}x_2| + \dots + |a_{sn}x_n| \\ &= a_{s1}|x_1| + a_{s2}|x_2| + \dots + a_{sn}|x_n| \\ &= a_{s1}|x_1| + a_{s2}|x_2| + \dots + a_{sr}|x_r| + \dots + a_{sn}|x_n| \\ &\leq a_{s1}|x_s| + a_{s2}|x_s| + \dots + a_{sr}|x_r| + \dots + a_{sn}|x_s| \\ &= a_{sr}|x_r| + (k - a_{sr})|x_s| \\ &= \begin{cases} |x_r| + (k-1)|x_s|, & \text{se } v_r \text{ adjacente a } v_s. \\ k|x_s|, & \text{para outro caso.} \end{cases} \end{aligned}$$

Se  $v_r$  adjacente a  $v_s$  chegamos em

$$|x_s| + (k-1)|x_s| \leq |x_r| + (k-1)|x_s| \rightarrow |x_s| \leq |x_r|$$

Mas já tínhamos  $|x_s| \geq |x_i| \quad \forall \quad i$ . Logo

$$|x_s| = |x_r|$$

Por hipótese,  $G$  é conexo, logo todos os vértices são ligados por um caminho. Neste caso, usando esse caminho todos os  $|x_i|$  são iguais a  $|x_s|$  que não é zero.

Supondo, sem perda de generalidade, que  $x_1 > 0$ , temos,

$$kx_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n$$

Como em cada linha de  $A$  só há  $k$  entradas de valor 1, então  $x_i$  é positiva sempre que  $v_i$  é adjacente a  $v_1$ .

Seguindo esse argumento e podendo comparar dois a dois vértices adjacentes, temos que todas as entradas são positivas, pois  $G$  é conexo. Daí,  $x = x_s \cdot (1, 1, \dots, 1)^T$ , logo todos os autovetores associados a  $k$  são gerados por  $(1, 1, \dots, 1)$ . Como queríamos mostrar.

( $\Leftarrow$ ) Multiplicidade de  $k$  é 1.  $\rightarrow G$  é conexo.

Se  $G$  não fosse conexo,  $G = \bigcup_{i=1}^r G_i$ , onde  $G_i$  seriam as componentes conexas de  $G$  e todas seriam  $k$ -regular. Logo  $k$  é autovalor de cada  $G_i$ . Mas  $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) \cdot p_{G_2}(\lambda) \cdot \dots \cdot p_{G_n}(\lambda)$ , logo  $p_G(\lambda)$  terá  $k$  como autovalor de multiplicidade pelo menos  $r$ . Porém, por hipótese multiplicidade de  $k$  é 1. Portanto temos um absurdo, logo  $G$  é conexo.

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

■

## 3.2 Isomorfismos de Grafos

Nesta seção verificaremos quando dois Grafos são ditos isomorfos, ou seja, quando as propriedades fundamentais são conservadas, além disso, observaremos que entre os dois ou mais grafos deve haver uma bijeção entre os elementos de suas estruturas (o número de arestas unindo os vértices em  $G_1$  é igual ao número de arestas unindo os vértices correspondentes em  $G_2$  por exemplo). Portanto, aqui observaremos que dois grafos podem parecer diferentes em sua representação visual e ainda assim representarem o mesmo grafo segundo a definição.

**Definição 3.2** *Dois grafos  $G_1$  e  $G_2$  são ditos **isomorfos** quando existe uma correspondência biunívoca entre seus conjuntos de vértices de modo que as adjacências sejam preservadas. Portanto dois grafos  $G_1$  e  $G_2$  são ditos isomorfos quando podemos obter um do outro através de uma permutação de vértices. Isto significa que as matrizes de adjacência de  $G_1$  e  $G_2$  são semelhantes, ou seja, existe uma matriz de permutação  $P$  tal que  $P^T A(G_1)P = A(G_2)$ .*

**Definição 3.3** *Dois grafos  $G_1$  e  $G_2$  são ditos **coespectrais** quando eles tem o mesmos autovalores com mesmas multiplicidades algébricas, ou seja,  $\text{spect}G_1 = \text{spect}G_2$ .*

**Observação 3.1** *Se dois grafos são isomorfos, então eles também são coespectrais. Entretanto, não vale a recíproca dessa afirmação, pois dois grafos podem ter o mesmo espectro, mas os vértices correspondentes em cada um pode não preservar as adjacências.*

**Definição 3.4** *Dizemos que um grafo  $G$  é caracterizado pelo seu espectro se todos os grafos com mesmo espectro de  $G$  são isomorfos a  $G$ .*

**Observação 3.2** *Dois grafos coespectrais não isomorfos nos mostra que algumas propriedades podem não ser caracterizadas pelo seu espectro, como a conexidade do grafo e o grau dos vértices.*

**Proposição 3.4** *Um grafo  $G$  possui um único autovalor se e somente se  $G$  é um grafo nulo.*

**Demonstração:** Seja  $\lambda$  autovalor de  $G$  com multiplicidade algébrica  $m$ . Como o traço da matriz de adjacência de  $G$  é zero então  $\lambda$  só pode ser zero. Logo o polinômio mínimo de  $A(G)$  é  $f(x) = x - \lambda = x$  e daí

$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Portanto  $G$  possui  $m$  vértices isolados. ■

**Corolário 3.1** *Grafos nulos (sem arestas) são caracterizados por seu espectro.*

**Proposição 3.5** *Seja  $G$  um grafo com dois autovalores distintos e  $\lambda_1 > \lambda_2$ . Então  $G$  é grafo regular de grau  $\lambda_1$  e  $\lambda_2 = -1$ .*

**Demonstração:** Sejam  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  autovalores de  $G$  tais que  $\lambda_1 > \lambda_2$ . Então a matriz de adjacência de  $G$  tem polinômio mínimo  $f(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)$  e portanto,

$$A^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)A + \lambda_1\lambda_2I = 0;$$

assim, para todo  $k$ ,  $1 \leq k \leq n$ ,  $a_{kk}^2 = -\lambda_1\lambda_2$ . Portanto  $G$  é grafo regular de grau  $-\lambda_1\lambda_2$ . Como temos por outro resultado que  $\lambda_1 = -\lambda_1\lambda_2$ , logo  $\lambda_2 = -1$  e  $G$  é grafo regular de grau  $\lambda_1$ . ■

**Corolário 3.2** *Todo grafo com exatamente dois autovalores distintos é caracterizado pelo seu espectro.*

### 3.3 Relação entre Parâmetros de Grafos

**Definição 3.5** *Seja  $G = (V, E)$  um grafo. O número  $\delta = \min d(v) | v \in V$  é chamado **grau mínimo de  $G$** . O número  $\Delta = \max d(v) | v \in V$  é chamado de **grau máximo de  $G$** . O número  $\bar{d} = \frac{1}{|V|} \sum_{v \in V} d(v)$  é chamado de **grau médio de  $G$** .*

*A relação entre o grau médio e o grau máximo e mínimo é dado por:*

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

**Definição 3.6** *Seja  $G(V, E)$  um grafo. Se  $v_i, v_j \in V$ , chamamos a **distância** de  $v_i$  a  $v_j$  ao mínimo dos comprimentos dos caminhos que ligam  $v_i$  a  $v_j$ . O máximo das distâncias que ligam dois vértices em  $G$  quaisquer é denominado **diâmetro** de  $G$ .*

**Proposição 3.6** *Seja  $G$  um grafo conexo com diâmetro  $D$  então o número de autovalores da matriz de adjacência  $A$  é no mínimo  $D + 1$ .*

**Demonstração:** Sejam  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  os autovalores distintos de  $G$ . Como a matriz de adjacência  $A$  é simétrica e real, seu polinômio mínimo tem grau  $n$  e então

$$(A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I) \dots (A - \lambda_n I) = 0.$$

Portanto,  $A^n$  é combinação linear de  $A^i$ , com  $0 \leq i \leq n - 1$ . Suponhamos que  $n \leq D$  e tomemos dois vértices  $v_i$  e  $v_j$  de  $G$  tais que a distância de um vértice ao outro seja igual a  $n$ . Então  $(A^i)_{v_i, v_j} = 0$  para todo  $0 \leq i \leq n - 1$  e  $(A^n)_{v_i, v_j} > 0$ . Note que por definição  $A^n = 0$  e  $n$  é o número máximo de autovalores, portanto temos uma contradição. Então de fato  $n \geq D + 1$ . ■

**Proposição 3.7** *Seja  $G$  um grafo com  $m$  arestas e  $n$  vértices, então*

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

**Demonstração:** Por definição temos que

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = 0 \text{ e } \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 = 2m.$$

Sejam  $f, g$  e  $h$  funções de  $\mathbb{R}^n$  em  $\mathbb{R}$  definidas por

$$f(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \lambda_1,$$

$$g(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = (\lambda_1 + \dots + \lambda_n), \quad h(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2.$$

Consideremos o seguinte problema de maximização com restrições de igualdade:  $\max f(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  sujeito às restrições,  $g(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = 0$  e  $h(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = 2m$ .

Definimos então a Lagrangeana

$$L(\lambda_1, \dots, \lambda_n, k_1, k_2) = \lambda_1 - k_1(\lambda_1 + \dots + \lambda_n) - k_2(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 - 2m)$$

e resolvendo por multiplicadores de Lagrange, obtemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = 1 - k_1 - 2k_2\lambda_1 = 0 \quad (1) \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_i} = -k_1 - 2k_2\lambda_i = 0, \quad \text{para todo } i, \quad 2 \leq i \leq n \quad (2) \\ \lambda_1 + \dots + \lambda_n = 0 \quad (3) \\ \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 = 2m \quad (4) \end{array} \right.$$

Note que  $k_2 \neq 0$ , pois se  $k_2 = 0$  então  $k_1$  seria simultaneamente igual a 1 e 0. Daí segue que para  $i, 2 \leq i \leq n$ ,  $\lambda_i = \frac{-k_1}{2k_2}$ . Sendo assim, segue também que  $\lambda_1 + \dots + \lambda_n = \lambda_1 + (n-1)\left(\frac{-k_1}{2k_2}\right) = 0$ . Logo  $\lambda_1 = -(n-1)\left(\frac{-k_1}{2k_2}\right)$ , e portanto, concluímos que

$$\lambda_1 = (n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right). \quad (5)$$

Substituindo  $\lambda_1$  em (4), temos:

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



Segue daí que  $\frac{k_1}{2k_2} = \sqrt{\frac{2m}{n(n-1)}}$ . Voltando em (5) obtemos

$$\lambda_1 = (n-1)\frac{k_1}{2k_2} = (n-1)\sqrt{\frac{2m}{n(n-1)}} = \sqrt{(n-1)^2 \frac{2m}{n(n-1)}} = \sqrt{(n-1)\frac{2m}{n}}. \quad \blacksquare$$

**Proposição 3.8** *Seja  $G$  um grafo com diâmetro  $D$ , então o número de vértices em  $G$  é no máximo igual a  $1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1}$ .*

**Demonstração:** Seja  $G$  um grafo. Tomemos um vértice  $v_i$  em  $G$ , este vértice está ligado a, no máximo,  $\Delta$  outros vértices. Cada um destes vértices pode estar ligado a, no máximo, mais  $\Delta - 1$  (pois eles estão ligados a  $v_i$ ), acrescentando então no máximo  $\delta(\delta - 1)$  vértices. Podemos prosseguir sucessivamente deste modo  $D - 1$  vezes, chegando assim no resultado

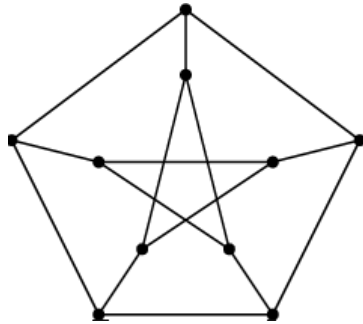
$$|V| \leq 1 + \Delta + \Delta(\Delta - 1) + \Delta(\Delta - 1)^2 + \dots + \Delta(\Delta - 1)^{D-1}. \quad \blacksquare$$

**Definição 3.7** *Se  $G = (V, E)$  é tal que*

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

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

**Exemplo 3.1**



O exemplo retrata o grafo de Petersen, onde temos que  $|V| = 10$ ,  $\delta = 3$  e  $D = 2$ .

**Observação 3.3** *Poucos são os grafos de Moore. Um problema nessa área, conhecido como o problema do grau-diâmetro, consiste em encontrar um grafo  $G$  de grau máximo  $\delta$ , diâmetro  $D$  e o maior número de vértices possível.*

### 3.4 Energia de Grafos

O conceito matemático, denotado como energia de um grafo, foi introduzido por Ivan Gutman em 1977, no intuito de se basear na representação da estrutura dos hidrocarbonetos. Entretanto, essa definição não ficou restrita as representações das moléculas, muito pelo contrário, ela foi estendida para todo tipo de grafo. Esta seção tem como objetivo definir e apresentar resultados de energia relacionados ao conjunto de vértices e arestas do grafo.

**Definição 3.8** *A energia de um grafo  $G$  denotada por  $E(G)$  é dada por*

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

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

**Corolário 3.3** *Para todo grafo completo  $K_n$  conhecemos os autovalores e conseguimos definir a energia do grafo. A energia de qualquer grafo  $K_n$  é dada por*

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

Para a maioria dos grafos, não é possível fazer essa dedução pois necessitaria conhecer todos os autovalores de  $G$ , ou seja, todas as raízes do polinômio característico do grafo. O que muitas vezes é possível, é fazer estimativas para a grandeza do valor da energia. Vimos por outro resultado, que a soma dos autovalores de  $G$  é zero, ou seja, a soma dos autovalores positivos é igual a soma dos módulos dos negativos. Assim, podemos escrever a energia como:

$$E(G) = 2 \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i.$$

**Proposição 3.9** *Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas, então*

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

**Demonstração:** Sejam  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  todos os autovalores de  $G$ . Então, usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz para o produto interno e a proposição (4.2), obtemos

$$\begin{aligned}
(G)^2 &= \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = \langle (|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|), (1, \dots, 1) \rangle^2 \\
&\leq \|(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|)\|^2 \cdot \|(1, \dots, 1)\|^2 \\
&= \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \right) \cdot \left( \sum_{i=1}^n 1 \right) \\
&= \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \right) \cdot n = 2m \cdot n.
\end{aligned}$$

Portanto, como as variáveis são positivas, temos que  $E(G) \leq \sqrt{2mn}$ . ■

**Exemplo 3.2** A igualdade  $E(G) = \sqrt{2mn}$  vale se e somente se todos os autovalores de  $G$  forem iguais em módulo. Acompanhando a demonstração da proposição anterior, teremos a igualdade no passo em que aplicamos a desigualdade de Cauchy-Schwarz se e somente se o vetor  $(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|)$  for colinear com o vetor de entradas todas iguais a um, ou seja,  $|\lambda_i| = \lambda$  para todo  $i$ . Quando isso ocorrer, haverá dois casos:

- i) Todos os autovalores são iguais e pela proposição 3.4 o grafo não possui arestas ( $m = 0$ ). Os autovalores são todos zeros e  $E(G) = 0$ .
- ii) Há dois autovalores  $\lambda$  e  $-\lambda$  com a mesma multiplicidade  $s$ . Portanto, pela proposição 3.5, o grafo é uma união de grafos completos. Contudo, sabemos que um dos autovalores deve ser  $-1$ , o que resta para o outro ser igual a  $1$ . Temos que  $n = 2s$ , o que nos dá que esse grafo é formado por  $\frac{n}{2}$  cópias de  $K_2$ .

**Proposição 3.10** Seja  $G$  um grafo com  $m$  arestas, então

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

**Demonstração:** Seja  $G$  um grafo com  $n$  vértices e  $m$  arestas, e sejam  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  os autovalores de  $G$ . Temos que  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0$ . Assim

$$0 = \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i \right)^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq n} \lambda_i \lambda_j \tag{3.1}$$

$$= \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j \tag{3.2}$$

$$= 2m + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j, \tag{3.3}$$

ou seja,  $\sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j = -2m$ . Agora, calculando a energia do grafo e usando a desigualdade triangular, obtemos

$$E(G)^2 = \left( \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \right)^2 = \sum_{1 \leq i, j \leq n} |\lambda_i| |\lambda_j| \quad (3.4)$$

$$= \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + \sum_{i \neq j} |\lambda_i| |\lambda_j| \quad (3.5)$$

$$\geq 2m + \left| \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j \right| \quad (3.6)$$

$$= 2m + |-2m| = 4m, \quad (3.7)$$

o que nos dá a desigualdade  $E(G) \geq 2\sqrt{m}$ .

Para a segunda desigualdade, é necessário que encontremos uma cota superior para a quantidade de vértices em função do número de arestas. Sabemos que cada aresta incide sobre dois vértices, o caso extremo ocorre quando uma aresta incide sobre dois vértices distintos dos demais. Para o caso em que o grafo não possui nenhum vértice isolado,  $n \leq 2m$ . E usando a proposição (4.9) temos

$$E(G) \leq \sqrt{2mn} \leq \sqrt{4m^2} = 2m.$$

No caso geral, um grafo que tenha  $x$  vértices isolados tem a mesma energia que os subgrafos sem os vértices isolados, pois esses vértices contribuem com os autovalores zero ao espectro, inalterando o valor da energia. ■

## 3.5 Aplicações

Nesta seção, mostraremos as possíveis aplicações envolvidas pelo conteúdo dos espectros e a utilização prática para a matriz de adjacência de um grafo  $G$ , tendo como objetivo mostrar que o número de caminhos entre dois pontos de comprimento  $l$  pode ser dado através da matriz de adjacência assim como a estrutura dos hidrocarbonetos pode ser representada por um grafo e caracterizada pelo seu espectro.

### 3.5.1 Transporte (Estações de metrô - Matriz de adjacência)

Uma forma de aplicar o conceito de matriz de adjacência está relacionado ao número de caminhos entre dois vértices quaisquer do grafo. Suponha um problema de construir um metrô

em uma grande cidade. Daí, são escolhidos  $n$  locais para representar as estações, digamos  $v_1, \dots, v_n$ . Estas estações juntamente com as linhas do metrô formam as interligações entre elas. A partir daí, podemos representar o problema através de um grafo  $G(V, E)$ . A questão que se coloca é: escolhendo duas estações quaisquer, sempre existe um caminho na rede que as ligue? Para isso, basta o grafo ser conexo. Além disso, conseguimos determinar o número de caminhos de comprimento  $l$  utilizando a matriz de adjacência. Basta efetuar  $A^l$ , onde  $l$  é o comprimento desejado. Cada entrada  $a_{i,j}$  na matriz  $A^l$  nos dá o número de caminhos de comprimento  $l$  entre os vértices  $v_i, v_j$ . Portanto, se a equação  $A^1 + A^2 + A^3 + \dots + A^{n-1}$  nos dá somente entradas diferentes de zero, garantimos a conexidade do grafo.

**Exemplo 3.3** *Se  $n = 10$  e a matriz de adjacência que representa as ligações iniciais do grafo  $G$  é*

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

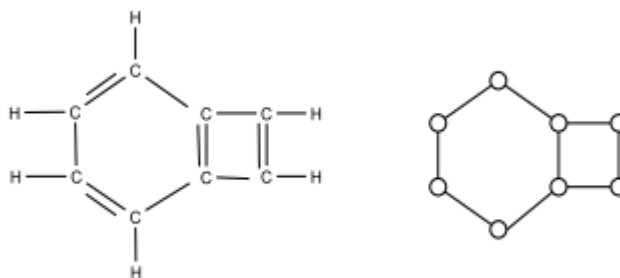
então  $A^1 + A^2 + A^3 + \dots + A^9$  é a matriz

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

*Note que a matriz combinação nos dá todos os possíveis caminhos de comprimento variando de 1 até 9 de dois vértices  $v_i$  e  $v_j$  do grafo. Por conseguinte, não temos nenhuma entrada nula na matriz combinação, garantindo assim que o grafo é totalmente conexo, ou seja, todas as estações estão conectadas por um caminho.*

### 3.5.2 Química (Espectro da matriz de Adjacência e Carbonos quaternários )

O espectro de um grafo é largamente utilizado na teoria dos grafos para caracterizar suas propriedades estruturais, no entanto, encontramos algumas falhas quando se deseja associar e/ou comparar dois grafos. Um dos motivos já foi visto neste trabalho e está ligado ao fato de que dois grafos podem compartilhar o mesmo espectro e não serem isomorfos. Outra é que seu espectro pode mudar drasticamente com uma pequena troca feita no grafo, por exemplo, troca ou retirada de uma aresta ou vértice. Embora sejam fatores 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 teoria quântica. Da teoria quântica, as propriedades de elétrons, átomos e moléculas num estado estacionário, são descritas por funções de ondas envolvendo massa e energia potencial. Huckel estudou os hidrocarbonetos insaturados, onde o esqueleto de uma molécula pode ser representado por um grafo, como por exemplo o da imagem abaixo.



Os vértices do grafo correspondem aos átomos de carbono do hidrocarboneto. Dois vértices são adjacentes se, e somente se existe uma ligação  $\delta$  entre os átomos de carbono correspondentes. Pela teoria de Huckel, os autovalores do grafo correspondem aos níveis de energia dos elétrons  $\pi$ . Sendo assim, o problema de determinação de energia de cada orbital molecular é reduzido ao da determinação do espectro do grafo molecular. Além disso, o coeficiente de partição de cada orbital atômico em um dado orbital molecular é dada pelas entradas do autovetor correspondente. No estudo dos hidrocarbonetos conjugados os grafos são sempre conexos, planares e com grau no máximo 3. Apesar destas restrições, essa classe de grafos é bastante ampla, envolvendo muitos problemas não triviais de teoria espectral dos grafos. Outro problema de relevância para os químicos é estudar a estabilidade química de uma molécula. Em um estudo feito por H. C. Longuet-Higgins, ele mostrou que a ocorrência de autovalor zero no espectro do grafo bipartido (correspondente ao hidrocarboneto com ligações  $\pi$  conjugadas) indica instabilidade química da molécula. Já Collatz e Sinogowitz propuseram o problema de caracterizar todos os grafos que tem zero como autovalor. Só existem resultados particulares até o momento.

Do estudo de carbonos quaternários e grau máximo de vértices, um grafo árvore com grau máximo menor ou igual a 4 é designado como um grafo molecular representando isômeros de alcanos (se  $n$  é o número de vértices o grafo representa isômero de  $C_nH_{2n-2}$ ).

$\Delta = 1$  é satisfeito apenas pelo etano.

$\Delta = 2$  é satisfeito apenas pelos isômeros de cadeia linear de alcanos, ou seja, sem ramificações.

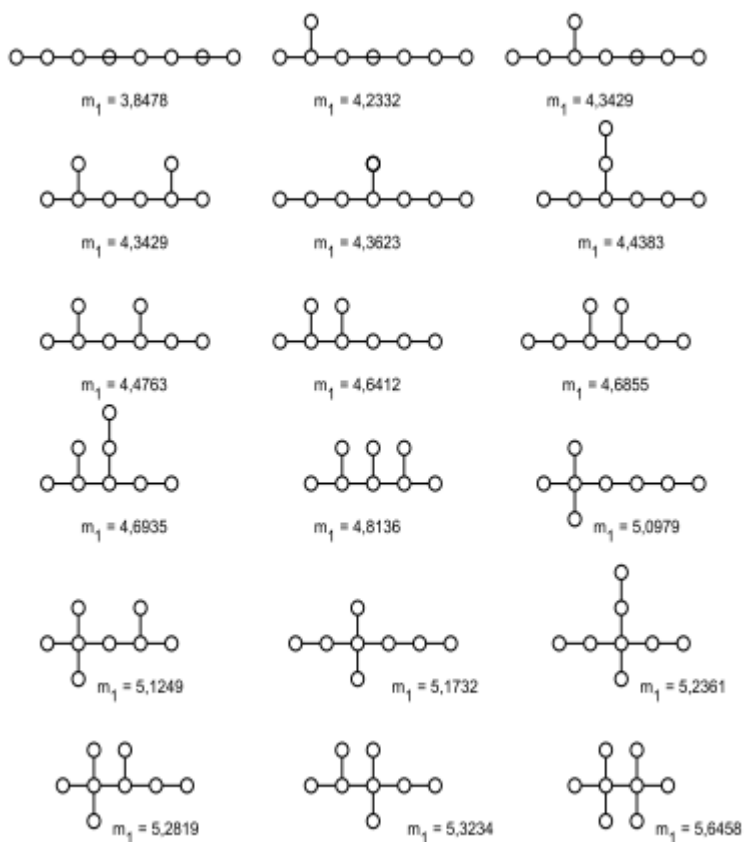
$\Delta = 3$  indica que a molécula apresenta apenas carbonos terciários.

$\Delta = 4$  indica a presença de pelo menos um carbono quaternário.

A partir da desigualdade abaixo, em que relaciona 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. Na próxima figura, onde apresentamos as árvores químicas dos isômeros do octano, observamos a presença de carbonos quaternários (correspondendo a  $\Delta = 4$ ), nos casos em que  $\mu_1 > 5$ .



A imagem nos fornece os isômeros do octano e  $m_1$  é índice Laplaciano (que não é definido pois não é o foco no desenvolvimento deste projeto).



---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] E. Fritscher, *Propriedades espectrais de um grafo*, Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, 2011.
- [2] F. U. Coelho, e M. L. Lourenço, *Um Curso de Álgebra Linear*. 2ª edição. São Paulo: Ed USP, 2005.3.
- [3] J. C. V. Sampaio, *Uma introdução à Topologia Geométrica passeios de Euler, superfícies, e o teorema das quatro cores*, EdUFSCar; São Carlos, SP, 2008.
- [4] N. M. M. Abreu, *Teoria Espectral dos Grafos: um Híbrido entre a Álgebra Linear e a Matemática Discreta e Combinatória com Origens na Química Quântica*, Tema Ten. Mat. Apl. Comput., 6, N°1, 2005.
- [5] N. Abreu, R. Del-Vecchio, V. Trevisan, C. Vinagre, *Teoria espectral dos grafos - Uma introdução*. Florianópolis, IIIº Colóquio de matemática da região sul, 2014.
- [6] R. J. Santos, *Um Curso de Geometria Analítica e Álgebra Linear*. Belo Horizonte, Imprensa Universitária da UFMG, 2017.
- [7] S. Jurkiewicz, *Grafos: Uma Introdução - Estágio dos Alunos Bolsistas*, OBMEP, 2005.