

N. Abreu, R. Del-Vecchio, V. Trevisan, C. Vinagre

**Teoria Espectral de Grafos - Uma
Introdução
III^o Colóquio de Matemática da Região
Sul**

Florianópolis, SC

2014

N. Abreu, R. Del-Vecchio, V. Trevisan, C. Vinagre

Teoria Espectral de Grafos - Uma Introdução
III^o Colóquio de Matemática da Região Sul

Minicurso apresentado no III^o
Colóquio de Matemática da
Região Sul, realizado na Univer-
sidade Federal de Santa Cata-
rina, em maio de 2014.

Florianópolis, SC

2014

Resumo

A Teoria Espectral de Grafos busca analisar propriedades estruturais de grafos através de matrizes e seus espectros, ou seja, dos autovalores das matrizes associadas a eles. O marco inicial desta teoria é o trabalho de Hückel em química quântica, de 1931, mas foi a partir da tese de doutorado de Cvetković, em 1971, que a teoria teve um grande desenvolvimento. Neste minicurso, investigaremos algumas matrizes associadas a grafos e mostraremos sua utilização na modelagem de problemas em diversas áreas do conhecimento. Particularmente estudaremos a matriz de adjacência, a matriz de incidência, a matriz Laplaciana e a matriz Laplaciana sem sinal. Além disso, apresentaremos algoritmos para a localização de autovalores para algumas classes de grafos.

Este texto é uma versão revista e bastante ampliada das Notas de Matemática Aplicada **27**, “Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações”, publicada pela SBMAC (Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional) em 2007 (1ª edição) e 2012 (2ª edição, formato de *e-book*), ver [2].

Palavras-chaves: Espectro de grafo, polinômio característico, matriz Laplaciana, matriz de adjacência, matriz Laplaciana sem sinal.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Grafo do Exemplo 1.1	14
Figura 2 – Um grafo 4-regular.	15
Figura 3 – K_4	15
Figura 4 – C_3 e P_5	16
Figura 5 – G_1 é um grafo conexo e G_2 é desconexo.	16
Figura 6 – Uma floresta com 3 árvores.	17
Figura 7 – $K_{3,4}$	17
Figura 8 – K_4 e seu grafo-linha $\ell(K_4)$	18
Figura 9 – Um grafo e seu complementar.	18
Figura 10 – $3K_4$	19
Figura 11 – $G_1 \times G_2$	20
Figura 12 – Grafo do Exemplo 1.2	21
Figura 13 – Grafo de Petersen.	22
Figura 14 – Grafo para o Exercício 5.	23
Figura 15 – Grafo do Exemplo 2.1.	29
Figura 16 – Grafos com mesmo $p(\lambda)$ e ciclos diferentes.	32
Figura 17 – O hiperoctaedro H_5	45
Figura 18 – $Ci(6, 2)$, $Ci(6, 1, 3)$, $Ci(6, 1, 2)$ e $Ci(6, 2, 3)$	47
Figura 19 – M_5 (<i>Möbius Ladder</i> com 10 vértices)	51
Figura 20 – G_1 e G_2 são grafos isomorfos.	53
Figura 21 – G_1 e G_2 são grafos não isomorfos e coespectrais.	53
Figura 22 – Hidrocarboneto e grafo que o representa.	56
Figura 23 – Grafos cúbicos de ordem 10	66
Figura 24 – Um grafo pipa.	67
Figura 25 – Cubo	68
Figura 26 – Grafo do Exemplo 3.1.	72

Figura 27 – Grafo do Exemplo 3.2	75
Figura 28 – Grafo do Exemplo 4.1	82
Figura 29 – Grafos G_1 e G_2	83
Figura 30 – K_4 e suas 16 árvores geradoras.	87
Figura 31 – A estrela $K_{1,6}$ tem $\mu_1 = 7$	102
Figura 32 – Grafos Laplacianos-coespectrais não isomorfos.	103
Figura 33 – Grafo do Exemplo 4.10	104
Figura 34 – Contraexemplo de Grone e Merris	105
Figura 35 – Grafos do Exemplo 4.11.	106
Figura 36 – Grafo do Exemplo 4.12	107
Figura 37 – Grafo do Exemplo 4.14	113
Figura 38 – Isômeros do octano: m_1 é o índice do Laplaciano.	115
Figura 39 – Estrutura secundária do <i>RNA</i>	116
Figura 40 – Grafo da estrutura secundária do <i>RNA</i>	117
Figura 41 – Árvores de ordem 8 e conec. alg. crescentes.	117
Figura 42 – Grafo do Exercício 1.	119
Figura 43 – Grafo do Exercício 2.	119
Figura 44 – $K_5 \vee \overline{K_9}$ é um grafo Q -integral	134
Figura 45 – G é Q -integral mas \overline{G} não é.	135
Figura 46 – Índice de incerteza: G coespectrais até 11 vértices.	137
Figura 47 – Índice de incerteza de $A(G)$, G até 21 vértices.	138
Figura 48 – Índice de incerteza de $L(G)$ com G até 21 vértices.	139
Figura 49 – Número de autovalores em $(\alpha, \beta]$	147
Figura 50 – Localizando o maior autovalor.	148
Figura 51 – Vértice v_k com filho v_j e pai v_l	148
Figura 52 – Diagonalizando $A + \alpha I$	153
Figura 53 – Dois autovalores positivos.	154
Figura 54 – Todos os autovalores menores que 2.	154
Figura 55 – Um autovalor maior que 1.	155
Figura 56 – Dois autovalores maiores que $\frac{1}{2}$	155

Figura 57 – Centopeia diagonalizada com $\alpha = 0$	156
Figura 58 – Construção de um grafo threshold	159
Figura 59 – Diagonalizing $A(G) + xI$	167

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Alguns grafos para os quais $a(G)$ é conhecido.	101
Tabela 2	–	$a(G')$, para G' um grafo obtido de G .	101
Tabela 3	–	Incertezas coespectrais de A e Q , G até 11 vértices.	137
Tabela 4	–	Índices coespectrais para $A(T)$, $L(T)$ e $A(T) \& L(T)$.	140

Sumário

1	Preliminares sobre grafos	13
1.1	Conceitos básicos	13
1.2	Relações entre alguns parâmetros de grafos	20
1.3	Exercícios	23
1.4	Notas bibliográficas	24
2	Matriz de adjacência	27
2.1	Introdução	27
2.2	Polinômio característico e espectro de um grafo	28
2.3	Alguns resultados e aplicações	33
2.4	O espectro de certos tipos de grafos	41
2.4.1	Grafos circulantes e seus espectros	47
2.5	Isomorfismo de Grafos	52
2.6	Energia de grafos	56
2.6.1	Limites para a energia de um grafo	58
2.7	Exercícios	65
2.8	Notas bibliográficas	69
3	Matriz de incidência	71
3.1	Introdução	71
3.2	Matriz de incidência e grafo-linha de um grafo	71
3.3	Exercícios	77
3.4	Notas bibliográficas	79
4	Matriz Laplaciana	81
4.1	Conceitos e resultados preliminares	81
4.2	O Teorema da Matriz-árvore	86
4.3	Conectividade algébrica	100

4.4	Autovalores e o problema do corte maximal	105
4.4.1	Corte maximal e autovalores em certos grafos	108
4.5	Aplicações	114
4.5.1	Carbonos quaternários e grau máximo	114
4.5.2	RNA e conectividade algébrica	115
4.5.3	Potencial de ionização	118
4.6	Exercícios	118
4.7	Notas bibliográficas	121
5	Matriz Laplaciana sem sinal	123
5.1	Matriz Laplaciana sem sinal	123
5.2	Q -espectro da união, produto cartesiano e “join”	129
5.3	Grafos Q -integrais	132
5.4	Coespectralidade e aplicações	135
5.5	Exercícios	141
5.6	Notas bibliográficas	142
6	Algoritmos de Localização de Autovalores	145
6.1	Motivação	145
6.2	Adjacência de árvores	148
6.3	Aplicações para árvores	153
6.3.1	Exemplo	153
6.3.2	Centopeias	155
6.4	Adjacências de grafos threshold	157
6.4.1	Diagonalizando $A + xI$	159
6.4.2	Exemplos	166
6.4.3	Simplicidade dos autovalores	170
6.5	Exercícios	171
6.5.1	Notas Bibliográficas	172
	Referências	173
7	Apêndice	183

7.1	Um resultado de Teoria de Matrizes	183
7.2	Resultados sobre matrizes simétricas	186
7.2.1	Princípio de Rayleigh	186
7.2.2	Teorema de Entrelaçamento	188
7.2.3	Partições equilibradas	190
7.2.4	Teorema de Sylvester para a inércia	191
7.2.5	Teorema de Perron-Frobenius	194
	Índice	199

1 Preliminares sobre grafos

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.

1.1 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 *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 da Figura¹ 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 $d(v_4) = 2$.

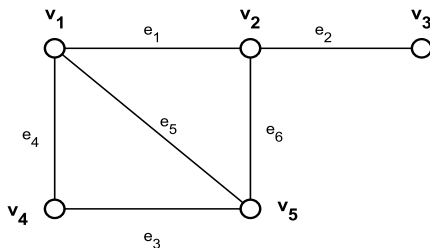


Figura 1 – Grafo do Exemplo 1.1

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.

¹ Os grafos deste trabalho foram, em sua maioria, desenhados com o software *yEd Graph Editor* [82].

- **grafo regular de grau k ou k -regular:** É um grafo em que todos os vértices têm o mesmo grau k . A Figura 2 mostra um grafo 4-regular.

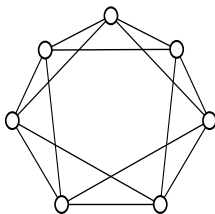
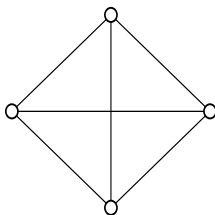


Figura 2 – Um grafo 4-regular.

- **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 3, vemos o grafo K_4 .

Figura 3 – K_4 .

- **cadeias, caminhos e ciclos:** Uma sequência finita $v_1, v_2, v_3, \dots, v_k$ 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 4.

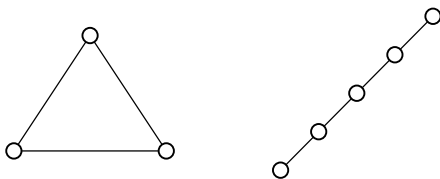


Figura 4 – C_3 e P_5 .

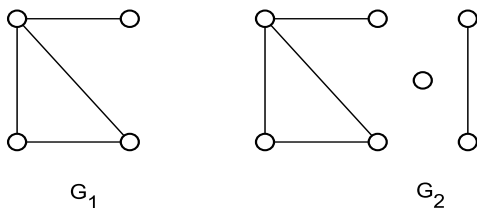


Figura 5 – G_1 é um grafo conexo e G_2 é desconexo.

- **grafo conexo:** É um grafo no qual existe um caminho ligando 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 $G' \neq H$. Na Figura 5, o grafo G_1

é conexo e G_2 é um grafo desconexo com três componentes conexas.

- **árvore:** É um grafo conexo e sem ciclos. Um grafo desconexo e sem ciclos é chamado uma **floresta** (ver Figura 6).

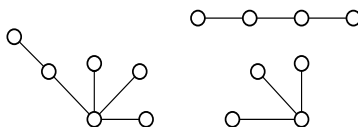


Figura 6 – Uma floresta com 3 árvores.

- **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.

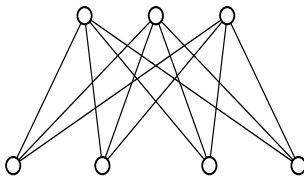


Figura 7 – $K_{3,4}$.

- **grafo bipartido completo:** É um grafo $G = G(V_1 \cup V_2, E)$ bipartido em 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 7.

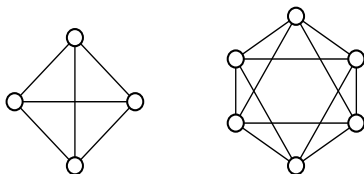


Figura 8 – K_4 e seu grafo-linha $\ell(K_4)$.

- **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 8, notar que K_4 é 3-regular e $\ell(K_4)$ é 4-regular.

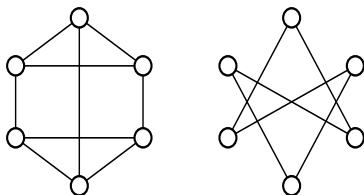


Figura 9 – Um grafo e seu complementar.

- **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 $\{v_i, v_j\} \in \overline{E}$ se e somente se $\{v_i, v_j\} \notin E$ (ver Figura 9).

Operações entre grafos permitem obter grafos a partir de grafos dados. Dentre as várias existentes, neste texto trabalharemos com a união de grafos, o produto cartesiano e o *join* de grafos (estas duas últimas somente no Capítulo 5). No que se segue, $G_1 = G_1(V_1, E_1)$ e $G_2 = G_2(V_2, E_2)$ são dois grafos dados:

- **união de G_1 e G_2 :** Quando $V_1 \cap V_2 = \emptyset$, o **grafo união** $G_1 \cup G_2$ é aquele cujo conjunto de vértices é $V_1 \cup V_2$ e o conjunto de arestas é $E_1 \cup E_2$. Este grafo é também chamado **soma** de G_1 e G_2 e neste caso, denotado $G_1 + G_2$.

Para qualquer grafo conexo G , escrevemos kG para indicar o grafo que é a união de k cópias de G . A Figura 10 mostra a união de 3 cópias de K_4 , ou seja, $3K_4$.

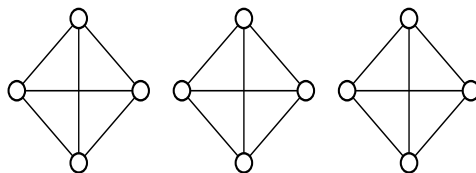


Figura 10 – $3K_4$.

- **produto completo ou junção (“join”) de G_1 e G_2 :** É o grafo $G_1 \vee G_2$ obtido de $G_1 \cup G_2$ unindo-se cada vértice de G_1 a todos os vértices de G_2 . Portanto, o seu conjunto

de vértices é dado pela união de V_1 e V_2 . Observemos que $G_1 \vee G_2 = \overline{G_1 \cup G_2}$.

- **produto cartesiano de G_1 e G_2 :** É o grafo $G_1 \times G_2$, cujo conjunto de vértices é $V = V_1 \times V_2$ e no qual dois vértices $(u_1, u_2) \in V$ e $(v_1, v_2) \in V$ são adjacentes se, e somente se, u_1 é adjacente a v_1 em G_1 e $u_2 = v_2$ em G_2 ou $u_1 = v_1$ em G_1 e u_2 é adjacente a v_2 em G_2 .

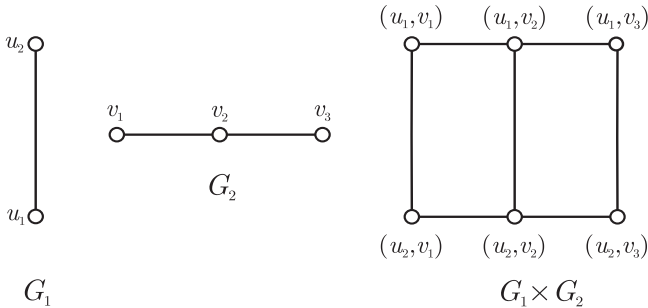


Figura 11 – $G_1 \times G_2$.

1.2 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 .

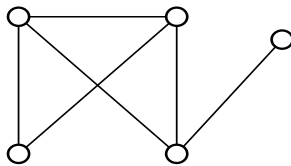


Figura 12 – Grafo do Exemplo 1.2

Exemplo 1.2. O grafo da Figura 12 possui $\delta = 1$, $\Delta = 3$ e $\bar{d} = 2, 4$.

As seguintes relações são imediatas a partir das definições:

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

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 Δ 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 13 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**.

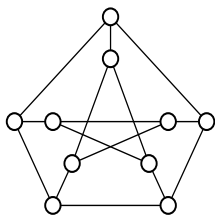


Figura 13 – Grafo de Petersen.

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 Δ , diâmetro D e o maior número de vértices possível. J-C Bermond, C. Delorme e J. J. Quisquater apresentam em [7] uma tabela com Δ 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.

1.3 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 da Figura 14.

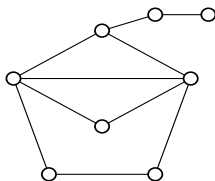


Figura 14 – Grafo para o Exercício 5.

6. Construa o grafo-linha do grafo dado na Figura 14.
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**. Para $n \geq 3$, construa um grafo cúbico sem triângulos e com $2n$ vértices.

1.4 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 [12], Diestel [34]

e Harary [50], 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 [80] e Markenzon & Vernet [66], para o primeiro caso, e o de Szwarcfiter [79], 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 [11], cuja utilização se tornou tradicional nos cursos das escolas brasileiras de Engenharia de Produção e afins.

2 Matriz de adjacência

Neste capítulo apresentaremos algumas das técnicas utilizadas para deduzir propriedades estruturais de grafos a partir dos coeficientes do seu polinômio característico e do seu espectro, isto é, dos autovalores da matriz de adjacência.

2.1 Introdução

A matriz de adjacência é a matriz de zeros e uns que se constrói naturalmente a partir das relações de adjacência entre os vértices do grafo. Na primeira seção deste capítulo, apresentamos 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. Ainda nesta seção apresentamos 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. Para mostrar uma 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 formada por uns e zeros. Sendo simétrica, 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 $p_G(\lambda)$; λ é dito um **autovalor do grafo G** quando λ é uma raiz de $p_G(\lambda)$. Se $A(G)$ possui s autovalores distintos $\lambda_1 > \dots > \lambda_s$ com multiplicidades iguais, respectivamente, $m(\lambda_1), \dots, m(\lambda_s)$, 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*

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

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

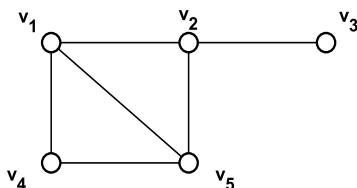


Figura 15 – Grafo do Exemplo 2.1.

Exemplo 2.1. *Seja G o grafo da Figura 15. Sua matriz de adjacência é*

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

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:

$$(i) \ a_1 = 0;$$

$$(ii) \ a_2 = -m;$$

$$(iii) \ a_3 = -2t, \text{ onde } t \text{ é o número de triângulos no grafo.}$$

Demonstração: Da teoria de matrizes ([52]) temos que, para cada i , $1 \leq i \leq s$, a soma dos menores principais de $A(G)$ com i linhas e i colunas é igual a $(-1)^i a_i$ (um **menor principal de $A(G)$ com i linhas e i colunas** é o determinante de qualquer **submatriz principal com i linhas e i colunas** 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, $a_2 = -m$, onde m é o número de arestas de G .

iii) Existem apenas três possibilidades para submatrizes principais não nulas de $A(G)$ com 3 linhas e 3 colunas; seus determinantes são:

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

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

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

Logo o número de cadeias de comprimento $L + 1$ ligando v_i a v_j é $(A^{L+1})_{ij}$. A conclusão 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 $T_l = \text{tr}(A^l) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^l$. Em particular:*

(ii) *a soma dos quadrados dos autovalores é duas vezes o número de arestas, ou seja, $T_2 = \text{tr}(A^2) = 2m$;*

(iii) *se G é um grafo regular de grau k então $T_2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = kn$, pois $kn = 2m$;*

(iv) *a soma dos cubos dos autovalores é seis vezes o número t de triângulos, ou seja, $T_3 = \text{tr}(A^3) = 6t$.*

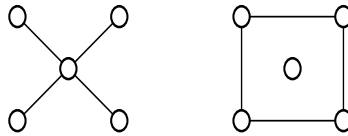


Figura 16 – Grafos com mesmo $p(\lambda)$ e ciclos diferentes.

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 o número de ciclos de comprimento r ($r \geq 4$) são determinados em função de $\text{tr}(A^r)$. Os dois grafos da Figura 16 comprovam isto: embora tenham o mesmo polinômio característico, a saber,

$p(\lambda) = \lambda^5 - 4\lambda^3$, o grafo da direita tem um ciclo de comprimento 4 e o outro não tem ciclos.

2.3 Alguns resultados e aplicações

Como aplicação do estudo realizado, vejamos uma situação simples onde se usa a Proposição 2.2.

Exemplo 2.2. *Consideremos o problema de construir um metrô numa grande cidade.*

São escolhidos n locais estratégicos, digamos v_1, \dots, v_n , que devem possuir estações de metrô. Estas estações, juntamente com as linhas de metrô definidas para fazerem as interligações entre elas, formam uma malha ou rede. Esta rede pode ser representada por um grafo, cujos vértices são as estações e as arestas indicam as linhas de metrô que as interligam.

A questão que se coloca é: escolhendo-se duas estações quaisquer, sempre existe um caminho na rede que as ligue? Para uma resposta positiva, é necessário que o grafo seja conexo. Se A é a matriz de adjacência do grafo basta então que $A + A^2 + \dots + A^{n-1}$ não tenha nenhuma entrada nula.

Por exemplo, se $n = 10$ e a matriz do grafo que representa a rede é

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

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 conectividade do grafo.

O Teorema a seguir, conhecido como *Teorema de entrelaçamento para a matriz de adjacência*, nos dá uma relação entre os autovalores de um grafo e os autovalores de um subgrafo

induzido - em particular, do subgrafo obtido pela retirada de um vértice. A prova decorre de um teorema geral de matrizes cuja prova pode ser encontrada no Apêndice (Teorema 7.1).

Teorema 2.1. *Seja $G = G(V, E)$ um grafo com n vértices e autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ e seja $H = H(V', E')$ um subgrafo induzido de G com m vértices. Se os autovalores de H são $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_m$ então, para cada i , $1 \leq i \leq m$ vale $\lambda_{n-m+i} \leq \mu_i \leq \lambda_i$. Em particular, se $v \in V$ e $V' = V \setminus \{v\}$ então $\lambda_{i+1} \leq \mu_i \leq \lambda_i$ para cada i , $1 \leq i \leq n-1$.*

Demonstração: Escolhamos $V = \{1, \dots, n\}$ e $V' = \{1, \dots, m\}$. Então a matriz de adjacência $A(H)$ de H é uma submatriz principal de A , pois é obtida desta pela retirada das $n-m$ últimas linhas e das correspondentes colunas. Portanto o resultado segue do Corolário do Teorema 7.1 (ver Apêndice). ■

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, [38], a centralidade de intermediação (*betweenness centrality*), [37], e a centralidade de proximidade (*closeness centrality*), [74]. Todas estas são medidas não espectrais.

Em 1987, Bonacich [13] 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 no Apêndice (Teorema 7.4), garante que o raio espectral é o índice do grafo, pois grafos conexos possuem matrizes de adjacência irredutíveis (Proposição 7.4 do Apêndice). 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 positivas. Isto permite introduzir uma nova medida de centralidade de vértice para um grafo.

Definição 2.4. *A **centralidade de autovetor** do vértice v_i do grafo G é a i -ésima coordenada x_i do autovetor unitário positivo $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_n]^T$ associado ao índice λ_1 do grafo, ou seja, é o número*

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

onde os a_{ij} são as entradas da sua 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 15. 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 de centralidade de vértice 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 [73]) aplicado à matriz de adjacência A (o método pode ser usado para esta matriz pois ela é diagonalizável e λ_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 λ_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 [9] e [14] a centralidade de autovetor é usada para estudar *AIDS*. Em [42], 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. Escrevemos M_n para indicar o conjunto de todas as matrizes quadradas de ordem n .

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

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

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 $(A^i)_{uv} = 0$ 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 λ_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 λ_1 seu maior autovalor, o Princípio de Rayleigh (aqui, Corolário da Proposição 7.2) garante que

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

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 λ é um autovalor de A , o Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 7.4) afirma que $|\lambda| \leq \lambda_1$; além disso, existe pelo menos um autovalor λ tal que $|\lambda| = \lambda_1$. Se $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ para $\mathbf{x} \neq 0$ e se $|\lambda| = \lambda_1$, consideremos a matriz X de \mathbb{M}_n cujas colunas são todas iguais ao autovetor \mathbf{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: encontrar

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

sujeito às restrições

$$g(x_1 \dots x_n) = 0 \quad \text{e} \quad h(x_1 \dots x_n) = 2m.$$

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:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 1 - k_1 - 2k_2x_1 = 0; \quad (2.3.1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -k_1 - 2k_2x_i = 0, \quad \text{para todo } i, \quad 2 \leq i \leq n; \quad (2.3.2)$$

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n = 0; \quad (2.3.3)$$

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = 2m. \quad (2.3.4)$$

Temos que $k_2 \neq 0$, pois, caso contrário, k_1 seria simultaneamente igual a 0 e 1. Daí, segue de (2.3.2) que, para cada i , $2 \leq i \leq n$, $x_i = \frac{-k_1}{2k_2}$. De (2.3.3), 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,

$$x_1 = (n-1)\left(\frac{k_1}{2k_2}\right). \quad (2.3.5)$$

Substituindo (2.3.5) em (2.3.4), 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 (2.3.5), obtemos

$$\begin{aligned}x_1 &= (n-1) \left(\frac{k_1}{2k_2} \right) = (n-1) \sqrt{\frac{2m}{n(n-1)}} = \\ &= \sqrt{(n-1)^2 \frac{2m}{n(n-1)}} = \sqrt{2m \left(1 - \frac{1}{n} \right)}.\end{aligned}$$

■

2.4 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*¹ de Dragan Stevanić, disponível a partir de

Spectral Graph Theory Home Page,

cujos sítio <http://www.sgt.pep.ufrj.br/index.php> é mantido pelo Programa de Pesquisa Operacional da COPPE-UFRJ para promover o estudo e a divulgação da Teoria Espectral de Grafos.

¹ Último acesso em 26 de dezembro de 2013. Usado neste trabalho, este *software* calcula diversos invariantes a partir do desenho do grafo.

Voltando ao problema de determinação do espectro de um grafo, 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 algébrico. 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 [52], 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.

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 λ 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 $\mathbf{x} = [x_1 x_2 \dots x_n]^T$ um autovetor associado ao autovalor k de G e suponhamos que x_j é uma entrada de \mathbf{x} com valor absoluto máximo. Temos que $(A\mathbf{x})_j = \sum x_i$, 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 \mathbf{x} são iguais. Então \mathbf{x} é múltiplo de $\mathbf{1}$ e o autoespaço associado ao autovalor k tem dimensão 1.

Reciprocamente, supondo que G é desconexo, sejam G_1, G_2, \dots, G_m as suas componentes conexas. Como cada uma é um grafo conexo k -regular então k é um autovalor de multiplicidade 1 para cada G_i . Mas como $p_G(\lambda) = p_{G_1}(\lambda) \cdot p_{G_2}(\lambda) \dots p_{G_m}(\lambda)$ (Proposição 2.6), segue que k é um autovalor de G de multiplicidade $m > 1$. Logo a asserção está provada.

(iii) Seja \mathbf{y} um vetor não nulo de G associado a um autovalor λ de G e seja y_j uma entrada de \mathbf{y} com valor absoluto máximo.

Como em (ii), temos $\sum y_i = \lambda y_j$ e $|\lambda||y_j| = |\sum y_i| \leq k|y_j|$. 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} satisfaz

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

onde J é a matriz quadrada de ordem n em que todas as entradas são iguais a 1. Seja $\{\mathbf{1}, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n\}$ 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 $i, 2 \leq i \leq n$,

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

de onde segue que \mathbf{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

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

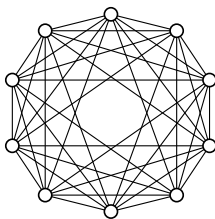


Figura 17 – O hiperoctaedro H_5 .

O grafo complementar de G é chamado **hiperoctaedro** (ou “cocktail party graph”) e denotado por H_s (ver Figura 17).

Pela Proposição 2.8, temos que

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

No Exemplo 2.10 veremos 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 λ é autovalor de G se e somente se $-\lambda$ é autovalor de G . De fato, tomemos um autovetor $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_{k_1} \ y_1 \dots y_{k_2}]^T$ de $A(G)$ associado ao autovalor λ de G . Vamos mostrar que $-\lambda$ é também autovalor de G , exibindo um de seus autovetores associados, a saber, $\tilde{\mathbf{x}} = [x_1 \dots x_{k_1} \ -y_1 \dots -y_{k_2}]^T$. Realmente, como $(A(G)\mathbf{x})^T = \lambda\mathbf{x}^T$ 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,

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

2.4.1 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 $G = Ci(n, k_1, \dots, k_l)$.

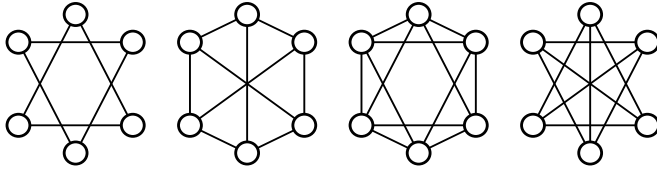


Figura 18 – $Ci(6, 2)$, $Ci(6, 1, 3)$, $Ci(6, 1, 2)$ e $Ci(6, 2, 3)$.

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 18 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 $j - i(\text{mod } n)$ em $G \Leftrightarrow j - i = k_r(\text{mod } n)$ ou $j - i = -k_r(\text{mod } n)$, para algum k_r da lista $k_1, \dots, k_l \Leftrightarrow j = i + k_r(\text{mod } n)$ ou $j = i - k_r(\text{mod } n)$, 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 $q(\lambda) = a_1\lambda + a_2\lambda^2 + \dots + a_{n-1}\lambda^{n-1}$, 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 ω , (ver [6], 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

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

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

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

Usando então as relações trigonométricas

$$\operatorname{sen} k \frac{2\pi}{n} = -\operatorname{sen}(n-k) \frac{2\pi}{n} \quad \text{e} \quad \cos k \frac{2\pi}{n} = \cos(n-k) \frac{2\pi}{n},$$

obtemos

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

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 portanto, 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

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

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 demais 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: para n ímpar,

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

e para n par,

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

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.

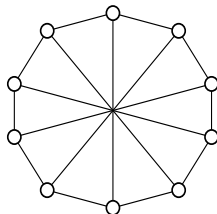


Figura 19 – M_5 (Möbius Ladder com 10 vértices)

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

$$\left[\begin{array}{ccccccc} 0 & 1 & 0 & \dots & \underbrace{1}_{\text{entrada } 1, h} & \dots & 0 & 1 \end{array} \right].$$

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 , $1 \leq k \leq 2h-1$,

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

$$= \cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) + \cos(k\pi) + \cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) = 2\cos\left(\frac{k\pi}{h}\right) + (-1)^k.$$

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 $Ci(2s; s)$, sendo portanto igual a $Ci(2s; 1, \dots, s-1)$. Usando o mesmo raciocínio dos exemplos anteriores, obtemos o espectro de H_s , já calculado no Exemplo 2.6.

2.5 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 20 são isomorfos, com a bijeção entre os conjuntos de vértices dada por $f(v_i) = u_i$, $i = 1, \dots, 8$.

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**)

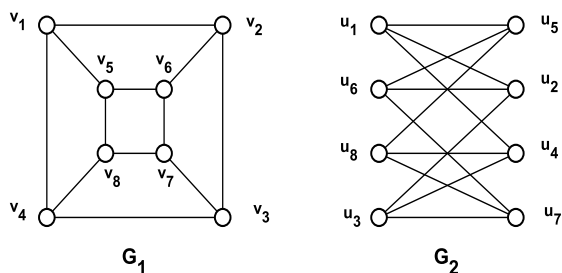


Figura 20 – G_1 e G_2 são grafos isomorfos.

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:

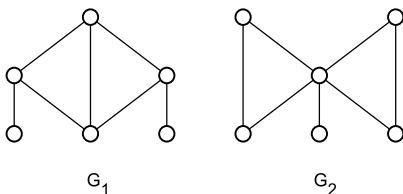


Figura 21 – G_1 e G_2 são grafos não isomorfos e coespectrais.

Exemplo 2.12. Os grafos G_1 e G_2 da Figura 21 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 16. 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 λ autovalor de G com multiplicidade k . Como o traço da matriz de adjacência $A(G)$ de G é zero então λ 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 λ_1 formado por m_1 cópias de K_{λ_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 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,

$$A^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)A + \lambda_1\lambda_2I = O. \quad (2.5.6)$$

Considerando os elementos da diagonal, temos $(A^2)_{kk} = -\lambda_1\lambda_2$, todo k , $1 \leq k \leq n$. Pela Corolário 2.1, esta relação indica que o número de cadeias fechadas de comprimento dois (arestas) partindo de cada vértice v_k é constante e igual a $-\lambda_1\lambda_2$, ou seja, que G é um grafo $(-\lambda_1\lambda_2)$ -regular. Pela Proposição 2.7 temos que $\lambda_1 = -\lambda_1\lambda_2$ (o grau é o maior autovalor). Mas $\lambda_1 \neq 0$, pois em caso contrário, $\lambda_2 = 0$, já que $\text{tr}(A) = 0 = \lambda_1 + \lambda_2$, contrariando o fato de que G possui dois autovalores distintos. Portanto, $\lambda_2 = -1$ e G é um grafo regular de grau λ_1 . Fixemos um vértice v_i de G . Então v_i é adjacente a λ_1 vértices que são necessariamente adjacentes entre si, pois como

$$(A^2)_{ij} = (\lambda_1 + \lambda_2)(A)_{ij} = 0,$$

para todo vértice v_j de G não adjacente a v_i , não há vértices adjacentes àqueles λ_1 vértices fora do conjunto de vértices adjacentes a v_i . Portanto, estes $\lambda_1 + 1$ vértices formam uma componente conexa de G que é λ_1 -regular, ou sejam, formam K_{λ_1+1} . Claramente, as demais componentes também são iguais a K_{λ_1+1} .

Como λ_1 tem multiplicidade igual a 1 em cada K_{λ_1+1} então G é formado por m_1 cópias de K_{λ_1+1} . Com o mesmo raciocínio, como $\lambda_2 = -1$ tem multiplicidade λ_1 em cada uma das m_1 cópias de K_{λ_1+1} , segue que $m_2 = \lambda_1 m_1$. ■

2.6 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 22.

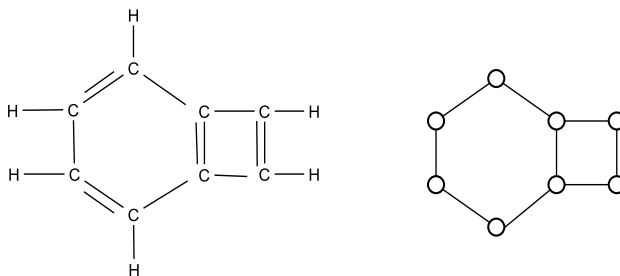


Figura 22 – Hidrocarboneto e grafo que o representa.

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 [53], os autovalores do grafo

correspondem aos níveis de energia dos elétrons π . 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 pela Teoria de Hückel, 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.

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

A energia total dos elétrons π 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* em [45]. 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.

2.6.1 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 [68] 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*

$$E(G) \leq \sqrt{2mn}. \quad (2.6.7)$$

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 (2.6.7) 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 2.2 ([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

$$[E(G)]^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 + 2 \sum_{i < j} |\lambda_i| |\lambda_j|. \quad (2.6.8)$$

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

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

Em vista disto,

$$\sum_{i < j}^n |\lambda_i| |\lambda_j| \geq \left| \sum_{i < j}^n \lambda_i \lambda_j \right| = m. \quad (2.6.9)$$

Daí e do Corolário 2.1(ii), segue de 2.6.8 que

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

ou seja,

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

Da desigualdade (2.6.9), 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 [23]).

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

$$\sqrt{2mn} \leq \sqrt{4m^2} = 2m. \quad (2.6.10)$$

Levando em conta a desigualdade (2.6.7), obtemos

$$E(G) \leq 2m. \quad (2.6.11)$$

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 (2.6.7) e (2.6.10) e, portanto, temos a igualdade também em (2.6.11). Claramente, a igualdade em (2.6.11) 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 $\overline{C_i}(n; 1)$.

O teorema a seguir, provado por Stevanović e Stanković em [77], 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 2.3. *Existe $n_0 \in \mathbb{N}^*$ tal que $E(\overline{Ci}(n, 1)) > 2(n - 1)$, para todo $n \geq n_0$.*

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,

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

Efetuando 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 $n_0 = 10$ [77]. ■

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 [77], Stevanović e Stanković generalizaram o resultado anterior, estabelecendo o seguinte teorema:

Teorema 2.4. *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 $n \in \mathbb{N}^*$,

$$E(\overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l)) = (n - 1 - 2l) + \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \right|. \quad (2.6.12)$$

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E(\overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l))}{n-1} > 2. \quad (2.6.13)$$

Chamando c_{k_1, \dots, k_l} ao primeiro membro de (2.6.13) 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,

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r \frac{2\pi j}{n} \right| &= \\ &= \int_0^{2\pi} \left| -1 - \sum_{r=1}^l 2\cos k_r x \right| dx. \end{aligned} \quad (2.6.14)$$

De (2.6.12) e (2.6.14) 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 $G = \overline{Ci}(n, k_1, \dots, k_l)$. 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 $\overline{Ci}(n, k_1, k_2, \dots, k_l)$ 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 (Teorema 2.1), 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. ■

2.7 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 23 ilustram a capa de um clássico livro de Teoria dos Grafos [50]. Prove que eles são dois a dois não isomorfos. Verifique se entre eles se há algum par coespectral.

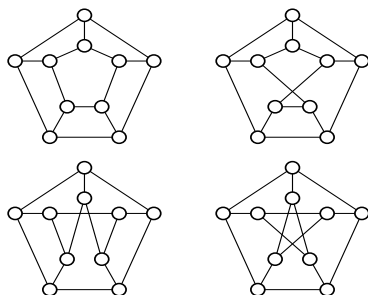


Figura 23 – Grafos cúbicos de ordem 10

4. Dentre os grafos da Figura 23, 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 23 é conhecido na literatura como o *grafo de Petersen* e é denotado por P (veja o Exemplo 1.3). 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 calcular o 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 24, 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 $t + 1$.

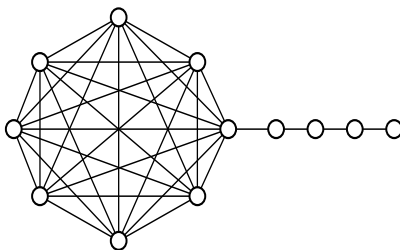


Figura 24 – Um grafo pipa.

9. É possível encontrar 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 (Exercício 5). 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 25. Prove que o cubo é bipartido. Determine o espectro do cubo sem calcular o determinante.

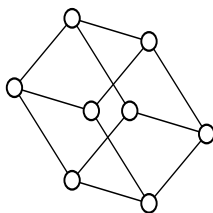


Figura 25 – Cubo

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.

2.8 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 [23], já está na terceira edição, [24], 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 [10], Godsil & Royle [41] e Beineke & Wilson, [8]. Recentemente, D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić lançaram o livro introdutório [31], 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 [35].

3 Matriz de incidência

Neste capítulo trataremos da matriz de incidência. Os resultados espectrais sobre esta matriz estão relacionados com o grafo linha. Para nosso propósito, a sua importância está no fato que ela fornece relações importantes que serão utilizadas nos próximos capítulos, principalmente para obter resultados estruturais de grafos a partir da matriz Laplaciana.

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:

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

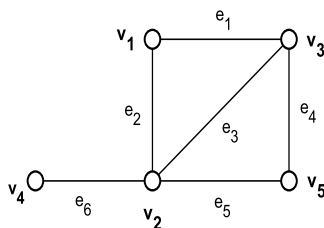


Figura 26 – Grafo do Exemplo 3.1.

Exemplo 3.1. Para o grafo da Figura 26, 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_ℓ 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 α_{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 λ 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 uma matriz semi-definida positiva, se λ é autovalor do grafo-linha então existe vetor \mathbf{v} não nulo tal que

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

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 de nenhum grafo. 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_ℓ a matriz de adjacência de $\ell(G)$. Se existe vetor $v \neq 0$ tal que $Bv = 0$ então -2 é um autovalor de A_ℓ .*

Demonstração: Já vimos que $B^TB = 2I + A_\ell$. Seja $\mathbf{v} \neq 0$ vetor tal que $B\mathbf{v} = \mathbf{0}$. Daí $(B^TB)\mathbf{v} = B^T(B\mathbf{v}) = B^T\mathbf{0} = \mathbf{0}$. Logo $(2I + A_\ell)\mathbf{v} = 2I\mathbf{v} + A_\ell\mathbf{v} = 2\mathbf{v} + A_\ell\mathbf{v} = \mathbf{0}$, ou seja, $A_\ell\mathbf{v} = -2\mathbf{v}$. Como $\mathbf{v} \neq 0$ temos que -2 é autovalor para A_ℓ . ■

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 $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ tal que $B\mathbf{v} = \mathbf{0}$.*

Demonstração: Seja u_1, u_2, \dots, u_{2k} um ciclo de comprimento $2k$ em G . Tome o vetor $\mathbf{v} = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]^T$ tal que $v_i = (-1)^i$ para $i, 1 \leq i \leq 2k$ e $v_i = 0$ para $i > 2k$. Verifica-se que $B\mathbf{v} = \mathbf{0}$. ■

Exemplo 3.2. *Para o grafo da Figura 27, o vetor*

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

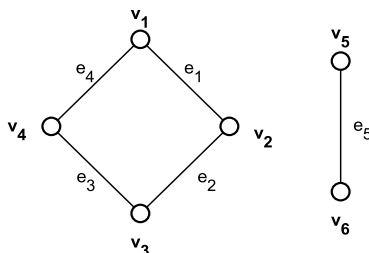


Figura 27 – Grafo do Exemplo 3.2

satisfaz

$$B\mathbf{v} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

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 [22]. Prova-se de modo semelhante que G tem dois ciclos ímpares na mesma componente conexa se e somente se -2 é autovalor de G [23].

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 um 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 1.3, 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 26 encontre $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ tal que $B\mathbf{v} = \mathbf{0}$. 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 e Simić [29] 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 [50] há um capítulo inteiro dedicado aos grafos-linha e em Godsil e Royle [41] há, pelo menos, duas subseções sobre matrizes de incidência.

4 Matriz Laplaciana

A matriz Laplaciana de um grafo e, em especial, seu maior e segundo menor autovalores, desempenham papel relevante em diversas aplicações. Neste capítulo, além das propriedades básicas desta matriz, apresentamos o 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 da matriz Laplaciana. Vemos ainda aplicações do estudo desses autovalores em otimização combinatória, em Química e em Biologia.

4.1 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 da Figura 28, temos*

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

Logo,

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

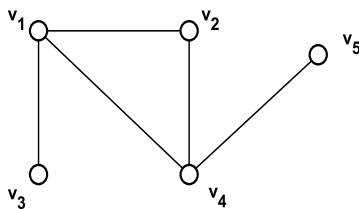


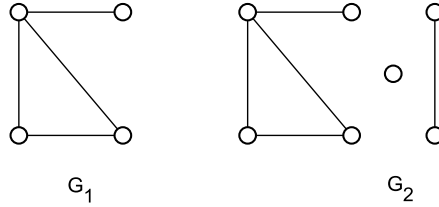
Figura 28 – Grafo do Exemplo 4.1

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 29, 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.

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

Figura 29 – Grafos G_1 e G_2 .

Definição 4.3. *Seja G um grafo. A **matriz β de incidência com respeito a uma orientação** dada 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 β a matriz de incidência de G com respeito a uma orientação dada. Então o posto $r(\beta)$ de β é $n - \omega$, onde ω é o número de componentes conexas de G .*

Demonstração: Sejam G_1, \dots, G_ω as componentes conexas do grafo G , cada G_i com n_i vértices. Então β 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, $n_i - 1$, e portanto, $r(\beta) \leq n - \omega$. 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 $\mathbf{x} \in N((\beta^{(i)})^T)$. Consideremos duas coordenadas x_l e x_k quaisquer de \mathbf{x} , relacionadas respectivamente aos vértices v_l e v_k de G_i . Como G_i é conexo, existe um subconjunto $\{v_{j1}, v_{j2}, \dots, v_{jr}\}$ onde $l = j1$ e $k = jr$, tais que existe uma aresta entre v_{jp} e $v_{j(p+1)}$, para cada $p = 1, 2, \dots, r - 1$. Correspondendo a cada uma das $r - 1$ arestas $\{v_{jp}, v_{j(p+1)}\}$, existe uma coluna \mathbf{c}_p em $\beta^{(i)}$ (não necessariamente a p -ésima) cujas entradas de ordem jp e $j(p+1)$ valem uma 1 e outra -1, sendo as outras iguais a zero. Como $\mathbf{x}^T \beta^{(i)} = \mathbf{0}$, segue-se que $\mathbf{x}^T \mathbf{c}_p = 0$, e daí, $x_{jp} = x_{j(p+1)}$. Mas isto vale para todo $p = 1, 2, \dots, r - 1$. Logo, $x_l = x_k$, para cada l e k . Logo $\mathbf{x} = \alpha \mathbf{1}$, para algum escalar α 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 ω 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 β 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 λ_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 $L\mathbf{1} = \mathbf{0} = 0\mathbf{1}$.

(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 reg-

ular 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 2.1. A prova é também decorrência do Teorema 7.1.

Teorema 4.1. *Seja $G = G(V, E)$ um 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 $j \in \{1, 2, \dots, n-1\}$.*

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

4.2 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 Gustav 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 [10].

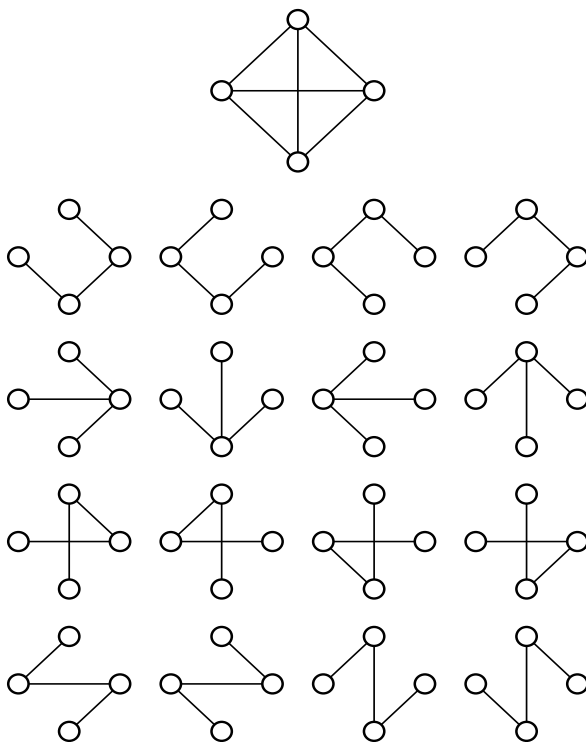


Figura 30 – K_4 e suas 16 árvores geradoras.

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 30, 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 β , 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 $\text{adj}(L)$, 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

$$L.\text{adj}(L) = \det(L).I = 0.I = \mathcal{O}$$

(onde \mathcal{O} é a matriz nula de ordem n), então cada coluna de $\text{adj}(L)$ pertence ao núcleo de L , sendo assim um múltiplo do vetor $\mathbf{1}^T$. Mas L é matriz simétrica; logo $\text{adj}(L)$ é simétrica e tem,

portanto, todas as entradas iguais. O resultado está provado. ■

Lema 4.3. *Qualquer submatriz quadrada de β tem determinante 0, 1 ou -1 .*

Demonstração: Seja S uma submatriz quadrada de β . 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 β e, portanto, o resultado está provado. ■

Lema 4.4. *Considere qualquer submatriz de β 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 β' 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 β' correspondentes às arestas desta componente somam zero (pois cada aresta liga dois vértices da mesma componente), as linhas de β' 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, [50]). 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 β'' que pode ser obtida de β' por permutação de suas linhas. Daí $|\det(\beta')| = |\det(\beta'')|$. Além disso, β'' é uma matriz triangular inferior cujas entradas na diagonal principal são ± 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).

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

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 β_0 a matriz obtida de β 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 [52], 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, β_U denota a submatriz quadrada de β_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 1×1

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 Δ_{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,*

$$L = \begin{bmatrix} n-1 & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & -1 & n-1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & n-1 \end{bmatrix}_n. \quad (4.2.1)$$

Calculando o cofator de ordem 1×1 de L obtemos:

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

$$= \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -1 & n-1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & -1 & n-1 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & n-1 \end{bmatrix}_{(n-1)} \quad (4.2.2)$$

$$= \det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & n & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & n \end{bmatrix}_{(n-1)} = n^{n-2} \quad (4.2.3)$$

A matriz em 4.2.2 foi obtida da anterior somando-se as linhas 2, 3, ..., $n-1$ à primeira linha. Já a matriz em 4.2.3 foi obtida de 4.2.2 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 $JL = LJ = \mathcal{O}$. A seguinte sequência de igualdades, que usa a fórmula final do

Exemplo 4.4, prova então o resultado:

$$(nI - J)(J + L) = nJ + nL - J^2 - JL = nL;$$

$$\text{adj}[(nI - J)(J + L)] = \text{adj}(nL);$$

$$\text{adj}(J + L)\text{adj}(nI - J) = \text{adj}(nL);$$

$$\text{adj}(J + L)n^{n-2}J = n^{n-1}\text{adj}(L);$$

$$\text{adj}(J + L)J = n\tau(G)J;$$

$$(J + L)\text{adj}(J + L)J = (J + L)n\tau(G)J;$$

$$\det(J + L)J = n\tau(G)J^2;$$

$$\det(J + L)J = n^2\tau(G)J;$$

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

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 μ_1, \dots, μ_{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 , $1 \leq i \leq s-1$, λ_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 λ de A é igual a $k - \mu$, onde μ 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

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

obtemos

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

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

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

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*

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

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 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*

$$\sigma_{K_a}(\mu) = (-1)^a p_{K_a}(a - 1 - \mu) (-1)^a (a - \mu^{a-1}(-\mu)) =$$

$$= [(-1)(a - \mu)]^{a-1} \mu = \mu(\mu - a)^{a-1}.$$

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 $\tau(K_{a,b}) = b^{a-1} a^{b-1}$.

4.3 Conectividade algébrica

Definição 4.5. *O segundo menor autovalor do Laplaciano de G , μ_{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 , μ_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 [70]. As Tabelas 1 e 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.

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 1 – Alguns grafos para os quais $a(G)$ é conhecido.

Operações	$a(G)$ e $a(G_i)$, $i = 1, 2$
Grafo complementar \overline{G}	$a(\overline{G}) = n - \mu_1$
$G_1 = G - \{e\}$, e aresta de G	$a(G_1) \leq a(G)$
$G_1 = G - k$ vértices	$a(G) \leq a(G_1) + k$
$G_1 = G + \{e\}$, e aresta de G	$a(G) \leq a(G_1) \leq a(G) + 2$
$G = G_1 \cup G_2$	$a(G) = a(G_1) + a(G_2)$
$G = G_1 \times G_2$	$a(G) = \min\{a(G_1), a(G_2)\}$

Tabela 2 – $a(G')$, para G' um grafo obtido de G .

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 $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_{n-1}$ autovetores associados a $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}$ respectivamente, de modo que \mathbf{w}_i seja ortogonal a $\mathbf{1}$, para todo i , $1 \leq i \leq n-1$. Assim, $\mathbf{1}^T \cdot \mathbf{w}_i = 0$, para todo i , $1 \leq i \leq n-1$. Afirmamos que, para todo i , $1 \leq i \leq n-1$, \mathbf{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, $L(\overline{G})\mathbf{w}_i = (nI - J - L(G))\mathbf{w}_i = nI\mathbf{w}_i - J\mathbf{w}_i - L(G)\mathbf{w}_i = n\mathbf{w}_i - \mathbf{0} - \mu_i\mathbf{w}_i = (n - \mu_i)\mathbf{w}_i$, 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 31.*

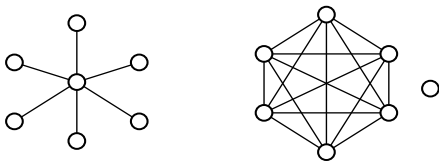


Figura 31 – A estrela $K_{1,6}$ tem $\mu_1 = 7$.

É importante ressaltar que também é possível exibir grafos não isomorfos que são coespectrais em relação à matriz Laplaciana, como mostra a Figura 32.

Veremos agora alguns limites superiores e inferiores para a conectividade algébrica e o índice do Laplaciano, em função de

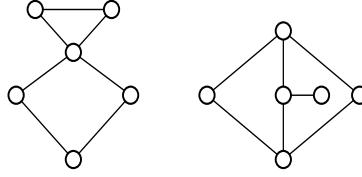


Figura 32 – Grafos Laplacianos-coespectrais não isomorfos.

outros parâmetros de grafos. Vamos inicialmente definir outras medidas de conectividade para 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 [36].

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 da Figura 33 tem conectividade algébrica $a = 0,3820$ e $k = k' = \delta = 1$.

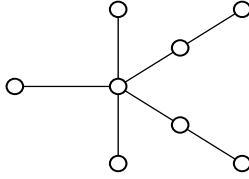


Figura 33 – Grafo do Exemplo 4.10

Kirkland *et al.* [60] caracterizaram os grafos G para os quais $a(G) = k(G)$.

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

Demonstração: Temos que $a(G) = \min\{\mathbf{v}^T L \mathbf{v}; \mathbf{v} \neq \mathbf{0}, \mathbf{v} \perp \mathbf{1}\}$ (pelo Princípio de Rayleigh, ver Corolário 7.3). Consideremos $\tilde{L} = L - a(I - \frac{1}{n}J)$, onde $a = a(G)$. Verificamos que $\tilde{L}\mathbf{1} = \mathbf{0}$. Dado $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, podemos escrever $\mathbf{y} = c_1\mathbf{1} + c_2\mathbf{x}$, onde $\mathbf{x} \in \{\mathbf{1}\}^\perp$ e $\|\mathbf{x}\| = 1$. Logo $\mathbf{y}^T \tilde{L} \mathbf{y} = c_2^2(\mathbf{x}^T L \mathbf{x} - a) \geq 0$. Isto é, \tilde{L} é uma matriz 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 , $\frac{n}{n-1}\Delta(G) \leq \mu_1(G) \leq 2\Delta(G)$.*

Demonstração: A Proposição 4.5 usada para \overline{G} fornece $a(\overline{G}) \leq \frac{n}{n-1}\delta(\overline{G})$. A primeira desigualdade segue daí, fazendo-se as substituições $a(\overline{G}) = n - \mu_1(G)$ e $\delta(\overline{G}) = n - 1 - \Delta(G)$. A outra desigualdade segue do fato de que $\mu_1 = \max_i \mu_i$. Em particular,

$$\mu_1 \leq \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{k=1}^n |L_{ik}| = \max_{1 \leq i \leq n} 2d_i = 2\Delta. \quad \blacksquare$$

A conectividade algébrica está também relacionada com o diâmetro do grafo através da desigualdade $\text{diam}(G) \geq \frac{4}{na(G)}$ [71]. 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 conforme o diâmetro crescia. Grone e Merris [43] deram contraexemplos para essa conjectura. Um deles é apresentado na Figura 34:

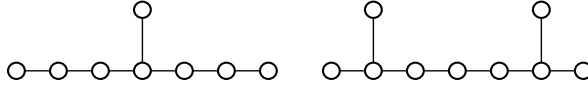


Figura 34 – Contraexemplo de Grone e Merris

4.4 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 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 35, temos que $mc(G_1) = 4$ e $mc(G_2) = 6$.

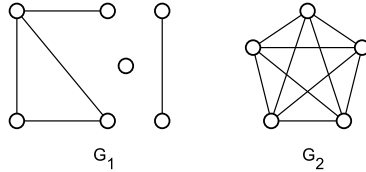


Figura 35 – Grafos do Exemplo 4.11.

No que se segue, considerando G um grafo valorado, $L(G) = (L_{ij})$ 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 $\mu_1 = \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T L \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$ (Princípio de Rayleigh, Corolário 7.1). Dado $S \subset V$, defina $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n]^T$ por

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

onde $s = |S|$. Como $\mathbf{x}^T L \mathbf{x} = \sum_{i,j \in E} c_{ij} (x_i - x_j)^2$,

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

$$\text{e } \mathbf{x}^T \mathbf{x} = s(n-s)^2 + (n-s)s^2 = s(n-s)n,$$

temos que $\mu_1 \geq \frac{nc(\partial(S))}{s(n-s)}$. Isto prova o resultado. ■

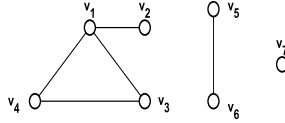


Figura 36 – Grafo do Exemplo 4.12

Exemplo 4.12. Para o grafo G da Figura 36 tem-se $mc(G) = 4$ e $\mu_1 = 4$. Para $S = \{v_1, v_2\}$, tem-se então que $4 \leq 4 \frac{2 \cdot 5}{7}$.

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 (Figura 36), temos

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

4.4.1 Corte maximal e autovalores em certos 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. Diremos que um grafo G de ordem par é **exato** quando $mc(G) = \mu_1 \frac{n}{4}$

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 $E(G)$ de 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 $U = \text{diag}(u_1, u_2, \dots)$, μ_{\max} é o autovalor máximo da matriz $L + U$ e o mínimo é tomado sobre todos os vetores $\mathbf{u} = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n]^T \in \mathbb{R}^n$ satisfazendo $\sum u_i = 0$. A cada vetor \mathbf{u} tal que $\sum u_i \geq 0$ chamamos um **vetor corretor** (a entrada u_i está associada ao vértice i de G).

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

Demonstração: Dado $S \subset V$, defina $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T$ por

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

Então,

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

Mas, $\mathbf{x}^T U \mathbf{x} = \sum u_i x_i^2 = \sum u_i \geq 0$. Se S induz o corte maximal, $4mc(G) = \mathbf{x}^T L \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^T (L + U) \mathbf{x}$, para qualquer vetor corretor \mathbf{u} . Aplicando o Princípio de Rayleigh (Corolário 7.1) ao vetor \mathbf{x} , $4mc(G) \leq \mathbf{x}^T (L + U) \mathbf{x} \leq n \mu_{\max}(L + U)$ ■

Lema 4.9. A função φ da Definição 4.11 é tal que:

- (i) Se cada c_{ij} é multiplicado por algum real k positivo, φ é também multiplicado por k (φ 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 $\varphi(G) \leq \varphi(G')$ (φ é monótona).

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

$$\mathbf{x}^T L_{G'} \mathbf{x} = k \mathbf{x}^T L_G \mathbf{x} \quad \text{e}$$

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

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

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

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

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

Logo

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

Daí,

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

(ii) Para todo vetor \mathbf{x} , temos

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

Isto acarreta

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

Se \mathbf{x} é autovetor de $L_{G'} + U$, $U = \text{diag}(u_1, \dots, u_n)$ qualquer,

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

Se \mathbf{x} é autovetor de $L_G + U$,

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

■

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 $\mathbf{x} = [x_1 \dots x_n]^T$,

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

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

$$\frac{4m}{n} \text{ e } \varphi(G) \leq m.$$

■

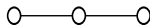


Figura 37 – Grafo do Exemplo 4.14

Exemplo 4.14. Considere o grafo da Figura 37. 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 $u = [-3, 1, 1, 1]^T$ teremos

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

4.5 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.

4.5.1 Carbonos quaternários e grau máximo

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, estabelecida em [46] e que relaciona grau máximo e maior autovalor do Laplaciano,

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

conhecendo μ_1 podemos detectar a presença de carbono quaternário.

Na Figura 38, onde apresentamos as árvores químicas dos isômeros do octano, observamos a presença de carbonos quaternários (correspondendo a $\Delta = 4$), nos casos em que $\mu_1 > 5$.

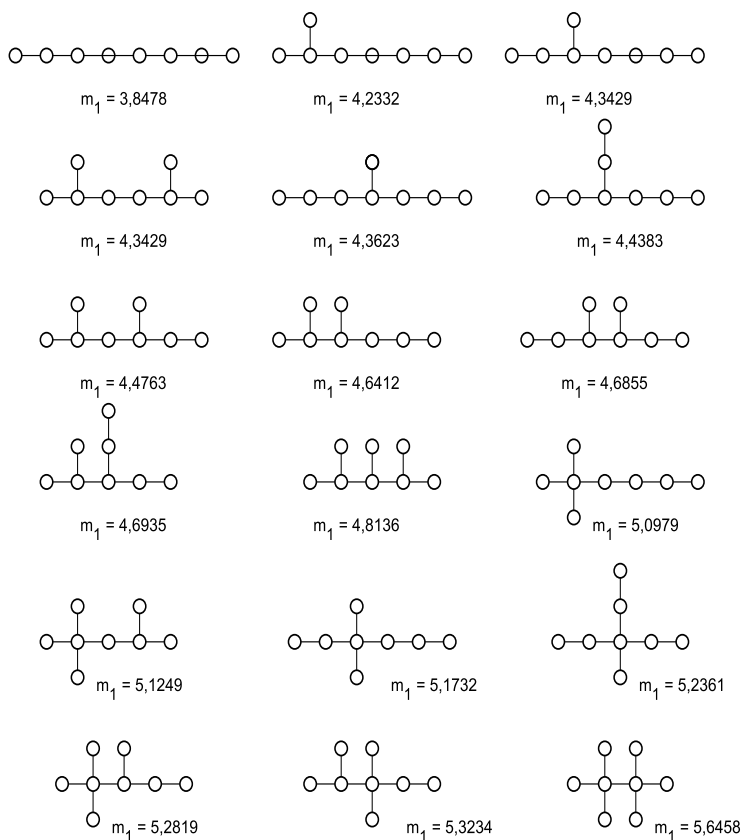


Figura 38 – Isômeros do octano: m_1 é o índice do Laplaciano.

4.5.2 RNA e conectividade algébrica

Este exemplo pode ser encontrado em [59]. O dobramento da molécula de *RNA* mensageiro forma estruturas secundárias e terciárias. Por exemplo, consideremos um *RNA* men-

sageiro de fita simples, cuja sequência de bases nitrogenadas é dada por

C G C U C U G U U U A C C A G G U C A G G U
C C G A A A G G A A G C A G C C A A G G C A G A G C
C C C C

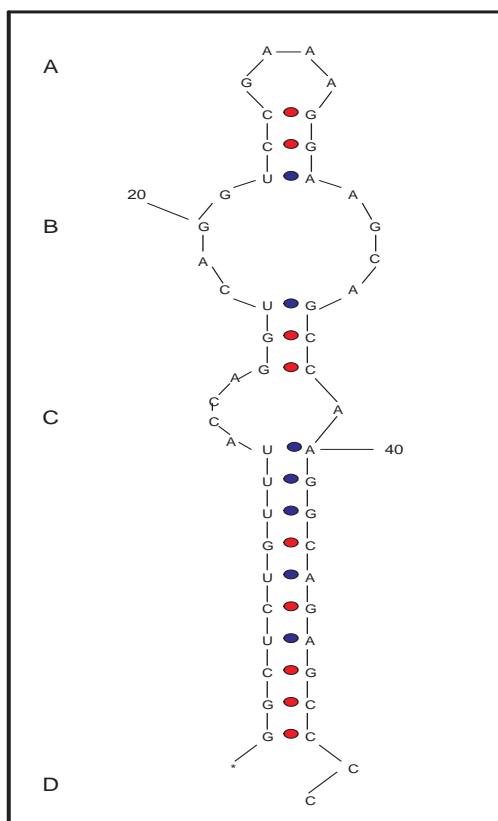


Figura 39 – Estrutura secundária do *RNA*

A estrutura secundária é dada na Figura 39 e corre-

sponde ao grafo da Figura 40.



Figura 40 – Grafo da estrutura secundária do *RNA*.

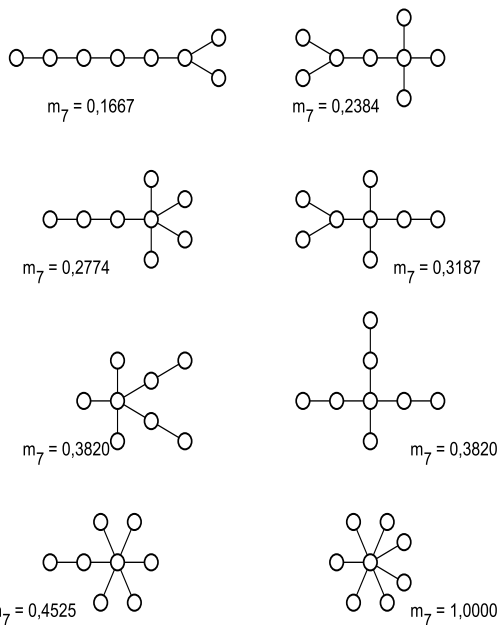


Figura 41 – Árvores de ordem 8 e conec. alg. crescentes.

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: conec-

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

As árvores da Figura 41 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.

4.5.3 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 α e β são constantes empíricas e (μ_1, \dots, μ_n) é o espectro do Laplaciano. Assim, o maior autovalor do Laplaciano representa o primeiro potencial de ionização do respectivo alcano.

4.6 Exercícios

1. Determine o espectro do grafo e o espectro da matriz Laplaciana do grafo G da Figura 42.
2. Determine os espectros da matriz de adjacência e da matriz Laplaciana do grafo G da Figura 43. Em que classe especial de grafos ele se encaixa?

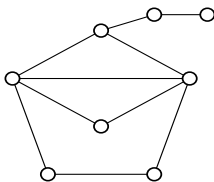


Figura 42 – Grafo do Exercício 1.

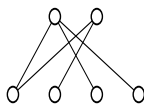


Figura 43 – Grafo do Exercício 2.

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 β a matriz de incidência do grafo orientado. Prove que G é bipartido se e somente se existir uma matriz diagonal M com entradas ± 1 tal que $M\beta = B$.
10. Seja G o grafo cubo dado na Figura 25. Determine as matrizes de incidência B e β , 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 42. Dê uma orientação o_1 para G e determine a matriz de incidência β_{o_1} correspondente a essa orientação. Atribua uma outra orientação o_2 para G e determine β_{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.

4.7 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 de Godsil & Royle [41] e Beineke & Wilson [8]. 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, as propriedades da energia Laplaciana têm sido objeto de estudo de muitos pesquisadores. Para maiores detalhes, além do artigo

original, recomendamos [83], pela lista de referências que contém.

A conectividade algébrica, tratada aqui de modo superficial, tem uma importância grande tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista de aplicações. Em particular, o autovetor associado à conectividade algébrica, chamado vetor de Fiedler [36], desempenha um papel importante, cujas implicações teóricas e práticas estão impressas em centenas de artigos encontrados em dezenas de periódicos de várias áreas. Nas surveys [1, 3] é possível encontrar um guia para a literatura.

5 Matriz Laplaciana sem sinal

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 apresentar neste capítulo a matriz Laplaciana sem sinal, que só mais recentemente despertou interesse dos pesquisadores.

5.1 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, [30] e [84]. De acordo com Cvetković [30], simulações feitas por Dam e Hammers [32] confirmam tais suspeitas. Além disso, Zhu e Wilson [84] estenderam as simulações de Dam e Hammers [32], 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, [4] e [30].

Definição 5.1. *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 .*

Observação 5.1. *A matriz Laplaciana sem sinal $Q(G)$ é simétrica e tem as entradas não-negativas, como a matriz de adjacência. Além disso, se G for conexo, esta matriz é também irredutível. Podemos então usar novamente o Teorema de Perron-Frobenius 7.4, como em relação à matriz $A(G)$, obtendo que, para grafos conexos, q_1 é autovalor simples. Notamos ainda que $q_1 = 0$ se, e somente se, G é um grafo sem arestas.*

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 5.1. *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 $B^TB = A(\ell(G)) + 2I_m$, oriundas dos Lemas 3.1 e 3.2, lembrando que BB^T e B^TB têm os mesmos autovalores não nulos, com as mesmas multiplicidades, pela Proposição 7.1. ■

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 5.2. *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 λ^{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 é 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 λ^{n-1} deste polinômio. Assim, $m = \frac{-p_1}{2}$. ■

A Proposição 5.3 dá um limite superior e outro inferior para o índice de $Q(G)$ em função dos graus dos vértices de G .

Proposição 5.3. *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 $q_1 - 2$, pela Proposição 5.1. 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, pela Proposição 2.4, temos que

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

Daí segue o resultado. ■

Como consequência imediata desta proposição, temos cotas superior e inferior para o índice de $Q(G)$, em função do grau máximo e do grau mínimo de G , em analogia ao que acontece com a matriz de adjacência, como visto na Proposição 2.4, usada na prova acima.

Corolário 5.1. $2\delta \leq q_1(G) \leq 2\Delta$.

Veremos agora dois resultados sobre o Q -espectro de grafos bipartidos.

Proposição 5.4. *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 $UAU^{-1} = -A$ (esta igualdade foi deixada como exercício no capítulo 2). A partir daí, temos que $ULLU^{-1} = U(D - A)U^{-1} = UDU^{-1} - UAU^{-1} = UU^{-1}D - UU^{-1}A = D - (-A) = D + A = Q$. Logo, L e Q são matrizes semelhantes e, por isso, seus polinômios característicos são iguais. Consequentemente, elas têm o mesmo espectro. ■

Para todo grafo G , sabemos que a matriz Laplaciana $L(G)$ é uma matriz positiva semidefinida e singular. Consequentemente, $\mu_n = 0$. 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.

Proposição 5.5 ([30]). *A matriz Laplaciana sem sinal de um grafo G é singular se e somente se G é um grafo bipartido.*

Demonstração: Se Q é singular então Q tem um autovalor nulo. Mas, da Proposição 5.1, 0 é autovalor de Q implica que -2 é autovalor de $\ell(G)$ com multiplicidade pelo menos $m - n + 1$, onde n é a ordem de G e m é o número de suas arestas. Daí, o Teorema 2.2.4 de [29] garante que G é bipartido. No outro sentido, suponhamos que G é bipartido. Segue da Proposição 5.4 que $q_n = \mu_n = 0$. Logo, $\det(Q) = 0$. ■

Para os grafos regulares, a Proposição 5.6, que pode ser encontrada em [30], 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 5.6. *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 $\sigma_G(\lambda) = (-1)^n p_Q(2r - \lambda)$, onde $\sigma_G(\lambda)$ indica o polinômio característico de L .*

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

Temos ainda 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 5.7, [28].

Proposição 5.7. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Então G é regular se e somente se $nq_1 = 4m$. 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 conexo r -regular. Da Proposição 2.7, temos que r é o índice de G e este é um autovalor simples do grafo. Sendo G regular,

$$m = \frac{nr}{2}. \quad (5.1.1)$$

Da Proposição 5.6, $q_1 = 2r$ e este é um autovalor simples de Q . Ao substituírmos $r = \frac{q_1}{2}$ na equação 5.1.1, temos $4m = nq_1$. O número de componentes decorre de que para um grafo regular conexo, q_1 é um autovalor simples de G . ■

5.2 Q -espectro da união, produto cartesiano e “join”

Obteremos o Q -espectro do grafo resultante da união, do produto cartesiano e do *join* a partir dos espectros dos grafos usados na operação. Para as duas primeiras operações temos resultados gerais.

Proposição 5.8. *Sejam G_1 e G_2 grafos com Q -autovalores $q_{1,1}, \dots, q_{1,n}$ e $q_{2,1}, \dots, q_{2,k}$, respectivamente.*

1. *Os Q -autovalores de $G_1 \cup G_2$ são $q_{1,1}, \dots, q_{1,n}, q_{2,1}, \dots, q_{2,k}$;*
2. *Os Q -autovalores de $G_1 \times G_2$ são $q_{1,i} + q_{2,j}$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, k$.*

Demonstração: Seja $Q(G_i)$ a matriz Laplaciana sem sinal de G_i , para $i = 1, 2$. Então:

1. $Q(G_1 \cup G_2) = \begin{bmatrix} Q(G_1) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q(G_2) \end{bmatrix}$ e, portanto, seus autovalores são $q_{1,1}, \dots, q_{1,n}, q_{2,1}, \dots, q_{2,k}$;
2. $Q(G_1 \times G_2) = \begin{bmatrix} Q(G_2) + d_1 \mathbb{I}_k & a_{12} \mathbb{I}_k & \cdots & a_{1n} \mathbb{I}_k \\ a_{21} \mathbb{I}_k & Q(G_2) + d_2 \mathbb{I}_k & \cdots & a_{2n} \mathbb{I}_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} \mathbb{I}_k & a_{n2} \mathbb{I}_k & \cdots & a_{nn} \mathbb{I}_k \end{bmatrix}$

$= Q(G_1) \otimes \mathbb{I}_k + \mathbb{I}_n \otimes Q(G_2)$, onde \otimes indica o produto de Kronecker das matrizes envolvidas. Então, por resultado de Teoria de Matrizes, seus autovalores são $q_{1,i} + q_{2,j}$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, k$ ([69]). ■

No próximo resultado, provado em [33], determinamos o Q -polinômio do grafo $G_1 \vee G_2$, quando G_i é r_i -regular, $i = 1$ e 2 , assim como no caso da matriz de adjacência,.

Teorema 5.1. *Seja G_i um grafo regular de grau r_i com n_i vértices, para $i = 1, 2$. Então o polinômio característico da matriz $Q(G_1 \vee G_2)$ é dado por*

$$P_Q(G_1 \vee G_2, x) = \frac{P_Q(G_1, x - n_2)P_Q(G_2, x - n_1)}{(x - 2r_1 - n_2)(x - 2r_2 - n_1)} f(x),$$

onde $f(x) = x^2 - (2(r_1 + r_2) + (n_1 + n_2))x + 2(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2)$.

Demonstração: Seja G_i um grafo regular de grau r_i com n_i vértices, $i = 1, 2$. Considere $H_1^{(i)}, \dots, H_{k_i}^{(i)}$ as componentes conexas de G_i , $|H_j^{(i)}| = N_j^{(i)}$ e $Q(H_j^{(i)}) = Q_j^{(i)}$, $j = 1, \dots, k_i$. Então, a matriz Laplaciana sem sinal do grafo $G_1 \vee G_2$ pode ser representada na forma

$$Q = Q(G_1 \vee G_2) = \begin{bmatrix} Q(G_1) + n_2 \mathbb{I}_{n_1} & \mathbb{J}_{n_1, n_2} \\ \mathbb{J}_{n_2, n_1} & Q(G_2) + n_1 \mathbb{I}_{n_2} \end{bmatrix},$$

onde

$$Q(G_1) = \begin{bmatrix} Q_1^{(1)} + n_2 \mathbb{I}_{N_1^{(1)}} & \cdots & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & Q_{k_1}^{(1)} + n_2 \mathbb{I}_{N_{k_1}^{(1)}} \end{bmatrix} \text{ e}$$

$$Q(G_2) = \begin{bmatrix} Q_1^{(2)} + n_1 \mathbb{I}_{N_1^{(2)}} & \cdots & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & Q_{k_2}^{(2)} + n_1 \mathbb{I}_{N_{k_2}^{(2)}} \end{bmatrix}.$$

Para $j \in \{1, \dots, k_1\}$, se \mathbf{v} satisfaz $Q_j^{(1)} \mathbf{v} = q \mathbf{v}$, com $q \neq 2r_1$, então \mathbf{v} é ortogonal a $\mathbf{1}_{N_j^{(1)}}$ e

$$\mathbf{w} = [\mathbf{0}_{N_1^{(1)}}^T, \dots, \mathbf{v}^T, \dots, \mathbf{0}_{N_{k_1}^{(1)}}^T, \mathbf{0}_{n_2}^T]^T$$

é tal que

$$Q\mathbf{w} = (q + n_2)\mathbf{w}.$$

Analogamente, para $j \in \{1, \dots, k_2\}$, se \mathbf{u} é tal que $Q_j^{(2)} \mathbf{u} = q \mathbf{u}$, com $q \neq 2r_2$, então \mathbf{u} é ortogonal a $\mathbf{1}_{N_j^{(2)}}$ e

$$\mathbf{z} = [\mathbf{0}_{n_1}^T, \mathbf{0}_{N_1^{(2)}}^T, \dots, \mathbf{u}^T, \dots, \mathbf{0}_{N_{k_2}^{(2)}}^T]^T$$

satisfaz

$$Q\mathbf{z} = (q + n_1)\mathbf{z}.$$

Agora, aplicando o Teorema 7.2 à matriz Q , obtemos

que todos os autovalores de

$$\overline{M} = \begin{bmatrix} 2r_1 + n_2 & \cdots & 0 & N_1^{(2)} & \cdots & N_{k_2}^{(2)} \\ & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 2r_1 + n_2 & N_1^{(2)} & \cdots & N_{k_2}^{(2)} \\ N_1^{(1)} & \cdots & N_{k_1}^{(1)} & 2r_2 + n_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & \\ N_1^{(1)} & \cdots & N_{k_1}^{(1)} & 0 & \cdots & 2r_2 + n_1 \end{bmatrix}$$

são autovalores de Q .

Uma vez que o polinômio característico de \overline{M} é

$$p(x) = (x - 2r_1 - n_2)^{k_1-1} (x - 2r_2 - n_1)^{k_2-1} f(x),$$

onde $f(x) = x^2 - (2(r_1 + r_2) + (n_1 + n_2))x + 2(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2)$, obtemos o resultado desejado. ■

5.3 Grafos Q -inteiros

Uma das vertentes importantes na pesquisa em Teoria Espectral de Grafos é a busca por *grafos integrais*, isto é, grafos cujos autovalores são todos números inteiros. Em 1973, Harary e Schwenk publicaram o artigo *Which graphs have integral spectra?*, [51], despertando o interesse por este tipo de grafo. Eles observaram que uma caracterização geral destes grafos parecia um problema intratável e, desde então, a busca por grafos integrais se dá através de classes especiais de grafos. Mais tarde, em 1994, Grone e Merris, [44] estudaram os *grafos Laplaciano integrais*, isto é, aqueles com espectro relativo à matriz Laplaciana

formado exclusivamente por inteiros. Neste trabalho, eles destacam que parece existir mais grafos Laplaciano-inteiros do que integrais. Só mais recentemente, o problema análogo para matriz Laplaciana sem sinal tem sido abordado, como por exemplo em [76], [75] e [33]. Como aplicação dos resultados da seção anterior, veremos a seguir, alguns resultados sobre grafos Q -inteiros, isto é, grafos cujo Q -espectro é formado apenas por inteiros.

O primeiro resultado, corolário imediato da Proposição 5.6, relaciona os grafos integrais, Laplaciano integrais e Q -inteiros.

Corolário 5.2. (5.6) *Seja G grafo r -regular. G é integral $\iff G$ é Laplaciano integral $\iff G$ é Q -integral.*

Exemplo 5.1. *Os grafos completos, como são regulares, fornecem uma coleção infinita de grafos que são simultaneamente integrais, Laplacianos integrais e Q -inteiros. O Q -espectro do grafo K_n é $Sp(Q(K_n)) = (2n - 2, (n - 2)^{(n-1)})$.*

O próximo resultado, consequência imediata da Proposição 5.8, garante que as operações de união e produto cartesiano preservam Q -integralidade.

Corolário 5.3. *Sejam G_1 e G_2 grafos Q -inteiros. Então $G_1 \times G_2$ e $G_1 \cup G_2$ são Q -inteiros.*

No próximo resultado, consequência de 5.1 estabelece-mos condições necessárias e suficientes para que o *join* de grafos regulares seja Q -integral.

Corolário 5.4. *Se G_i , $i = 1, 2$, é um grafo regular de grau r_i com n_i vértices, então $G_1 \vee G_2$ é Q -integral se, e só se, G_1 e G_2 são Q -inteiros e a expressão $((2r_1 - n_1) - (2r_2 - n_2))^2 + 4n_1n_2$ é um quadrado perfeito.*

Demonstração: Segue do teorema anterior que $G_1 \vee G_2$ é Q -integral se, e só se, G_1 e G_2 são Q -integrais e as raízes de

$$f(x) = x^2 - (2(r_1 + r_2) + (n_1 + n_2))x + 2(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2)$$

são inteiras. Assim, $G_1 \vee G_2$ é Q -integral se, e só se, G_1 e G_2 são Q -integrais e

$$\frac{(2r_1 + 2r_2 + n_1 + n_2)}{2} + \frac{\pm \sqrt{(2r_1 + 2r_2 + n_1 + n_2)^2 - 8(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2)}}{2}$$

são números inteiros.

Uma vez que $2r_1 + 2r_2 + n_1 + n_2$ e $(2r_1 + 2r_2 + n_1 + n_2)^2 - 8(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2)$ têm a mesma paridade, para que as raízes de $f(x)$ sejam inteiras é necessário e suficiente que $(2r_1 + 2r_2 + n_1 + n_2)^2 - 8(2r_1r_2 + r_1n_1 + r_2n_2) = ((2r_1 - n_1) - (2r_2 - n_2))^2 + 4n_1n_2$ seja um quadrado perfeito. ■

Exemplo 5.2. O grafo $K_5 \vee \overline{K_9}$, da Figura 44 é Q -integral.

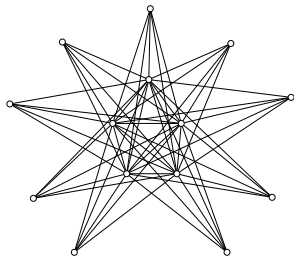


Figura 44 – $K_5 \vee \overline{K_9}$ é um grafo Q -integral

Observação 5.2. Se G_1 e G_2 são grafos regulares Q -integrals de mesmo grau r , então $G_1 \vee G_2$ é Q -integral pois $((2r - n_1) - (2r - n_2))^2 + 4n_1n_2 = (n_1 + n_2)^2$.

Através dos dois corolários anteriores, podemos construir novos grafos Q -integrals, partindo de grafos Q -integrals conhecidos. Temos ainda que, para grafos regulares, o complementar de um grafo Q -integral é Q -integral (a prova desta afirmação será deixada como exercício). Mas, ao contrário da matriz Laplaciana, o complementar de um grafo Q -integral pode não ser Q -integral.

Exemplo 5.3. A Figura 45 mostra o grafo Q -integral G e seu complementar \overline{G} , cujos Q -espectros são $Sp(Q(G)) = (5, 4, 2, 1^{(3)})$ e $Sp(Q(\overline{G})) = (\frac{7+\sqrt{17}}{2}, 3^{(3)}, \frac{7-\sqrt{17}}{2}, 0)$.

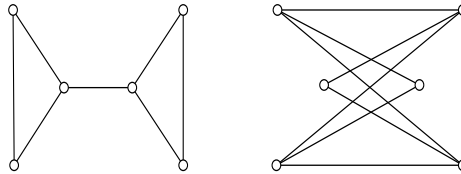


Figura 45 – G é Q -integral mas \overline{G} não é.

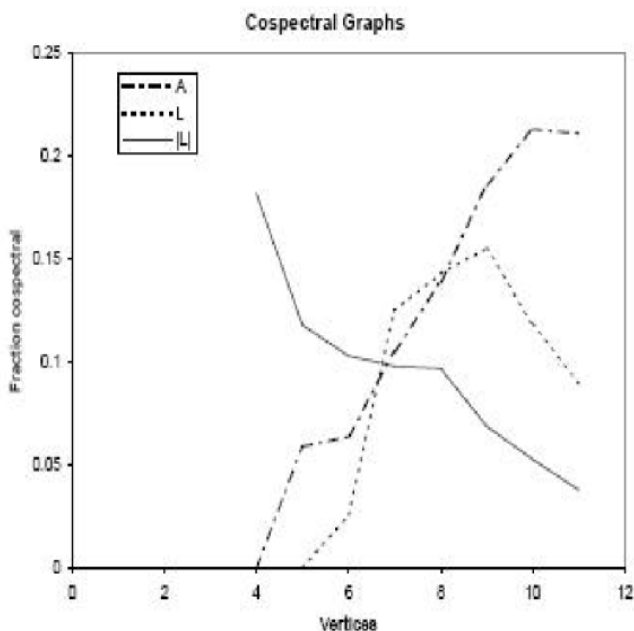
5.4 Coespectralidade e aplicações

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 [84], 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.

Definição 5.2. *Se dois grafos G e H são não isomorfos e co-espectrais 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 [30], a razão $\frac{|\mathcal{G}_n^*|}{|\mathcal{G}_n|}$ é chamada de **incerteza coespectral de ordem n com respeito a M** .*

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 3 – Incertezas coespectrais de A e Q , G até 11 vértices.Figura 46 – Índice de incerteza: G coespectrais até 11 vértices.

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 [30], estão na Tabela 3. A incerteza coespectral com respeito à matriz Laplaciana, denotada por ℓ_n , será utilizada mais adiante na Tabela 4. De acordo com

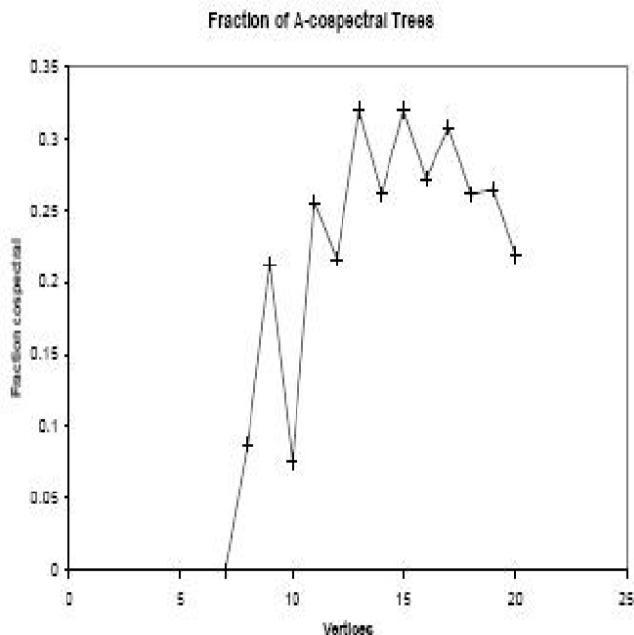


Figura 47 – Índice de incerteza de $A(G)$, G até 21 vértices.

[84], 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 46 e a Tabela 3. 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 [84], 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, [84], decidiram estender as simulações feitas anteriormente pelos pesquisadores já citados e investigaram a coespectralidade das árvores de até 21 vértices. Veja as Figuras 47 e 48 e a Tabela 4.

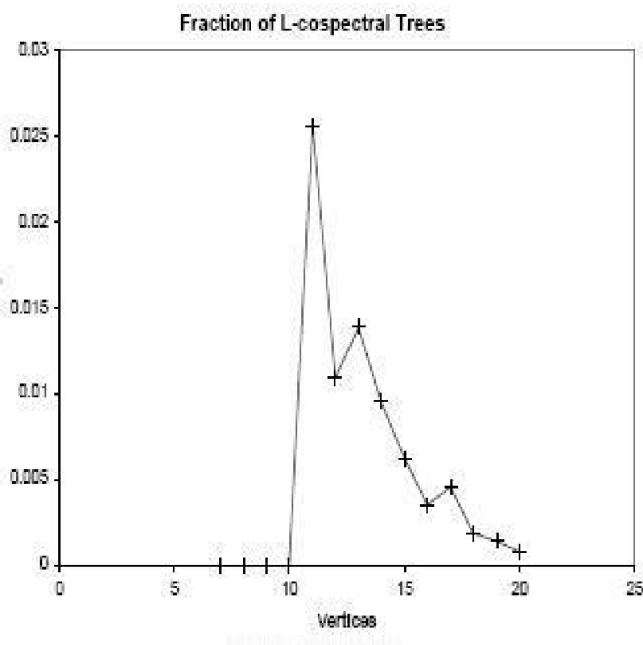


Figura 48 – Índice de incerteza de $L(G)$ com G até 21 vértices.

Como as árvores são grafos bipartidos, segundo a Proposição 5.4, seus espectros em relação às matrizes Laplaciana e Lapla-

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 4 – Índices coespectrais para $A(T)$, $L(T)$ e $A(T) \& L(T)$.

ciana 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 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 4 discretiza os resultados ilustrados nas Figuras 47 e 48, [84].

Naturalmente que os índices coespectrais r_n e ℓ_n , nas 3ª e 4ª colunas da Tabela 4, 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, [84], parecem confirmar aqueles de Haemers e Spence. A última coluna da Tabela 4 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 correlacionados 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.

5.5 Exercícios

1. 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 $p_1 = -1950$?
2. 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 λ_1 da matriz de adjacência $A(G)$ e o índice μ_1 da matriz Laplaciana $L(G)$.
3. 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 4.

4. 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 3.
5. Seja G um grafo r -regular e Q -integral. Prove que \overline{G} é Q -integral.

5.6 Notas bibliográficas

Este capítulo trata da matriz Laplaciana sem sinal, que ao contrário das matrizes tratadas nos capítulos anteriores, ainda é pouco (ou quase nada) abordada nos livros de Teoria Algébrica e/ou Espectral dos Grafos. No entanto, o interesse pelo seu estudo, para descobrir como ela pode determinar propriedades estruturais dos grafos, vem crescendo muito nos dias atuais. Isto se deve às aplicações práticas em Ciência da Computação que, cada vez mais, vêm se utilizando de invariantes decorrentes dessa matriz. Assim, as recomendações que fazemos se limitam a artigos.

Segundo Cvetković, Rowlinson & Simić [30], tendo em vista as simulações feitas em [32] e [84], 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, [25], [26] e [27]. Temos ainda o texto de Zhu e Wilson [84], 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.

6 Algoritmos de Localização de Autovalores

Neste capítulo descrevemos uma metodologia para localizar autovalores de certas matrizes simétricas. Esse método, baseado na diagonalização dessas matrizes e na Lei da Inércia de Sylvester, permite que se determine o número de autovalores em um dado intervalo. Várias aplicações dessa técnica de localização serão apresentadas. O algoritmo que descrevemos é muito eficiente quando aplicado a matrizes associados a algumas classes de grafos, em particular árvores e grafos threshold.

6.1 Motivação

Dada uma classe \mathcal{C} de matrizes simétrica reais, gostaríamos de poder localizar eficientemente os autovalores de uma matriz $A \in \mathcal{C}$. O propósito deste capítulo é descrever um procedimento geral que tem sido usado para matrizes de adjacências de árvores [55], para matrizes de adjacências de grafos threshold [58], para matrizes Laplacianas de árvores [39, 16], para matrizes distâncias de grafos threshold [57] e para matrizes Laplacianas normalizadas de árvores [15]

Lembremos, antes de mais nada, a definição de congruência de matrizes.

Definição 6.1. Dizemos que duas matrizes R e S são *congruentes* se existe uma matriz não singular P que satisfaz $R =$

$P^T SP$.

Para nosso propósito, a importância de matrizes congruentes está no seguinte resultado, chamado de Lei da Inércia de Sylvester, cuja prova pode ser encontrada no Apêndice, Teorema 7.3.

Teorema 6.1. *Duas matrizes reais simétricas de ordem $n \times n$ são congruentes se e somente se elas têm o mesmo número de autovalores negativos e o mesmo número de autovalores positivos.*

Agora suponhamos que existe um algoritmo `+Diagonalize+` que dado como input uma matrix $n \times n$ A , e um escalar $x \in \mathbb{R}$, `+Diagonalize+(A,x)` dá como output uma matriz diagonal D congruente a $B_x = A + xI$. Usando a Lei de Sylvester da Inércia, é fácil provar [58, Teo. 3] o seguinte resultado.

Teorema 6.2. *Seja $D = \text{Diagonalize}(A, -x)$.*

1. *O número de entradas positivas de D é o número de autovalores de A maiores que x .*
2. *O número de entradas negativas de D é o número de autovalores de A menores que x .*
3. *O número de entradas nulas de D é a multiplicidade de x como autovalor de A .*

Assim, segue como consequência imediata o seguinte

Corolário 6.1. *Contando multiplicidades, o número de autovalores de A no intervalo $(\alpha, \beta]$, é o número de entradas positivas na diagonalização de $B_{-\alpha}$, menos o número de entradas positivas na diagonalização de $B_{-\beta}$.*

Essa observação mostra que podemos determinar o número de autovalores de A em um intervalo fazendo duas chamadas para o algoritmo `+Diagonalize+` como mostrado na Figura 49.

```

Algorithm RootCount( $G, \alpha, \beta$ )
   $d1 \leftarrow$  the diagonal computed by Diagonalize+( $G, -\alpha$ )
   $d2 \leftarrow$  the diagonal computed by Diagonalize+( $G, -\beta$ )
  return  $|\{i \mid d1(i) > 0\}| - |\{i \mid d2(i) > 0\}|$ 

```

Figura 49 – Número de autovalores em $(\alpha, \beta]$.

Se sabemos que o intervalo $(\alpha, \beta]$ contém pelo menos um autovalor, então podemos localizar o maior autovalor do intervalo por um algoritmo do tipo *divide-e-conquista* como o da Figura 50, que localiza o maior autovalor com uma precisão desejada ϵ .

O número de iterações executadas pelo algoritmo `LocateRightmost` é uma função logarítmica do tamanho do intervalo. Assim, se o algoritmo `Diagonalize` é linear, então, com um intervalo de tamanho k , podemos aproximar um autovalor com tempo de execução $O(n \log(k))$.

Não queremos aqui discutir as potencialidades numéricas de um (ainda hipotético!) algoritmo para localizar autovalores. Queremos chamar atenção que tal algoritmo depende fundamentalmente de um procedimento eficiente de diagonalização de matrizes.

O restante deste capítulo é devotado ao desenvolvimento de tal procedimento. Primeiramente faremos a apresentação para a classe de matrizes de adjacência de árvores. A seguir faremos o desenvolvimento para grafos *threshold*. Também desenvolvemos

```

Algorithm LocateRightmost( $G, \alpha, \beta$ )
  do
     $\gamma \leftarrow (\alpha + \beta)/2$ 
    if RootCount( $G, \gamma, \beta$ ) > 0
       $\alpha \leftarrow \gamma$ 
    else
       $\beta \leftarrow \gamma$ 
  while  $\beta - \alpha > \epsilon$ 
  return  $\gamma$ 

```

Figura 50 – Localizando o maior autovalor.

algumas aplicações dos algoritmos, assim como apontaremos na literatura outras extensões e/ou aplicações desse procedimento.

6.2 Adjacência de árvores

Seja T uma árvore com n vértices e matriz de adjacência A . Consideremos a matriz $B_\alpha = A + \alpha I$ para um escalar α . Vamos desenvolver um algoritmo para diagonalizar a matriz B_α . Mais precisamente, queremos determinar uma matriz diagonal D que seja *congruente* a B_α .

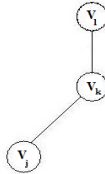


Figura 51 – Vértice v_k com filho v_j e pai v_l

A árvore tem uma raiz que pode ser um vértice arbitrário, mas a numeração dos vértices v_1, \dots, v_n deve ser tal que se v_i é um filho de v_k então $k < i$. Portanto a raiz é sempre v_1 . Para cada vértice v , armazenamos seu valor diagonal $d(v)$. Inicialmente, $d(v) = \alpha$, para todo $v \in V$.

Como ilustração, consideremos um vértice v_k com filho(s) v_j como na Figura 51, cuja porção da matriz B_α é

$$\begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ \dots & a_{kk} & \dots & 1 & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \dots & 1 & \dots & a_{jj} & \dots \\ & & & \vdots & \end{bmatrix}$$

Se um pai v_k tem todos os filhos com elementos não nulos na diagonal, cada filho pode ser usado para anular seus dois elementos não nulos fora da diagonal. Por exemplo, se o vértice v_j , com pai v_k tem valor na diagonal $d(v_j) \neq 0$, então as seguintes operações linha e coluna removem os 1's nas entradas kj e jk .

$$R_k \leftarrow R_k - \frac{1}{d(v_j)} R_j$$

$$C_k \leftarrow C_k - \frac{1}{d(v_j)} C_j$$

o que resulta na matriz

$$\begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ \dots & a_{kk} - \frac{1}{a_{jj}} & \dots & 0 & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \dots & 0 & \dots & a_{jj} & \dots \\ & & & \vdots & \end{bmatrix}$$

É importante observar que a ordem dos vértices impede que a matriz adquira entradas não nulas onde antes eram nulas. Assumindo que todos os filhos c do vértice v têm elementos diagonais não nulos, então, coletivamente, o valor de $d(v)$ é alterado de acordo com

$$d(v) \leftarrow d(v) - \sum_{c \in C} \frac{1}{d(c)}. \quad (6.2.1)$$

A dificuldade de diagonalização surge quando algum dos filhos v_j de v_k tem $d(v_j) = 0$. Assumimos agora que v_i e v_j são filhos de v_k , cujo pai é v_l . Um dos filhos (digamos) v_j tendo $d(v_j) = 0$ é selecionado.

O vértice v_j pode ser usado para anular os dois elementos não nulos fora da diagonal de qualquer outro filho v_i da seguinte maneira.

$$R_i \leftarrow R_i - R_j$$

$$C_i \leftarrow C_i - C_j$$

O vértice v_j é então usado para anular as duas entradas que representam a aresta entre v_k e seu pai v_l :

$$R_l \leftarrow R_l - R_j$$

$$C_l \leftarrow C_l - C_j$$

Estas duas últimas operações de fato desconectam o grafo, removendo a aresta entre v_k e seu pai v_l . Mas isso não causa problemas. Neste momento a submatriz com linhas e co-

lunas i, j, k, l foi transformada da seguinte forma.

$$\begin{array}{c} l \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \alpha & 1 & & \\ 1 & \alpha & 1 & 1 \\ & 1 & 0 & \\ & & 1 & c \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{array}{c} l \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & & \\ 0 & \alpha & 1 & 0 \\ & 1 & 0 & \\ & & 0 & c \end{bmatrix}$$

A seguir, as seguintes operações

$$R_k \leftarrow R_k - \frac{\alpha}{2} R_j$$

$$C_k \leftarrow C_k - \frac{\alpha}{2} C_j$$

produzem:

$$\begin{array}{c} l \\ k \\ j \\ i \end{array} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & & \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ & 1 & 0 & \\ & & 0 & c \end{bmatrix}$$

E finalmente as operações

$$R_j \leftarrow R_j + R_k$$

$$C_j \leftarrow C_j + C_k$$

$$R_k \leftarrow R_k - \frac{1}{2} R_j$$

$$C_k \leftarrow C_k - \frac{1}{2} C_j$$

conduzem à forma diagoanalizada

$$\begin{matrix} l \\ k \\ j \\ i \end{matrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & & & \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \\ & 0 & 2 & & \\ & & 0 & c & \end{bmatrix}$$

Os valores 2 e $-\frac{1}{2}$ não são particularmente importantes mas sim o sinal deles. O resultado final é que $d(v_j) = 2$ e $d(v_k) = -\frac{1}{2}$. Se v_k não é a raiz da árvore, então a aresta incidente ao seu pai é removida. Os outros filhos de v_k não são afetados pelas operações, incluindo outros com valor diagonal zero.

Uma observação extremamente importante é que, embora tenhamos usado a matrix para justificar o procedimento, o algoritmo necessita somente dos valores da diagonal. Assim, se rotularmos os vértices com os valores diagonais, ele pode ser executado diretamente na árvore, procedendo de “baixo para cima” (das folhas para a raiz), de acordo o algoritmo da Figura 52.

As justificativas acima mostram a validade do seguinte teorema.

Teorema 6.3. *Para uma árvore T com matriz de adjacências A e um número real α , o algoritmo **Diagonalize** determina uma matriz diagonal D que é congruente a $A + \alpha I$.*

Input: tree T , scalar α

Output: diagonal matrix D congruent to $A(T) + \alpha I$

Algorithm Diagonalize(T, α)

 initialize $d(v) := \alpha$, for all vertices v

 order vertices bottom up

 for $k = 1$ to n

 if v_k is a leaf then continue

 else if $d(c) \neq 0$ for all children c of v_k then

$d(v_k) := d(v_k) - \sum \frac{1}{d(c)}$, summing over all children of v_k

 else

 select one child v_j of v_k for which $d(v_j) = 0$

$d(v_k) := -\frac{1}{2}$

$d(v_j) := 2$

 if v_k has a parent v_l , remove the edge $v_k v_l$.

 end loop

Figura 52 – Diagonalizando $A + \alpha I$.

6.3 Aplicações para árvores

Primeiramente vamos ilustrar a aplicação do algoritmo apresentando alguns exemplos.

6.3.1 Exemplo

Exemplo 6.1. *Consideremos a árvore mostrada no lado esquerdo da Figura 53. Colocando $\alpha = 0$, diagonalizamos a matrix de acordo com o algoritmo, obtendo a floresta do lado direito da figura. Concluimos que a árvore original tem dois autovalores positivos e um nulo. O cálculo da Figura 54 mostra que não*

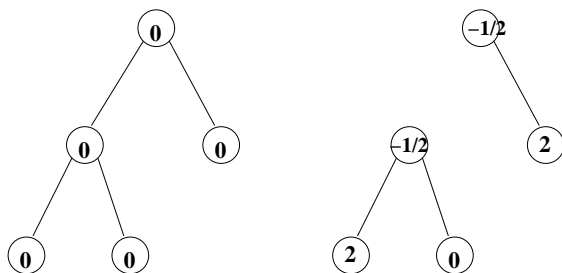


Figura 53 – Dois autovalores positivos.

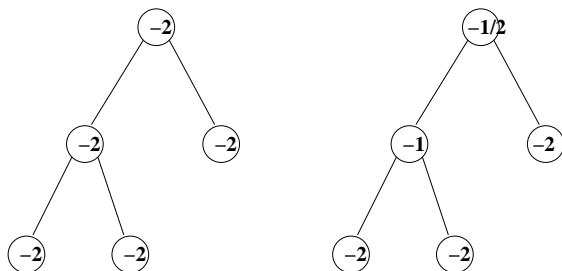


Figura 54 – Todos os autovalores menores que 2.

há autovalores maiores ou iguais a 2. Na aplicação do algoritmo mostrado na Figura 55, vemos que um autovalor positivo é maior que 1 e na Figura 56 podemos ver que dois são maiores que $\frac{1}{2}$. Podemos concluir que um autovalor positivo está em $(\frac{1}{2}, 1)$ e um está em $(1, 2)$. Pode-se mostrar que os autovalores da árvore são $0, \pm\sqrt{2 \pm \sqrt{2}}$.

Vamos agora fazer uma aplicação típica do algoritmo, ilustrando como uma análise qualitativa permite a obtenção de resultados não sobre um grafo em particular, mas sobre uma classes de grafos.

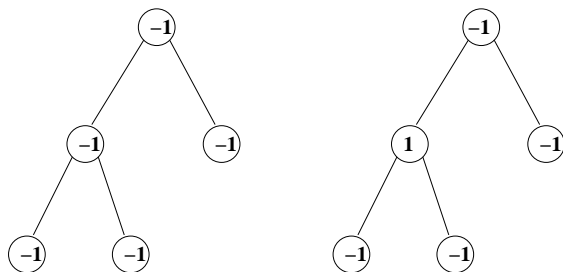
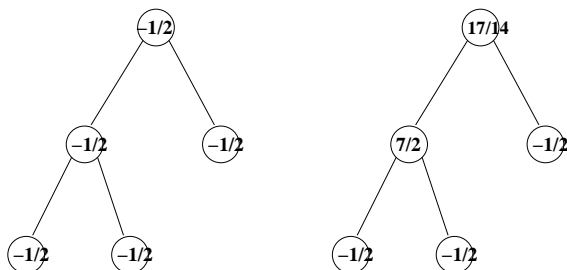


Figura 55 – Um autovalor maior que 1.

Figura 56 – Dois autovalores maiores que $\frac{1}{2}$.

6.3.2 Centopeias

Definição 6.2. *Uma centopeia é uma árvore cuja remoção das folhas a transforma em um caminho.*

As folhas (pendentes) de uma centopeia são chamadas de pernas e os vértices não pendentes de nós dorsais. Em geral, uma centopeia pode ser definida como $T(b, k)$ onde $b \in \mathbb{N}$ é o número de nós dorsais e $k = (k_1, \dots, k_b) \in \mathbb{N}^b$ denota a quantidade de pernas para cada nó dorsal.

Teorema 6.4. [55] *Em uma centopeia, qualquer autovalor não*

nulo é simples. Além disso, uma centopeia com b nós dorsais tem b autovalores positivos e b negativos.

Demonstração: Vamos assumir que a raiz é o nó dorsal mais à direita e vamos diagonalizar da esquerda para a direita.

Seja λ um autovalor não nulo de uma centopeia. Sabemos que pelo menos um valor 0 deve aparecer na diagonal. Como inicialmente é atribuído $\lambda \neq 0$ às pernas e isso nunca muda, o valor zero deve aparecer em um nó dorsal. Se um zero aparece em um nó dorsal, o algoritmo muda para 2, a menos que isso ocorra na raiz (último estágio) e, nesse caso, isso fica inalterado. Assim somente um zero ocorre na diagonal e pelo Teorema 6.2(iii), λ é simples. Para provar o segundo enunciado, seja $\alpha = 0$, e observemos que o algoritmo produzirá exatamente b valores positivos e b valores negativos. Isso está ilustrado na Figura 57. ■

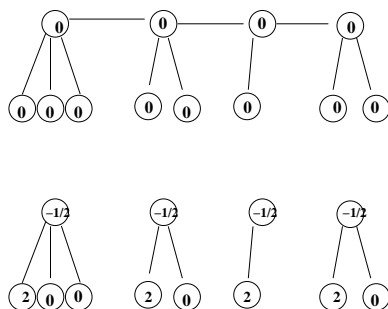


Figura 57 – Centopeia diagonalizada com $\alpha = 0$

Corolário 6.2. *Seja C uma centopeia com b nós dorsais e grau máximo Δ . Se $b > 2\sqrt{\Delta - 1}$ então C tem um autovalor não inteiro.*

Demonstração: Pelo Teorema 6.4, C tem b autovalores positivos e distintos. É sabido [61, Proposition 3.1 (iii)] que eles são limitados por $2\sqrt{\Delta - 1}$. Como existem exatamente $\lfloor 2\sqrt{\Delta - 1} \rfloor$ inteiros positivos nesse intervalo e $b > \lfloor 2\sqrt{\Delta - 1} \rfloor$, pelo princípio da casa dos pombos, pelo menos um autovalor deve ser não inteiro. ■

6.4 Adjacências de grafos threshold

Nesta seção apresentaremos um algoritmo de ordem $O(n)$ para construir uma matrix diagonal congruente a $A + xI$, para qualquer numero real x , onde A é matriz de adjacências de um grafo threshold.

Cabe ressaltar que, diferentemente de árvores, que têm poucas arestas e portanto suas matrizes de adjacências são esparsas, os grafos threshold podem ter muitas arestas, implicando matrizes densas. Note-se que a quantidade de entradas (não) nulas de uma matriz é considerada uma medida da dificuldade de se operar com ela. Quanto mais entradas não nulas, maior é a dificuldade. Nesse sentido, determinar um algoritmo eficiente (com tempo de execução de $O(n)$) para matrizes de grafos threshold é um desafio maior. Por outro lado, isso se torna possível porque exploramos de forma eficiente a estrutura bastante particular que esta classe de grafos apresenta, como veremos a seguir.

Os grafos threshold foram introduzidos por Chvátal e Hammer [20] nos anos 70. Eles são uma importante classe de grafos devido às várias aplicações em psicologia, sincronização de processos paralelos e outros [65]. Provavelmente por esta razão, eles aparecem na literatura com vários nomes equivalentes.

Existem muitas formas de definir os grafos threshold, mas para nosso propósito usaremos a caracterização através de uma sequência binária, que é um processo recursivo que inicia com um vértice isolado e que, a cada passo, ou um novo vértice isolado é adicionado ou um vértice adjacente a todos os vértices anteriores é adicionado (vértice dominante). Assim, para definirmos um grafo threshold G com n vértices, podemos considerar uma sequência de tamanho n composta por caracteres 0 e 1. Denotaremos por 0 sempre como o primeiro caracter da sequência; ele representa o primeiro vértice do grafo. A seguir cada 0 representa a adição de um vértice isolado e 1, a adição de um vértice dominante. O número de caracteres 1 na sequência, é chamado de traço do grafo, indica o número de vértices dominantes.

Definição 6.3. *Um grafo threshold $G = (V, E)$ de ordem n é definido por uma sequência binária (b_1, b_2, \dots, b_n) , onde $b_i = 0$, representa adição de um vértice isolado e $b_i = 1$, representa adição de um vértice dominante.*

Exemplo 6.2. *A Figura 6.4, mostra a construção de um grafo threshold $G = (V, E)$ que começa com 3 vértices isolados, seguido de 1 vértice dominante, 4 vértices isolados e 1 vértice final dominante. A sequência binária que representa o grafo threshold G é $(0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1)$ e seu traço é igual a 2.*

Podemos construir a matriz de adjacências A de um grafo threshold G através da sequência binária associada a G , fazendo a enumeração dos vértices a mesma da sequência binária. Por exemplo a matriz de adjacência do grafo threshold G repre-

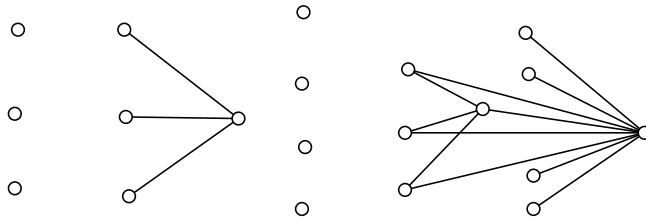


Figura 58 – Construção de um grafo threshold

sentado por $(0, 0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1)$ é

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

Seja G um grafo threshold com sequência binária (b_1, \dots, b_n) , e seja $A = [a_{ij}]$ sua matriz de adjacência. É fácil ver que se $b_i = 1$, as entradas $a_{ij} = a_{ji} = 1$, para $i < j$. E se $b_i = 0$, $a_{ij} = a_{ji} = 0$, para $i < j$.

6.4.1 Diagonalizando $A + xI$

O algoritmo de diagonalização para grafos threshold G constrói uma matriz diagonal D congruente a $A + xI$, onde A é a

matriz de adjacência de um grafo threshold G e x é um número real.

Assumimos que A é de ordem n , o algoritmo executa $n - 1$ passos e funciona na matriz de baixo para cima e da direita para esquerda. Em cada passo, as linhas e colunas m e $m - 1$ participam nas operações linha e coluna. A diagonalização é obtida pelo fato que no fim de cada passo, todas as entradas da linha e coluna m serão nulas com exceção do elemento da diagonal.

Após $n - m$ passos do algoritmo, a matriz parcialmente diagonalizada é da forma exibida na figura 3.2. O objetivo do passo seguinte é remover os v 's da linha e coluna m . Note que se $v = 0$, não precisamos fazer nada.

$$\begin{bmatrix} & & & u & v & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & \vdots & & & \\ & & & u & v & & & \\ u & \cdots & u & x & v & \vdots & & \vdots \\ v & \cdots & v & v & \alpha & 0 & & 0 \\ 0 & & & & 0 & \delta_{m+1} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & & 0 & \cdots & 0 & \delta_n \end{bmatrix}.$$

O nosso algoritmo constrói uma matriz diagonal D congruente a $B_x = A + xI$, onde A é a matriz de adjacência de um grafo threshold G , e x é um número real. Mais precisamente, a cada passo, nosso procedimento sempre que executa uma operação elementar na k -ésima linha, executa a mesma operação na k -ésima coluna, o que garante que a matriz resultante é congruente à matriz original.

Dessa forma, precisamos focar somente na submatriz restante $m \times m$. Consideremos a sequência binária de G dada por (b_1, b_2, \dots, b_n) . Nosso algoritmo considera três casos principais.

Caso 1: $b_{m-1} = b_m = 1$. Então a submatriz tem a seguinte forma:

$$\begin{array}{cc} & \begin{bmatrix} & & & 1 & 1 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & 1 \\ m-1 & 1 & \dots & 1 & x & 1 \\ m & 1 & \dots & 1 & 1 & \alpha \end{bmatrix} \end{array}$$

Fazendo as operações nas linhas e colunas

$$l_m \leftarrow l_m - l_{m-1}$$

$$C_m \leftarrow C_m - C_{m-1},$$

a maior parte dos elementos não nulos da linha e coluna m foram removidos, conforme a matriz abaixo ilustra. Agora devemos remover as duas entradas iguais $1 - x$. Assim existem três subcasos, dependendo se $\alpha + x - 2 \neq 0$ e se $x = 1$.

$$\begin{array}{cc} & \begin{bmatrix} & & & 1 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \\ m-1 & 1 & \dots & 1 & x & 1-x \\ m & 0 & \dots & 0 & 1-x & \alpha+x-2 \end{bmatrix} \end{array}$$

Subcaso 1a: $\alpha + x - 2 \neq 0$. Então podemos proceder com as seguintes operações:

$$l_{m-1} \leftarrow l_{m-1} - \frac{1-x}{\alpha+x-2} l_m$$

$$C_{m-1} \leftarrow C_{m-1} - \frac{1-x}{\alpha+x-2} C_m,$$

obtendo

$$\begin{matrix} & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ m-1 & & & & & \\ & & & & & \\ m & & & & & \end{matrix} \begin{bmatrix} & & & 1 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \\ & 1 & \dots & 1 & \gamma & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha+x-2 \end{bmatrix}$$

onde $\gamma = x - \frac{(1-x)^2}{\alpha+x-2} = \frac{\alpha x - 1}{\alpha+x-2}$.

Subcaso 1b: Se $\alpha + x = 2$ e $x = 1$, então a submatriz é da forma:

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

ou seja, já está na forma desejada.

Subcaso 1c: Se $\alpha + x - 2 = 0$ e $x \neq 1$, então a matriz é da forma

$$\begin{bmatrix} & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & 1 & \dots & 1 & x & 1-x \\ 0 & \dots & 0 & 1-x & 0 & \end{bmatrix}$$

Como $1 - x \neq 0$, para cada $i, 1 \leq i \leq m - 2$ fazemos

$$l_i \leftarrow l_i - \frac{1}{1-x} l_m$$

$$C_i \leftarrow C_i - \frac{1}{1-x} C_m.$$

Isso anula os 1's na coluna $m - 1$ e linha $m - 1$:

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & x & 1-x \\ 0 & \dots & 0 & 1-x & 0 \end{bmatrix}$$

Fazendo as seguintes operações

$$l_{m-1} \leftarrow l_{m-1} + \frac{1}{2} l_m$$

$$C_{m-1} \leftarrow C_{m-1} + \frac{1}{2} C_m,$$

substituímos a diagonal x por 1, assim basta tomar

$$l_m \leftarrow l_m - (1 - x) l_{m-1}$$

$$C_m \leftarrow C_m - (1 - x) C_{m-1}$$

para obtermos finalmente a matriz diagonalizada

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -(1-x)^2 \end{bmatrix}$$

A diferença desse subcaso é que as entradas da linha e coluna $m - 1$ também foram anuladas. Vamos memorizar isso fazendo

a seguinte atribuição.

$$b_{m-1} \leftarrow 0.$$

Caso 2: $b_{m-1} = 0$ e $b_m = 1$. Então a submatriz tem a seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 1 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & x & 1 \\ 1 & \dots & 1 & 1 & \alpha \end{bmatrix}$$

Após trocarmos as linhas m e $m - 1$ e as colunas m e $m - 1$, a matriz toma a seguinte forma.

$$\begin{bmatrix} & & & 1 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \\ 1 & \dots & 1 & \alpha & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & x \end{bmatrix}$$

Existem apenas dois subcasos, dependendo se x é zero ou não.

Subcaso 2a: Se $x = 0$. Então para cada i , $1 \leq i \leq m-2$ façamos as operações

$$l_i \leftarrow l_i - l_m$$

$$C_i \leftarrow C_i - C_m$$

para anular os 1's da linha e coluna $m - 1$, a esquerda e acima de α . Com as operações

$$l_{m-1} \leftarrow l_{m-1} + \frac{1-\alpha}{2} l_m$$

$$C_{m-1} \leftarrow C_{m-1} + \frac{1-\alpha}{2} C_m$$

$$\begin{aligned}l_m &\leftarrow l_m - l_{m-1} \\ C_m &\leftarrow C_m - C_{m-1}\end{aligned}$$

obtemos a matriz da forma

$$\begin{bmatrix} & & & 0 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Subcaso 2b: Se $x \neq 0$. Então fazemos as operações

$$\begin{aligned}l_{m-1} &\leftarrow l_{m-1} + \frac{1}{x}l_m \\ C_{m-1} &\leftarrow C_{m-1} + \frac{1}{x}C_m\end{aligned}$$

obtendo a matriz da forma:

$$\begin{bmatrix} & & & 1 & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \\ 1 & \dots & 1 & \alpha - \frac{1}{x} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & x \end{bmatrix}$$

Como a linha e coluna $m-1$ foram preenchidas por 1's, devemos fazer a seguinte atribuição

$$b_{m-1} \leftarrow 1.$$

Caso 3: $b_m = 0$. Não é preciso fazer qualquer operação já que a submatriz é da forma

$$\begin{bmatrix} & & & & 0 \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & & 0 \\ & \dots & & x & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix}$$

O algoritmo de diagonalização baseado nestas operações está mostrado na Figura 59. Notemos que a única informação importante é a descrição do grafo e os valores da diagonal, então ele pode assim ser implementado com dois vetores de comprimento n . Assumimos que G é representado por (b_1, b_2, \dots, b_n) e o vetor $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ representa os valores da diagonal da matrix resultante da aplicação do algoritmo, que inicialmente é inicializado com x em todas as suas posições. Para enfatizar, observamos que quando $b_m = 0$, como no caso 3, o algoritmo não é executado e move-se para o próximo passo.

Teorema 6.5. *Dados G e x , onde G é um grafo threshold com a matriz de adjacência A , o algoritmo de diagonalização calcula uma matriz diagonal D congruente a $A + xI$.*

6.4.2 Exemplos

Ilustraremos o algoritmo com três exemplos. O primeiro exemplo assumimos que G é um threshold representado por $(0, 1, 1, 1)$, e $x = 0$. Após inicializarmos, existirão três passos, $m = 4, 3, 2$.

Para $m = 4$, já que $b_3 = b_4 = 1$ e $\alpha = x = 0$, o primeiro passo o algoritmo executa o subcaso 1a, e as seguintes atribuições


```

Algorithm Diagonalize( $G, x$ )
  initialize  $d_i \leftarrow x$ , for all  $i$ 
  for  $m = n$  to 2
     $\alpha \leftarrow d_m$ 
    if  $b_{m-1} = 1$  and  $b_m = 1$ 
      if  $\alpha + x \neq 2$  //subcase 1a+
         $d_{m-1} \leftarrow \frac{\alpha x - 1}{\alpha + x - 2}$ 
         $d_m \leftarrow \alpha + x - 2$ 
      else if  $x = 1$  //subcase 1b+
         $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
         $d_m \leftarrow 0$ 
      else //subcase 1c+
         $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
         $d_m \leftarrow -(1 - x)^2$ 
         $b_{m-1} \leftarrow 0$ 
    else if  $b_{m-1} = 0$  and  $b_m = 1$ 
      if  $x = 0$  //subcase 2a+
         $d_{m-1} \leftarrow 1$ 
         $d_m \leftarrow -1$ 
      else //subcase 2b+
         $d_{m-1} \leftarrow \alpha - \frac{1}{x}$ 
         $d_m \leftarrow x$ 
         $b_{m-1} \leftarrow 1$ 
  end loop

```

Figura 59 – Diagonalizing $A(G) + xI$.

são feitas:

$$d_3 \leftarrow \frac{\alpha x - 1}{\alpha + x - 2} = \frac{1}{2}$$

$$d_4 \leftarrow \alpha + x - 2 = -2$$

Para $m = 3$, o segundo passo do algoritmo também executa o subcaso 1a, desde que $b_2 = b_3 = 1$, e $x = 0, \alpha = \frac{1}{2}$,

logo

$$d_2 \leftarrow \frac{\alpha x - 1}{\alpha + x - 2} = \frac{2}{3}$$

$$d_3 \leftarrow \alpha + x - 2 = -\frac{3}{2}$$

Para $m = 2$, o passo final do algoritmo é executado o subcaso 2a, desde que $b_1 = 0, b_2 = 1$, e $x = 0$, logo

$$d_1 \leftarrow 1$$

$$d_2 \leftarrow -1$$

A seguinte tabela fornece os passos do algoritmo em cada estágio:

b_i	d_i	b_i	d_i	b_i	d_i	b_i	d_i
0	0	0	0	0	0	0	1
1	0	1	0	1	$\frac{2}{3}$	1	-1
1	0	1	$\frac{1}{2}$	1	$-\frac{3}{2}$	1	$-\frac{3}{2}$
1	0	1	-2	1	-2	1	-2
inicial		após 1a		após 1a		após 2a	

Nosso segundo exemplo, assumimos que G é representado por $(0, 1, 0, 1)$ e $x = \frac{\sqrt{3}+1}{2}$. Esse exemplo ilustra como o subcaso 1c pode aparecer. Ele também mostra que o caso 3 pode ocorrer, mesmo sem vértices isolados.

Após inicializarmos, o primeiro passo será o subcaso 2b, já que $b_3 = 0, b_4 = 1$ e $\alpha = x \neq 0$. Note que $\frac{1}{x} = \sqrt{3} - 1$. Assim as atribuições serão:

$$d_3 \leftarrow x - \frac{1}{x} = \frac{3 - \sqrt{3}}{2}$$

$$d_4 \leftarrow x = \frac{\sqrt{3}+1}{2}$$

$$b_3 \leftarrow 1$$

Como b_3 torna-se 1, o próximo passo é o caso 1, já que $b_2 = 1$ e $b_3 = 1$. Entretanto, desde que $d_3 + x = 2$ e $x \neq 1$, o subcaso 1c será executado:

$$d_2 \leftarrow 1$$

$$d_3 \leftarrow -(1-x)^2 = \frac{\sqrt{3}-2}{2}$$

$$b_2 \leftarrow 0$$

Finalmente, já que b_2 torna-se zero, o passo final é o caso 3 e assim não é necessária alguma operação. A seguinte tabela fornece os passos do algoritmo em cada estágio:

b_i	d_i	b_i	d_i	b_i	d_i	b_i	d_i
0	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$
1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	0	1	0	1
0	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	1	$\frac{3-\sqrt{3}}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}-2}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}-2}{2}$
1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$	1	$\frac{\sqrt{3}+1}{2}$
inicial		após 2b		após 1c		após 3	

O próximo exemplo faz uma aplicação do Teorema 6.2 para localizar os autovalores.

Exemplo 6.3. Considere o grafo threshold $G = (0, 0, 0, 1, 1)$. Para $x = 0$, o algoritmo de diagonalização fornece os seguintes

valores $d = (0, 0, 1, -1, -2)$. De acordo com o Teorema 6.2, significa que $x = 0$ é um autovalor com multiplicidade 2, e que existe um autovalor de G maior do que 0. Quando aplicarmos o algoritmo ao mesmo grafo para $x = -4$, obtemos a diagonal com os valores $d = (-\frac{3}{4}, -4, -4, -4, -10)$. Isso implica que todos os autovalores de G são menores do que 4. Finalmente podemos concluir que existe um único autovalor no intervalo $(0, 4]$.

6.4.3 Simplicidade dos autovalores

Faremos nesta seção uma aplicação do algoritmo de diagonalização. Vamos mostrar que todo autovalor de um grafo threshold G , $\lambda \neq 0, -1$ é um autovalor simples.

Lembremos que um autovalor λ de um grafo G é simples se λ tem multiplicidade igual a 1 como raiz do polinômio característico. Seja G um grafo threshold, segue do algoritmo de diagonalização o seguinte resultado sobre os autovalores principais de G .

Teorema 6.6. *Em grafos threshold, a multiplicidade de um autovalor λ é um, a menos que $\lambda = 0$ ou $\lambda = -1$.*

Demonstração: Assumimos que λ é um autovalor. Então o algoritmo de diagonalização de $(G, -\lambda)$ produz pelo menos um zero na diagonal. Existem três maneiras de um zero aparecer na diagonal:

- (1) quando inicializamos;
- (2) quando atribuímos $d_m \leftarrow 0$ para algum $m \geq 2$;
- (3) quando atribuímos $d_{m-1} \leftarrow 0$ para $m = 2$;

Um zero pode ser produzido quando inicializamos o algoritmo so-

mente quando $\lambda = 0$. Se a atribuição $d_m \leftarrow 0$ ocorre, para algum $m \geq 2$, uma verificação cuidadosa do algoritmo, mostra que ela deverá ocorrer no subcaso 1b. Assim a diagonal inicializada com $x = 1$, implica que $\lambda = -1$. Suponha agora que $\lambda \neq 0, -1$, e um zero tem sido produzido no passo final pela atribuição $d_{m-1} \leftarrow 0$ para $m = 2$. Logo somente um zero pode aparecer na diagonal, e sua multiplicidade é um.

Assim, temos que os autovalores diferentes de 1 e 0 de um grafo threshold G são simples. ■

6.5 Exercícios

1. Considere a estrela $K_{1,n}$.
 - a) Prove que \sqrt{n} é autovalor da estrela.
 - b) Verifique que 0 é autovalor da estrela com multiplicidade $n - 1$.
 - c) Conclua que $K_{1,n}$ é integral se, e somente se, n é um quadrado perfeito.
2. Considere a árvore T formada por P_3 com b vértices adjacentes a cada extremidade:
 - a) Verifique que \sqrt{b} e $\sqrt{b+2}$ são autovalores de T .
 - b) Calcule a multiplicidade do autovalor 0 e conclua que T tem exatamente 5 autovalores distintos.
3. Calcule a multiplicidade de -1 como autovalor do grafo threshold $G = (0, 0, 0, 0, 1, 1)$ do exemplo 6.3. Encontre a quantidade de autovalores distintos de G .

4. Verifique que o índice do grafo threshold $G = (0, 0, 0, 0, 1, 1)$ do exemplo 6.3 está em $(2, 4]$.

6.5.1 Notas Bibliográficas

O algoritmo apresentado para matrizes de adjacências de árvores foi adaptado para funcionar com matrizes Laplacianas [39]. Aplicações dessa versão do algoritmo incluem o ordenamento de árvores pela energia Laplaciana [40] e a distribuição de autovalores Laplacianos de árvores [16, 54].

Também foi adaptado para a matriz Laplaciana normalizada [15]. Como aplicação específica, nesse mesmo artigo foram caracterizadas todas as árvores que tem menos do que seis autovalores Laplacianos distintos.

O algoritmo para grafos threshold foi estendido para matrizes distância [57]. Também foram feitas extensões dos algoritmos para o cálculo do polinômio característico [56].

Referências

- [1] N.M.M. Abreu, Old and new results on algebraic connectivity of graphs, *Linear Algebra Appl.* 423 (2007), 53-73.
- [2] N.M.M. Abreu, R. Del-Vecchio, C. Vinagre, D. Stevanović, “Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações”, Notas em Matemática Aplicada, **27**, 2ª edição, SBMAC, 2012, disponível em , último acesso em 20/01/2014.
- [3] N.M.M Abreu, C. M. Justel, O. Rojo e V. Trevisan, Ordering trees and graphs with few cycles by algebraic connectivity, a aparecer em *Linear Algebra Appl.*, 2014.
- [4] N.M.M. Abreu e C.S. Oliveira e L.S. de Lima, Conjecturas geradas automaticamente pelo sistema Auto-GraphiX: provas de algumas desigualdades para o índice da matriz Laplaciana sem sinal, em “Anais do XXXIX SBPO”, Fortaleza, 2007.
- [5] R. Balakrishnan, The energy of a graph, *Linear Algebra Appl.*, **387**, 287-295(2004).
- [6] S. Barnett, “Matrices Methods and Applications”, Oxford University Press, New York, 1990.
- [7] J-C. Bermond, C. Delorme e J.J. Quisquater, Table of large (Δ, D) -graphs, *Discrete Applied Mathematics*, **37/38** (1992), 575-577.

- [8] L.W. Beineke e R.J. Wilson “Topics in Algebraic Graph Theory”, Encyclopedia of Math. Appl., **102**, Cambridge, 2004.
- [9] D. C. Bell, J. S. Atkison, J. W. Carlson, Centrality for disease transmission networks, *Social Networks*, **21**(1999), 1-21.
- [10] N. Biggs, “Algebraic Graph Theory”, Great Britain, Cambridge University Press, 2a. ed., 1993.
- [11] P.O. Boaventura Netto, “Teoria, Modelos e Algoritmos em Grafos”, E. Blücher, 4a edição, 2006.
- [12] B. Bollobás, “Graph Theory: An Introductory Course”, Springer-Verlag, 1979.
- [13] P. Bonacich, Power and Centrality: A Family of Measures, *The American Journal of Sociology*, **92**(1987), 5, 1170-1182.
- [14] S. P. Borgatti, Centrality and network flow, *Social Networks*, **27**(1)(2005), 55-71.
- [15] R. Braga, R. Del-Vecchio, V. Rodrigues e V. Trevisan, Characterizing trees with 4 or 5 distinct normalized Laplacian eigenvalues, Submitted (2014).
- [16] R. Braga, V. Rodrigues and V. Trevisan, On the distribution of Laplacian eigenvalues of trees, *Discrete Mathematics*, 313 (2013), 2382-2389.
- [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] V. Chvátal, P. L. Hammer, Aggregation of inequalities in integer programming, in Studies in Integer Programming, Annals of Discrete Math., 1, 145–162, North-Holland, Amsterdam, 1977.
- [21] Collatz e Sinogowitz, Spectren endlicher grafen, *Abh. Math. Sem.*, Univer. Hamburg, **21** (1957), 63-77.
- [22] D. Cvetković, Graphs and their spectra, *Publ. Elektrotehn. Fak., Ser. Mat. Fiz.*, Univ. Beograd, **354**(1971), 1-50.
- [23] D. Cvetković, M. Doob e H. Sachs "Spectra of Graphs - Theory and Application", Pure and Applied Mathematics, Academic Press, New York, 1980.
- [24] D. Cvetković, M. Doob e H. Sachs, "Spectra of Graphs, Theory and Application", 3^a edição, Johann Ambrosius Barth Verlag, Heidelberg-Leipzig, 1995.
- [25] 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.
- [26] D. Cvetković, S.K. Simić, Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, II, *Linear Algebra Appl.* **432**(2010), 2257-2272.

- [27] 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.
- [28] D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić, “Eigenspaces of graphs”, *Encyclopedia of Math. Appl.*, **66**, Cambridge, 1997.
- [29] 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.
- [30] D. Cvetković, P. Rowlinson e S. Simić, Signless Laplacian of finite graphs, *Linear Algebra Appl.*, **423** (2007), 155-171.
- [31] D. Cvetković, P. Rowlinson e K.Simić, An Introduction to the Theory of Graph Spectra, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [32] E. R. van Dam e W. Haemers, Which graphs are determined by their spectrum?, *Linear Algebra Appl.*, **373**(2003), 241-272.
- [33] M. de Freitas, N. Abreu, R. Del-Vecchio, S. Jurkiewicz, Infinite families of Q -integral graphs, *Linear Algebra Appl.*, **432**(2010), 2352-2360
- [34] R. Diestel, “Graph Theory”, *Graduate Texts in Mathematics*, Springer, **173**(1997).
- [35] J. Donadelli, “Métodos da Álgebra Linear em Teoria de Grafos”, Relatório Técnico 002, Departamento de Informática, UFPR, 2007.

- [36] M. Fiedler, Algebraic Connectivity of Graphs, *Czechoslovak Math. J.*, **23**(1973), 298-305.
- [37] L. C. Freeman, A Set of Measures of Centrality Based on Betweenness, *Sociometry*, **40**(1)(1977), 35-41.
- [38] L. C. Freeman, Centrality in Social Networks: Conceptual Clarification, *Social Networks*, **1**(1979), 215-239.
- [39] E. Fritscher, C. Hoppen, I. Rocha, V. Trevisan, On the sum of the Laplacian eigenvalues of a tree, *Linear Algebra Appl.* 435 (2011), 371-399.
- [40] E. Fritscher, C. Hoppen, I. Rocha, V. Trevisan, Characterizing trees with large Laplacian energy, *Linear Algebra Appl.* 442 (2014), 20-49.
- [41] C. Godsil e G. Royle, "Algebraic Graph Theory", Graduate Texts in Mathematics, Springer-Verlag, 2001.
- [42] J.A.M. Gonçalves, L.S. Portugal, , P. O. Boaventura Netto, As potencialidades de indicadores de centralidade no estudo de um corredor ferroviário, em "Anais do XIX AN-PET - Congresso De Pesquisa E Ensino Em Transportes", Recife, PE, 2005.
- [43] R. Grone e R. Merris, Ordering trees by algebraic connectivity, *Graphs and Combinatorics*, **6**(1990), 229-237.
- [44] R. Grone, R. Merris, The Laplacian spectrum of a graph, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, v. 11,n. 2 (1990), 218-238.
- [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 π -electron energy on molecular topology, *J. Serb. Chem. Soc.*, **70**(3)(2005), 441-456.
- [48] I. Gutman e B. Zhou, Laplacian energy of a graph, *Linear Algebra Appl.*, 414 (2006), 29-37.
- [49] W. H. Haemers, Interlacing eigenvalues and graphs, *Linear Algebra Appl.* 226–228 (1995) 593–616.
- [50] F. Harary, “Graph Theory” , Addison Wesley, 1969.
- [51] F. Harary e A.J. Schwenk, Which graphs have integral spectra?, em Bari, R., Harary, F.(Eds), “Graphs and Combinatorics”, Springer, Berlim, 1974, p. 45-51.
- [52] A.R. Horn e Johnson, C.R. “Matrix Analysis”, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [53] E. Hückel, Quantentheoretische Beiträge Zum Benzolproblem, *Z. Phys.*, **70**(1931), 204-286,.
- [54] D. P. Jacobs e V. Trevisan, A note on Laplacian eigenvalues in trees, submitted.
- [55] D. P. Jacobs e V. Trevisan, Locating the eigenvalues of trees, *Linear Algebra Appl.* 434 (2011), 81–88.
- [56] D. P. Jacobs, V. Trevisan e F. Tura, Computing the characteristic polynomial of threshold graphs, *Submitted (2014)*.

-
- [57] D. P. Jacobs, V. Trevisan e F. Tura, Eigenvalue location in certain graphs, *Submitted (2014)*.
- [58] D. P. Jacobs, V. Trevisan e F. Tura, Eigenvalue location in threshold graphs, *Linear Algebra Appl.* 439 (2013), 2762-2773.
- [59] <http://www.monod.biomath.nyu.edu/tutorials/spectral-analysis.html> (em 12/03/2004).
- [60] S. Kirkland, J. Moliterno, M. Neumann e B. Sharder, On graphs with equal algebraic connectivity, *Linear Algebra Appl.*, **341**(2002), 45-56.
- [61] M. Krivelevich, B. Sudakov, The largest eigenvalue of sparse random graphs, *Combinatorics, Probability and Computing*, 12 (2003) 61-72.
- [62] K.Y. Lin, An elementary proof of the Perron-Frobenius Theorem for non-negative symmetric matrices, *Chinese Journal of Physics*, **15**(1977), p.283–285.
- [63] H.C. Longest-Higgins, Resonance structures and MO in unsaturated hydrocarbons, *J. Chem. Phys.* **18**(1950), 265-274.
- [64] 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).
- [65] N. V. R. Mahadev, U. N. Peled, “Threshold graphs and related topics”, Elsevier, 1995.

- [66] L. Markenzon, O. Vernet, “Representações Computacionais de Grafos”, *Notas em Matemática Aplicada*, **25**, SBMAC, 2006.
- [67] B.D. McKay, On the spectral characterization of trees, *Ars Combinatoria III*, 1977, 219-232.
- [68] B.J. McClelland, Properties of the latent roots of a matrix: the estimation of π -electron energies, *J. Chem. Phys.*, **54**(1971), 640-643.
- [69] C. D. Meyer, “Matrix Analysis and Applied Linear Algebra”, SIAM, 2000, disponível em <http://matrixanalysis.com/>, acessado pela última vez em fevereiro de 2014
- [70] B. Mohar, The Laplacian Spectrum of Graphs, *Graph Theory, Combinatorics, and Applications*, **2**(1991), 871-898.
- [71] B. Mohar, Eigenvalues, Diameter, and Mean Distance in Graphs, *Graphs and Combinatorics*, **7**(1991), 53-64.
- [72] B. Mohar, A novel definition of the Wiener index of trees, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.*, **33**(1993), 153-154.
- [73] D. Poole, “Álgebra Linear”, Cengage Learning Editores, 2004.
- [74] G. Sabidussi, The centrality index of a graph, *Psychometrika*, **31**(1966), 581-603.
- [75] S. Simić, Z. Stanić, Q -integral graphs with edge-degrees at most five, *Discrete Math.*, v. 308, pp. 4625-4634, 2008.

- [76] Z. Stanić, There are exactly 172 connected Q -integral graphs up to 10 vertices, *Novi Sad J. Math.*, v. 37, n. 2, pp. 193-205, 2007.
- [77] D. Stevanović, I. Stanković, Remarks on hyperenergetic circulant graphs, *Linear Algebra Appl.*, **400**(2005), 345-348.
- [78] D. Stevanović, NewGraph system,
<http://www.sgt.pep.ufrj.br/index.php> (em 24/09/2011).
- [79] J.L. Szwarcfiter, “Grafos e Modelos Computacionais”, Editora Campus, 1984.
- [80] J.L. Szwarcfiter e L. Markenzon, “Estrutura de Dados e seus Algoritmos”, 2a. edição, LTC, Livros Técnicos e Científicos, 1994.
- [81] Wikipedia, <http://pt.wikipedia.org/wik>, acessado por último em 22/04/2007.
- [82] *yEd Graph Editor* disponível em
http://www.yworks.com/en/products_yed_about.html
acessado por último em 03/10/2013.
- [83] B. Zhou, More on energy and Laplacian energy, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, **64**(2010), 75-84.
- [84] P. Zhu, R.C. Wilson, A Study of Graph Spectra for Comparing Graphs, Relatório Técnico, Universidade de York, UK, 2005.

7 Apêndice

Na primeira seção deste Apêndice, provamos o resultado de Teoria de Matrizes utilizado na demonstração da Proposição 5.1. Na sequência, apresentamos e provamos cinco resultados importantes sobre matrizes simétricas utilizados no decorrer deste estudo da Teoria Espectral de Grafos, no intuito de tornar o texto autossuficiente.

Na escolha do conteúdo para este Apêndice, preferimos enfocar naqueles resultados que não fazem parte dos programas das primeiras disciplinas de Álgebra Linear, mesmo nos currículos de cursos de Matemática. Os resultados que julgamos conhecidos, serão mencionados apenas para referência. Quando possível, fazemos a passagem da linguagem de matrizes e Álgebra Linear para o contexto da Teoria Espectral de Grafos em que o teorema será usado, mas resultados gerais da Teoria de Matrizes são apresentados em suas formulações mais abrangentes. Neste sentido, seguimos a abordagem de [31].

7.1 Um resultado de Teoria de Matrizes

Como referência para esta seção, indicamos [69]. Em primeiro lugar, apresentamos a regra para cálculo de determinantes de matrizes de blocos que utilizaremos adiante:

Lema 7.1. *Se A e D são matrizes quadradas então*

$$\det \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{cases} \det(A) \det(D - CA^{-1}B), & \text{se } A^{-1} \text{ existe e} \\ \det(D) \det(A - BD^{-1}C), & \text{se } D^{-1} \text{ existe.} \end{cases}$$

Demonstração: Se A^{-1} existe, pode-se escrever

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & O \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ O & D - CA^{-1}B \end{bmatrix}.$$

Como as matrizes envolvidas são quadradas, da teoria de determinantes vem que

$$\det \begin{bmatrix} I & O \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} I & CA^{-1} \\ O & I \end{bmatrix} = \det(I^2) = 1 \text{ e}$$

$$\det \begin{bmatrix} A & B \\ O & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} = \det(A) \det(D - CA^{-1}B).$$

Portanto, neste caso,

$$\det \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \det(A) \det(D - CA^{-1}B).$$

O outro caso é análogo. ■

Lema 7.2. *Sejam B uma matriz $m \times n$ e C uma matriz $n \times m$, ambas com entradas em \mathbb{R} . Então, para todo $\lambda \in \mathbb{R}$,*

$$\lambda^m \det(\lambda I^n - CB) = \lambda^n \det(\lambda I_m - BC).$$

Demonstração: Suponhamos $\lambda \neq 0$ (o caso $\lambda = 0$ é trivial). Na matriz

$$E = \begin{bmatrix} \lambda I_m & \lambda B \\ & \lambda I_n \end{bmatrix},$$

os blocos λI_m e λI_n são matrizes quadradas e invertíveis. Logo, pelo Lema 7.1, temos

$$\det(E) = \det(\lambda I_m) \det(\lambda I_n - C(\lambda I_m)^{-1}B) = \lambda^{m+1} \det(I_n - CB).$$

Mas também,

$$\det(E) = \det(\lambda I_n) \det(\lambda I_m - B(\lambda I_n)^{-1}C) = \lambda^{n+1} \det(I_m - BC).$$

Tem-se portanto a igualdade desejada. ■

Proposição 7.1. *Sejam A uma matriz $m \times n$ e B uma matriz $n \times m$. Então:*

- (i) *se $m = n$ então AB e BA possuem o mesmo polinômio característico;*
- (ii) *se $m \neq n$, os polinômios característicos de AB e BA são diferentes, mas as matrizes possuem os mesmos autovalores não nulos.*

Demonstração: (i) Se $m = n$, pelo Lema anterior, para todo $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\lambda^n \det(AB - \lambda I) = \lambda^n \det(BA - \lambda I),$$

e, portanto, a afirmação está provada.

(ii) Se $m \neq n$ então AB e BA são matrizes de ordens diferentes, logo possuem polinômios característicos diferentes. Supondo, por exemplo, $m > n$, pelo Lema 7.2,

$$\det(AB - \lambda I) = (\lambda^{m-n}) \det(BA - \lambda I).$$

Portanto, zero é raiz do polinômio característico de AB $m - n$ vezes a mais do que é raiz do polinômio característico de BA ,

mas as outras raízes de ambos os polinômios são as mesmas, com as mesmas multiplicidades. ■

7.2 Resultados sobre matrizes simétricas

Nesta seção, consideramos conhecidos os fatos básicos da teoria de diagonalização de matrizes simétricas, que podem ser encontrados, por exemplo, na referência [73].

Em tudo o que se segue, A é uma matriz simétrica de ordem n com entradas reais, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ são seus autovalores em ordem não crescente e $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ é uma base ortonormal de vetores de \mathbb{R}^n - pensados sempre como vetores-coluna $n \times 1$ - que são autovetores para A associados, respectivamente, àqueles autovalores. A notação \langle, \rangle indica o produto interno canônico de \mathbb{R}^n e $\|\cdot\|$, a norma Euclidiana.

7.2.1 Princípio de Rayleigh

As Proposições 7.2 e 7.3, conhecidas como *Princípio de Rayleigh*, caracterizam os autovalores de A como valores máximos de uma forma quadrática restrita à esfera unitária de \mathbb{R}^n com centro na origem. Estes resultados constituem uma técnica frequentemente empregada para encontrar grafos com índice máximo e índice mínimo em classes particulares de grafos. Nas suas demonstrações nos baseamos em [35].

Proposição 7.2. $\lambda_1 = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle.$

Demonstração: Seja P a matriz ortogonal cujas colunas são os vetores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. Sabemos que $P^T A = E P^T$, onde $E = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ é a matriz diagonal dos autovalores de A . Seja $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ com $\|\mathbf{x}\| = 1$. Sendo P matriz ortogonal, o vetor $\mathbf{y} = P^T \mathbf{x} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T$ é também unitário e

$$\begin{aligned} \langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle &= \langle P^T A \mathbf{x}, P^T \mathbf{x} \rangle = \\ &= \langle E \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 + \dots + \lambda_n y_n^2 \leq \lambda_1 \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle = \lambda_1. \end{aligned}$$

Como $\lambda_1 = \langle A\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1 \rangle$, o resultado está provado. ■

Corolário 7.1. $\lambda_1 = \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$

e o valor máximo é atingido somente em autovetores unitários associados ao autovalor.

Lembrando que $\langle A\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i \rangle = \lambda_i$, para todo i , $1 \leq i \leq n$, podemos usar um raciocínio análogo ao da prova acima para generalizar a Proposição 7.2 para os demais autovalores de A . De fato, vale a

Proposição 7.3. Para cada i , $1 \leq i \leq n$,

$$\lambda_i = \max\{\langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \mid \|\mathbf{x}\| = 1 \text{ e } \mathbf{x} \perp \mathbf{v}_j, 1 \leq j < i\},$$

sendo o valor máximo atingido para autovetores unitários de A associados ao autovalor λ_i .

Demonstração: Fixados i , $1 \leq i \leq n$ e $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|\mathbf{x}\| = 1$ e $\mathbf{x} \perp \mathbf{v}_j$, $1 \leq j < i$, tomamos como antes $\mathbf{y} = P^T \mathbf{x}$. Então $\|\mathbf{y}\| = 1$, e para cada j , $1 \leq j < i$, $\langle \mathbf{y}, P^T \mathbf{v}_j \rangle = \langle P^T \mathbf{x}, P^T \mathbf{v}_j \rangle =$

$\langle \mathbf{x}, \mathbf{v}_j \rangle = \mathbf{0}$, sendo que $P^T \mathbf{v}_j = \mathbf{e}_j$, o j -ésimo vetor da base canônica de \mathbb{R}^n . Logo, se $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_n]^T$ obtemos

$$\langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle E\mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{0} + \lambda_i y_i^2 + \dots + \lambda_n y_n^2 \leq \lambda_i \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle = \lambda_i.$$

■

Corolário 7.2. Para cada i , $1 \leq i \leq n$,

$$\lambda_i = \max \left\{ \frac{\langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} \mid \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \text{ e } \mathbf{x} \perp \mathbf{v}_j, 1 \leq j < i \right\},$$

sendo o valor máximo atingido em autovetores unitários associados ao autovalor.

Corolário 7.3. Para cada i , $1 \leq i \leq n$,

$$\lambda_i = \min \left\{ \frac{\langle A\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} \mid \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \text{ e } \mathbf{x} \perp \mathbf{v}_j, i < j \leq n \right\},$$

sendo o valor mínimo atingido em autovetores unitários associados ao autovalor.

Demonstração: Basta utilizar o raciocínio anterior para a matriz $-A$. ■

7.2.2 Teorema de Entrelaçamento

Na desenvolvimento deste tópico seguimos [49] e [31].

Teorema 7.1. Seja M uma matriz $n \times m$ com entradas reais tal que $M^T M = I$. Se os autovalores de $M^T A M$ são $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_m$ então para cada i , $1 \leq i \leq m$, vale

$$\lambda_{n-m+i} \leq \mu_i \leq \lambda_i. \quad (7.2.1)$$

Demonstração: Seja $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$ uma base ortonormal de autovetores de $M^T A M$ associados, respectivamente, aos autovalores $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_m$. Fixemos i , $1 \leq i \leq m$ e chamemos \mathcal{U}_i e \mathcal{V}_{i-1} aos subespaços de \mathbb{R}^m gerados, respectivamente, por $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_i\}$ e $\{M^T \mathbf{v}_1, M^T \mathbf{v}_2, \dots, M^T \mathbf{v}_{i-1}\}$. Como $\dim \mathcal{U}_i + \dim (\mathcal{V}_{i-1})^\perp = i + m - (i - 1) = m + 1$, temos que $\mathcal{U}_i \cap (\mathcal{V}_{i-1})^\perp$ contém algum vetor \mathbf{w}_i não nulo. Assim, para cada j , $1 \leq j \leq i-1$, $\langle M \mathbf{w}_i, \mathbf{v}_j \rangle = 0$ pois $\langle \mathbf{w}_i, M^T \mathbf{v}_j \rangle = 0$. Além disso, $\langle A M \mathbf{w}_i, M \mathbf{w}_i \rangle = \langle M^T A M \mathbf{w}_i, M^T M \mathbf{w}_i \rangle$ e $\langle M \mathbf{w}_i, M \mathbf{w}_i \rangle = \langle \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i \rangle$. Daí e pelo Princípio de Rayleigh (7.2 e 7.3), chegamos a

$$\lambda_i \geq \frac{\langle A M \mathbf{w}_i, M \mathbf{w}_i \rangle}{\langle M \mathbf{w}_i, M \mathbf{w}_i \rangle} = \frac{\langle M^T A M \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i \rangle}{\langle \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i \rangle} \geq \mu_i.$$

Para a outra desigualdade em 7.2.1, usa-se o mesmo argumento para as matrizes $-A$ e $-M^T A M$. ■

As desigualdades 7.2.1 são conhecidas como *desigualdades de Cauchy*. Quando satisfeitas, dizemos que **os autovaleores de A entrelaçam os de $M^T A M$** .

Mostra-se que uma $n \times m$ matriz M com entradas reais satisfaz $M^T M = I_m$ se e somente se suas colunas formam um conjunto ortonormal de vetores de \mathbb{R}^n . Logo, se tomamos

$$M = \begin{bmatrix} I_m \\ \mathcal{O} \end{bmatrix},$$

onde I_m é a identidade de ordem m e \mathcal{O} é a matriz nula de ordem $(n - m) \times m$ então M satisfaz $M^T M = I_m$. Além disso, $B = M^T A M$ é uma submatriz principal de ordem m de A , isto é, uma matriz obtida de A pela retirada de $n - m$ linhas e das correspondentes $n - m$ colunas. Desta forma, obtemos a forma original do *Teorema de Entrelaçamento de Cauchy*:

Corolário 7.4. *Se B é uma submatriz principal de A então os autovalores de A entrelaçam os autovalores de B .*

7.2.3 Partições equilibradas

Nesta sub-seção, consideramos $\mathcal{X} = X_1 \dot{\cup} X_2 \dot{\cup} \dots \dot{\cup} X_m$ uma partição de $\{1, 2, \dots, n\}$ em que cada $|X_i| = n_i > 0$ e descrevemos A como matriz dos blocos correspondentes a esta partição na forma

$$\begin{bmatrix} A_{1,1} & \cdots & A_{1,m} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{m,1} & \cdots & A_{m,m} \end{bmatrix}.$$

Então cada bloco $A_{i,j}$ tem ordem $n_i \times n_j$. Seja \widetilde{M} a **matriz característica da partição** \mathcal{X} , ou seja, a matriz $n \times m$ em que $(\widetilde{M})_{ij} = 1$ se $i \in X_j$ e 0, em caso contrário. Definimos a **matriz quociente de A por \mathcal{X}** como a $m \times m$ matriz \widetilde{B} em que cada entrada B_{ij} é a média das somas das linhas do bloco $A_{i,j}$. Então, para cada i, j , $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq m$, temos

$$(\widetilde{B})_{ij} = \frac{1}{n_i} \mathbf{1}_{n_i}^T A_{i,j} \mathbf{1}_{n_j} = \frac{1}{n_i} (\widetilde{M}^T A M)_{ij},$$

onde $\mathbf{1}_t$ indica o vetor $[1 \ 1 \ \cdots \ 1]_{t \times 1}^T$. \mathcal{X} é chamada **partição equilibrada** (ou **regular**) quando em cada bloco, a soma das linhas (e colunas) é constante. Neste caso, temos $A\widetilde{M} = \widetilde{M}\widetilde{B}$.

Corolário 7.5. *Seja \widetilde{B} a matriz quociente de A em relação à partição \mathcal{X} como acima. Então os autovalores de A entrelaçam os autovalores de \widetilde{B} .*

Demonstração: Pela construção feita acima, \widetilde{M} é exatamente a $n \times m$ matriz de incidência vértice-bloco da partição \mathcal{X} . Se

$\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_m$ são as colunas de \widetilde{M} , ponhamos

$$M = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \frac{1}{n_1} \mathbf{c}_1 & \frac{1}{n_2} \mathbf{c}_2 & \cdots & \frac{1}{n_m} \mathbf{c}_m \end{array} \right].$$

Temos então que $M^T M = I$ e $M^T A M = \widetilde{B}$. Logo o resultado segue do Teorema 7.1. ■

Teorema 7.2. *Consideremos \mathcal{X} uma partição equilibrada de $\{1, 2, \dots, n\}$ onde em cada bloco $A_{i,j}$ a soma de cada linha é constante e igual a b_{ij} . Se $B = (b_{ij})_{m \times m}$ então o espectro de B está contido no espectro de A , levando em conta as multiplicidades.*

Demonstração: Seja $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_m]^T$ autovetor de B associado a um autovalor μ . Então o vetor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} x_1 \mathbf{1}_{n_1} \\ x_2 \mathbf{1}_{n_2} \\ \vdots \\ x_m \mathbf{1}_{n_1} \end{bmatrix}$$

é um autovetor de A associado ao mesmo autovalor e o resultado está provado. ■

7.2.4 Teorema de Sylvester para a inércia

Neste tópico, seguimos [69].

Primeiramente, lembramos que todos os autovalores de A são reais, pois A é matriz simétrica.

Definição 7.1. *O terno de inteiros não negativos (p, j, s) é dito ser a **inércia da matriz** A quando A possui p autovalores positivos, j autovalores negativos e 0 é autovalor com multiplicidade s .*

Neste item, B é uma $n \times n$ matriz simétrica com entradas reais. Lembramos que, pela Definição 6.2, A e B são **matrizes congruentes** quando existe uma matriz não singular (isto é, invertível) C tal que $B = C^T A C$. Denotamos este fato escrevendo $A \cong B$. Notamos que a relação de congruência entre matrizes é uma relação de equivalência.

Lema 7.3. *Se A tem inércia (p, j, s) então $A \cong E$ onde*

$$E = \begin{bmatrix} I_p & & \\ & -I_j & \\ & & O_{s \times s} \end{bmatrix}.$$

Demonstração: De fato, se $\{\lambda_1, \dots, \lambda_p, -\lambda_{p+1}, \dots, -\lambda_{p+j}, 0, \dots, 0\}$ é o multiconjunto dos autovalores de A (incluindo as multiplicidades), onde cada $\lambda_i > 0$, então existe uma matriz ortogonal P tal que

$$P^T A P = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p, -\lambda_{p+1}, \dots, -\lambda_{p+j}, 0, \dots, 0).$$

Tomando $C = PS$, onde $S = \text{diag}(\lambda_1^{-1/2}, \dots, \lambda_{p+j}^{-1/2}, 1, \dots, 1)$ então S é matriz não singular e

$$\begin{aligned} C^T A C &= (PS)^T A (PS) = S^T (P^T A P) = \\ &= (S^T \text{diag}(\lambda_1^{-1/2}, \dots, \lambda_{p+j}^{-1/2}, 1, \dots, 1)) S = \\ &= \text{diag}(\lambda_1^{1/2}, \dots, \lambda_p^{1/2}, -\lambda_{p+1}^{1/2}, \dots, -\lambda_{p+j}^{1/2}, 0, \dots, 0) S = E. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Escrevemos $\mathbf{u} \leq \mathbf{0}$ (respectivamente, $\mathbf{u} > \mathbf{0}$) para indicar que todas as coordenadas do vetor \mathbf{u} são não positivas (respectivamente, positivas).

Teorema 7.3 (Lei da Inércia de Sylvester). *$A \cong B$ se e somente se A e B possuem a mesma inércia.*

Demonstração: Suponha $B \cong A$ e seja (q, k, t) a inércia de B . Pelo Lema 7.3 então $B \cong F$, onde

$$f = \begin{bmatrix} I_q & & \\ & -I_k & \\ & & O_{t \times t} \end{bmatrix}.$$

Como $A \cong E$, E como no Lema 7.3 então $F \cong E$. Logo, F e E possuem o mesmo posto e daí, $s = t$. Para concluir que $p = q$ vamos raciocinar indiretamente: para isto, suponhamos por absurdo que $p > q$. Seja K uma matriz $n \times n$ não singular tal que

$$F = K^T E K.$$

Podemos escrever $K = \begin{bmatrix} X_{n \times q} & | & Y_{n \times (n-q)} \end{bmatrix}$. Sejam $\mathcal{U} = \text{Im}(Y)$ o subespaço de \mathbb{R}^n gerado pelas colunas de Y e \mathcal{V} , o subespaço gerado pelos vetores $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_p$ da base canônica de \mathbb{R}^n . Então

$$\dim(\mathcal{U} \cap \mathcal{V}) = \dim \mathcal{U} + \dim \mathcal{V} - \dim(\mathcal{U} + \mathcal{V}) = (n-q) + p - n = p-q > 0.$$

Logo existe vetor não nulo $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T \in \mathcal{U} \cap \mathcal{V}$. Ora, como $\mathbf{x} \in \mathcal{U}$ então existe $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_{n-q}]^T \in \mathbb{R}^{n-q}$ tal que $Y\mathbf{y} = \mathbf{x}$. Portanto

$$\mathbf{x} = Y\mathbf{y} = K \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

Dáí

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T E \mathbf{x} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0}^T & \mathbf{y}^T \end{bmatrix} K^T E K \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}^T & \mathbf{y}^T \end{bmatrix} F \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ -y_1^2 \\ \vdots \\ -y_k^2 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \leq \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Por outro lado, como $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ então $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_p \ 0 \ \cdots 0]^T$. Logo,

$$\mathbf{x}^T E \mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_p \ 0 \ \cdots 0]^T \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} > \mathbf{0}.$$

Assim, não pode ocorrer $p > q$. Um argumento análogo mostra que também não é possível que seja $p < q$. Portanto $p = q$. Fica provado que se $A \cong B$ então A e B possuem a mesma inércia.

Reciprocamente, supondo que A e B possuem a mesma inércia, temos pelo Lema 7.3 que $A \cong E \cong B$. ■

7.2.5 Teorema de Perron-Frobenius

Dado que $A = (a_{ij})$ e que $\rho : \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$ é uma permutação, denotamos por A_ρ a matriz $(a_{\rho(i), \rho(j)})$. Se P

é uma matriz obtida permutando-se as linhas da matriz identidade de acordo com ρ então $A_\rho = PAP^T$; segue que A_ρ e A possuem os mesmos autovalores e que se \mathbf{v} é um autovetor de A então \mathbf{v}_ρ é um autovetor de A_ρ .

Neste tópico, seguimos a apresentação bastante didática de [35] para a prova do Teorema de Perron-Frobenius dada em [62]. Como referência, indicamos também [31].

Dizemos que uma matriz C é **não-negativa** (respectivamente, **positiva**) quando suas entradas são não negativas. Indicamos este fato escrevendo $C \geq O$ (respectivamente, $C > O$).

Definição 7.2. Dizemos que a matriz simétrica A é **irredutível** se não existe permutação ρ tal que

$$A_\rho = \begin{bmatrix} X & Z \\ O & Y \end{bmatrix},$$

onde X e Y são matrizes quadradas. Em caso contrário, A é dita uma matriz **redutível**.

Lema 7.4. Se a matriz A é não negativa e A irredutível então $(I+A)^{n-1} > 0$, ou equivalentemente, $I+A+A^2+\dots+A^{n-1} > 0$.

Demonstração: Ver, por exemplo, [69].

Proposição 7.4. Se G é um grafo conexo com n vértices e A é sua matriz de adjacência então A é irredutível.

Demonstração: Como G é conexo, para cada par i, j , $1 \leq i, j \leq n$, existe pelo menos um caminho (logo, uma cadeia) ligando o vértice v_i ao vértice v_j , que terá comprimento no máximo igual a $n-1$. Pela Proposição 2.2, isto significa que pelo menos uma

das matrizes simétricas A^k , onde $0 \leq k \leq n-1$ tem a entrada ij positiva, para cada par i, j , $1 \leq i, j \leq n$. Pelo Lema acima, a matriz A é irredutível. ■

Teorema 7.4 (Teorema de Perron-Frobenius). *Suponhamos que A seja matriz não negativa, irredutível e com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Então*

(i) $\lambda_1 > 0$ e existe um autovetor associado positivo;

(ii) $\lambda_1 > \lambda_2$;

(iii) $|\lambda_i| \leq \lambda_1$, para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Demonstração: (i): Como A é não negativa então $\text{tr}(A) \geq 0$. Como $\text{tr}(A) = \sum_i \lambda_i$ então $\lambda_1 \geq 0$. Vamos mostrar que existe autovetor positivo associado a λ_1 e, em seguida, que $\lambda_1 > 0$. Seja $\mathbf{u} = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n]^T$ um autovetor unitário associado a λ_1 . Então, pela Proposição 7.2 e Corolário 7.1

$$\lambda_1 = \mathbf{u}^T A \mathbf{u} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} u_i u_j \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} |u_i| |u_j| \leq \lambda_1.$$

Ou seja, o vetor $\mathbf{v} = [|u_1| \ |u_2| \ \dots \ |u_n|]^T$ é um autovetor não negativo e unitário associado a λ_1 .

Suponhamos que existam coordenadas nulas em \mathbf{v} . Seja então ρ uma permutação de $\{1, 2, \dots, n\}$ tal que $|u_{\rho(i)}| > 0$ para todo $i \leq m$ e $|u_{\rho(i)}| = 0$ para todo $i, m < i \leq n$. Escrevamos

$$A_\rho = \begin{bmatrix} X & Z \\ T & Y \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_\rho = \begin{bmatrix} \mathbf{u}' \\ \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

onde $\mathbf{u}' = [|u_{\rho(1)}|, |u_{\rho(2)}|, \dots, |u_{\rho(m)}|]^T$ e X e Y são matrizes quadradas. Então

$$\begin{bmatrix} X & Z \\ T & Y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}' \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \mathbf{u}' \\ \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

e portanto, necessariamente, $T = O$, acarretando ser A matriz redutível, o que é absurdo. Consequentemente, $\mathbf{v} > \mathbf{0}$. Devemos notar que supondo $\lambda_1 = 0$, obtemos da mesma forma que $T = O$, contrariando o fato de ser A matriz irredutível.

(ii) Suponhamos que λ_1 tem multiplicidade geométrica (logo algébrica, já que A é simétrica) maior ou igual a 2. Podemos então escolher \mathbf{u} e \mathbf{v} dois autovetores ortonormais associados a λ_1 e a partir deles, definir outros autovetores associados a λ_1 pondo

$$\mathbf{u}' = \begin{bmatrix} u_1 + |u_1| \\ u_2 + |u_2| \\ \vdots \\ u_n + |u_n| \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}' = \begin{bmatrix} v_1 + |v_1| \\ v_2 + |v_2| \\ \vdots \\ v_n + |v_n| \end{bmatrix},$$

onde u_i e v_i são as coordenadas de \mathbf{u} e \mathbf{v} , respectivamente. Então $u_i + |u_i| \geq 0$ para todo $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, e portanto, $u_i + |u_i| > 0$ para todo i , $i = 1, \dots, n$; de fato, caso contrário, usando a mesma estratégia da prova de (i), concluiríamos que a matriz A não seria irredutível. Da mesma forma, $v_i + |v_i| > 0$ para todo i , $i = 1, \dots, n$. Mas isto nos diz que os vetores ortonormais \mathbf{u} e \mathbf{v} têm todas as coordenadas positivas, o que é absurdo. Assim, a multiplicidade de λ_1 é igual a 1 e $\lambda_1 > \lambda_2$.

(iii) Fixemos i , $1 \leq i \leq n$. Notemos que, se $\mathbf{v}^{(i)} = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]^T$ é um autovetor unitário de A associado a λ_i então

$$|\lambda_i| = |\mathbf{v}^{(i)T} A \mathbf{v}^{(i)}| = \left| \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{kl} v_k v_l \right| \leq \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{kl} |v_k| |v_l| \leq \lambda_1.$$

Logo $|\lambda_i| \leq \lambda_1$ para todo i , $1 \leq i \leq n$.

■

Índice

- J , 44
- \mathbb{M}_n , 38
- $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T$, 38
- índice de G , 28
- índice do Laplaciano, 100
- árvore, 17
- árvore geradora, 87
- Möbius Ladder*, 51
- cocktail party graph*, 45
- join* de grafos, 19
- aresta, 13
- autovalor do grafo G , 28
- autovalores simples, 170
- cadeia, 15
- cadeia aberta, 16
- cadeia fechada, 15
- caminho, 16
- caracterizado pelo seu espectro, 54
- centopeia, 155
- centralidade de autovetor do um vértice, 36
- ciclo, 16
- ciclo hamiltoniano, 60
- componente conexa, 16
- comprimento de um caminho ou de um ciclo, 16
- conectividade algébrica, 100
- conectividade de arestas, 103
- conectividade de vértices, 103
- conjunto de corte, 105
- corte maximal de um grafo, 105
- cubo, 68
- desigualdades de Cauchy, 189
- diâmetro, 21
- distância entre um par de vértices, 21
- energia Laplaciana de um grafo, 121
- energia de um grafo, 57
- entrelaçamento de autovalores, 189
- espectro de G , 28
- espectro do Laplaciano de um grafo, 82
- floresta, 17
- grafo, 13
- grafo k -partido, 17

- grafo autocomplementar, 119
- grafo bipartido, 17
- grafo bipartido completo, 18
- grafo cúbico, 24
- grafo circulante, 47
- grafo complementar de um
 grafo, 18
- grafo completo, 15
- grafo conexo, 16
- grafo de Moore, 22
- grafo de Petersen, 22, 66, 77
- grafo desconexo, 16
- grafo estrela, 119
- grafo exato, 108
- grafo hiperenergético, 61
- grafo regular de grau k ou
 k -regular, 14
- grafo threshold, 157, 158
- grafo totalmente desconexo,
 54
- grafo tripartido, 17
- grafo trivial, 13
- grafo união, 19
- grafo-linha, 18
- grafos, 13
- grafos coespectrais, 53
- grafos isomorfos, 52
- grafos moleculares, 57
- grafos simples, 13
- grau de um vértice, 13
- grau mínimo, 20
- grau máximo, 20
- grau médio de um grafo, 20
- hiperoctaedro, 45
- inércia de matriz, 192
- incerteza coespectral, 136
- invariantes de grafo, 52
- isomorfismo, 52
- Laplaciano de um grafo, 81
- matriz de incidência com re-
 speito a uma dada
 orientação, 83
- matriz característica da par-
 tição, 190
- matriz circulante, 48
- matriz de adjacência, 28
- matriz de incidência, 71
- matriz diagonal dos graus,
 81
- matriz irredutível, 195
- Matriz Laplaciana, 81
- matriz Laplaciana, 81
- matriz Laplaciana sem sinal,
 124
- matriz não negativa, 195
- matriz positiva, 195
- matriz quociente, 190
- matriz redutível, 195

- matrizes congruentes, 145, 192
- menor principal, 30
- partição equilibrada, 190
- partição regular, 190
- pipa, 67
- polinômio característico de
 G , 28
- polinômio característico da
 matriz Laplaciana sem
 sinal, 124
- Princípio de Rayleigh, 186
- produto cartesiano de grafos,
 20
- raio espectral de um grafo,
 36
- semirregular, 109
- soma de grafos, 19
- subgrafo, 14
- subgrafo induzido, 14
- submatriz principal, 30
- Teorema de Entrelaçamento
 de Cauchy, 189
- Teorema de entrelaçamento
 para matriz Lapla-
 ciana, 86
- Teorema do entrelaçamento,
 34
- traço, 158
- triângulo, 16
- vértice, 13
- vértices adjacentes, 13
- vetor corretor, 110