



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE ARRAIAS
CURSO DE LICENCIATURA EM MATEMÁTICA**

RENATO PEREIRA GOMES

**TEORIA DE GRAFOS: ALGUMAS APLICAÇÕES E UMA INTRODUÇÃO A
TEORIA ESPECTRAL**

Arraias (TO)

2022

Renato Pereira Gomes

Teoria de Grafos: Algumas Aplicações e uma Introdução a Teoria Espectral

Monografia apresentada à Universidade Federal do Tocantins (UFT), Campus Universitário Prof. Dr. Sérgio Jacintho Leonor, curso de Licenciatura em Matemática, para obtenção do título de bacharel/licenciado em Matemática e aprovado em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Orientador (a): Prof. Me. Adriano Rodrigues.

Arraias (TO)

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

G633t Gomes, Renato Pereira.
Teoria de grafos: algumas aplicações e uma introdução à teoria espectral.
/ Renato Pereira Gomes. – Arraias, TO, 2022.
63 f.

Monografia Graduação - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus
Universitário de Arraias - Curso de Matemática, 2022.
Orientador: Adriano Rodrigues

1. Teoria de Grafos. 2. Matriz de Adjacência. 3. Matriz Laplaciana. 4.
Espectro de um Grafo. I. Título

CDD 510

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Renato Pereira Gomes

Teoria de Grafos: Algumas Aplicações e uma Introdução a Teoria Espectral

Monografia apresentada à UFT – Universidade Federal do Tocantins – Campus Universitário de Arraias, Curso de Licenciatura em Matemática foi avaliado para a obtenção do título de Licenciado em Matemática e aprovado em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 13 /12/2022

Banca Examinadora



Prof. Ms. Adriano Rodrigues, (UFT)



Prof. Dra. Gisele Detomazi Almeida, (UFT)



Prof. Dr. Eudes Antônio da Costa, (UFT)

AGRADECIMENTOS

Aproveito este espaço para fazer alguns agradecimentos especiais. Primeiramente a Deus, pelo dom da vida e por estar sempre em meu auxílio nos momentos mais difíceis, alimentando a minha fé e o meu espírito.

Agradeço a minha mãe, dona Ivani, a mulher mais importante do mundo, sem dúvidas a minha maior riqueza, que esta sempre ao meu lado, não importa as circunstâncias. Agradeço também ao meu pai José e ao meu irmão Cássio por todo apoio e carinho de sempre. Estendo os meus agradecimentos a todos os meus familiares, tios, tias, primos e primas, obrigado por todo carinho e pelos momentos partilhados.

Um agradecimento especial a minha namorada Jordana Alves, companheira de curso e da vida, pelo apoio e carinho de sempre, por estar ao meu lado em todos os momentos, bons e ruins, por me incentivar e acreditar que eu seria capaz.

Quero agradecer também a todos amigos e companheiros de jornada, em especial a meu grande amigo e colega de curso Thiago Aparecido, pelos momentos de aprendizado, vivências e experiências compartilhadas.

Quero agradecer a todos os professores que fazem parte do meu percurso acadêmico por todos ensinamentos aprendizados compartilhados, em especial ao meu professor orientador Me. Adriano Rodrigues por todo profissionalismo, apoio, paciência e orientação dada ao longo deste curso, muito obrigado.

Por fim, dedico este trabalho aos meus avós Ascanio e Maria, os quais iniciaram este percurso junto a mim, mas que infelizmente não estão mais aqui, suas partidas são a razão da minha maior tristeza, eram dono dos maiores e melhores ensinamentos e é deles que tiro forças e motivação para seguir em frente. Este trabalho é inteiramente dedicado em memória deles. Obrigado por tudo!

RESUMO

O presente trabalho tem por objetivo apresentar um estudo sobre a Teoria de Grafos, bem como apresentar algumas de suas aplicações buscando articular os conceitos de Grafos a conhecimentos de Álgebra Linear. Para tal, se busca evidenciar as características dos diferentes tipos de grafos, sua estrutura e definições. Mostraremos o primeiro teorema estabelecido pelo matemático Leonard Euler ao resolver o problema das pontes de Königsberg e algumas aplicações utilizadas em jogos. Apresentaremos formas de representar os grafos por meio de matrizes específicas, dando mais ênfase a matriz de adjacência e matriz laplaciana, as quais abordaremos algumas de suas propriedades, especialmente o polinômio característico, valores próprios e vetores próprios, bem como um estudo de seus respectivos espectros. Será apresentada uma aplicação no ramo da Química, a qual busca descobrir a presença ou não de carbono quaternário em dada molécula em estudo.

Palavras-chaves: Teoria de Grafos. Matriz Laplaciana. Matriz de Adjacência. Espectro de um Grafo.

ABSTRACT

The present work aims to present a study on the Theory of Graphs, as well as to present some of its applications seeking to articulate the concepts of Graphs to the knowledge of Linear Algebra. To this end, we seek to highlight the characteristics of different types of graphs, their structure and main definitions. We will show the first theorem established by the mathematician Leonard Euler when solving the problem of Konigsberg bridges and some applications used in games. We will present ways of representing graphs by means of specific matrices, giving more emphasis to the adjacency matrix and Laplacian matrix, which we will approach some of their properties, especially the characteristic polynomial, eigenvalues and eigenvectors, as well as a study of their respective specters. An application in the field of Chemistry will be presented, which seeks to discover the presence or absence of quaternary carbon in a given molecule under study.

Keywords: Graph Theory. Laplacian Matrix. Adjacency Matrix. Spectrum of a Graph.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Representação da cidade de Königsberg.	8
Figura 2	– Modelo matemático do problema das 7 pontes.	9
Figura 3	– Exemplo simples de um Grafo.	10
Figura 4	– Exemplo de um Grafo com laços.	12
Figura 5	– Exemplo de um multigrafo.	12
Figura 6	– Exemplo de um Grafo desconexo.	13
Figura 7	– Exemplo de um Grafo conexo.	13
Figura 8	– Exemplo de grafos isomorfos.	14
Figura 9	– Exemplo de um Grafo completo K_5	15
Figura 10	– Exemplo de um Grafo vazio.	15
Figura 11	– Exemplo de subgrafos.	15
Figura 12	– Exemplo de um Grafo regular de grau 3.	16
Figura 13	– Exemplo de um caminho P_7	16
Figura 14	– Exemplo de um ciclo C_7	17
Figura 15	– Exemplo de um grafo com ponte.	17
Figura 16	– Exemplo de um grafo de árvore.	18
Figura 17	– Movimentos do rei.	22
Figura 18	– Grafo do rei.	22
Figura 19	– Margem esquerda: raposa, milho, galinha, homem e o barco.	23
Figura 20	– Margem esquerda: raposa, milho. Margem direita: barco, homem, galinha. ..	23
Figura 21	– Grafo que representa o Problema da travessia do rio.	24
Figura 22	– Grafos dos sólidos platônicos.	25
Figura 23	– Problema das casas.	27
Figura 24	– Grafos bipartidos.	28
Figura 25	– Grafo bipartido $K_{3,3}$ que representa o problema das casas.	29
Figura 26	– Grafo G	42
Figura 27	– Grafo regular de grau 3.	46
Figura 28	– Grafo regular de grau 3.	49
Figura 29	– Grafo regular de grau 3.	52
Figura 30	– Grafo G	55
Figura 31	– Figura de um Grafo molecular.	59

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	PRIMEIRAS DEFINIÇÕES	10
2.1	Grau de um Vértice	10
2.2	Primeiros resultados	11
3	APLICAÇÕES DE GRAFOS EM JOGOS	20
3.1	Grafos Eulerianos	20
3.2	Grafo e o Jogo de Xadrez	21
3.3	Grafo do problema da travessia do rio	22
3.4	Grafos Planares	24
3.4.1	O Problema das Casas	27
4	ESPECTRO DE UM GRAFO	30
4.1	Alguns conceitos de matriz	30
4.1.1	Alguns tipos de matrizes	30
4.1.2	Operações com matrizes	31
4.1.3	Determinantes	33
4.1.3.1	<i>Determinantes de matrizes em Blocos</i>	34
4.1.4	Valores próprios e vetores próprios	37
4.2	Representação de um grafo através de uma matriz	38
4.2.1	Matriz de Incidência	38
4.2.2	Matriz de Adjacência	38
4.2.3	Matriz Laplaciana	40
4.3	Espectro de um grafo	41
4.3.1	Casos em que se relacionam Matriz de Adjacência e a teoria espectral de grafos	44
4.3.2	Casos em que se relacionam Matriz Laplaciana e a teoria espectral de grafos	51
4.3.3	Energia de um Grafo	57
4.3.3.1	<i>Energia adjacente de um grafo</i>	57
4.3.3.2	<i>Energia laplaciana de um grafo</i>	58
4.3.4	Uma aplicação de energia na química	58
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	61
	REFERÊNCIAS	62

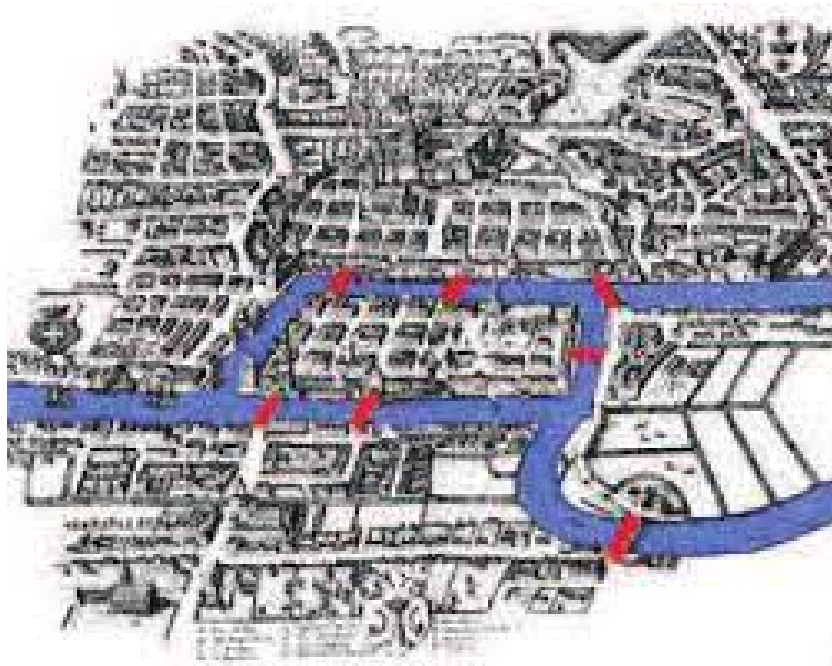
1 INTRODUÇÃO

O presente trabalho trata de um estudo sobre a Teoria de Grafos com intuito de apresentar seus principais conceitos articulando com algumas aplicações práticas.

O surgimento da Teoria de Grafos é datado do início do século XVIII, a partir de um problema baseado nas pontes da cidade de Königsberg, cidade da Rússia que nos dias atuais é conhecida como Calinindrado. Königsberg é banhada por um rio chamado de Pregel, seu leito dividia a cidade em quatro faixas de terra ao qual existe sete pontes que possibilitava o acesso dos cidadãos às localidades, como ilustrado na Figura 1.

Os moradores se indagavam se era possível partir de um ponto da cidade e atravessar todas as setes pontes uma única vez e voltar ao ponto de partida. Daí surge o problema das sete pontes de Königsberg.

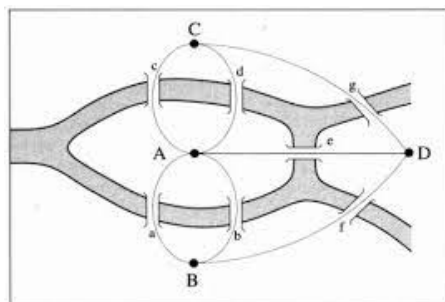
Figura 1: Representação da cidade de Königsberg.



Fonte: CORREIA, Stephany Priscila, 2019, pg. 33.

O matemático Leonhard Euler (1707 – 1783) foi desafiado a resolver este problema singular, tido até como banal, mas que causava grande repercussão. Euler propôs um modelo matemático, como na Figura 2, onde as regiões A, B, C, D representam as porções de terra e as ligações entre essas regiões representam as pontes. Essa estrutura é conhecida nos dias de hoje como **Grafo**.

Figura 2: Modelo matemático do problema das 7 pontes.



Fonte: CORREIA, Stephany Priscila, 2019, pg. 34.

Apesar de ter suas origens no início do século XVIII, a teoria de grafos se desenvolve notoriamente na segunda metade do século XX, com o desenvolvimento, contribuições e avanços computacionais. Nesse sentido, essa pesquisa tem como questão norteadora a seguinte pergunta: quais os principais conceitos da Teoria de Grafos e de que maneira tal teoria se relaciona com a Álgebra Linear?

Portanto, a presente monografia tem por objetivo apresentar um estudo sobre a Teoria de Grafos, bem como apresentar algumas de suas aplicações buscando articular os conceitos de Grafos à Álgebra Linear. Evidenciando assim, que estudar sobre grafos é extremamente relevante, visto que esta área de pesquisa é relativamente recente e que ao mesmo tempo possui um amplo campo de pesquisa com inúmeras aplicabilidades no dia a dia. Portanto, este trabalho é uma oportunidade de aprofundar os conhecimentos sobre este tópico, bem como pode contribuir para que surjam novos resultados aplicáveis para a Matemática.

Para atingir os objetivos traçados, no que se refere a metodologia adotada, será empregado uma pesquisa bibliográfica de cunho qualitativo. Sendo este o procedimento para buscar os conhecimentos necessários acerca do tema estudado e para fundamentar o desfecho do que se pretende desenvolver com esse estudo.

No capítulo 2 abordamos as primeiras definições a respeito da Teoria de Grafos, bem como estes estão estruturados buscando evidenciar as características dos diferentes tipos de grafo. Este capítulo é muito importante para a compreensão do trabalho como um todo.

No capítulo 3 apresentamos algumas aplicações da Teoria de Grafos, bem como seu primeiro teorema estabelecido pelo matemático Leonard Euler ao resolver o problema das pontes de Königsberg e algumas aplicações utilizadas em jogos.

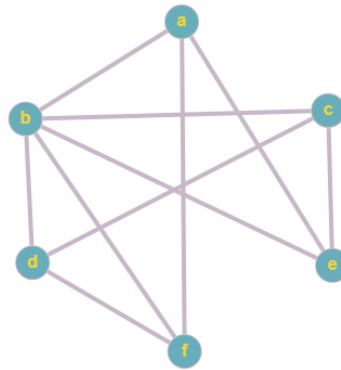
No quarto capítulo exploraremos alguns resultados da Teoria de Grafos os quais utilizam dos conhecimentos de Álgebra Linear tais como, valores próprios, vetores próprios e o espectro de matrizes. Por fim, uma aplicação desses resultados no ramo da química.

2 PRIMEIRAS DEFINIÇÕES

Os Grafos são utilizados para representar modelos matemáticos, sua abordagem permite descrever detalhadamente situações existentes em redes complexas, com diversas aplicações nas áreas de infraestrutura, transporte, economia, redes sociais etc.

A estrutura de um Grafo é composta por um conjunto de pontos, chamados de *vértices*, que representa os dados do problema e um conjunto de linhas, chamadas de *arestas*, que representa as interações entre os vértices. Veja a Figura 3 abaixo.

Figura 3: Exemplo simples de um Grafo.



Fonte: Autor.

Um Grafo, geralmente, é representado pela letra maiúscula G . Cada vértice é denotado por letras minúsculas do alfabeto latino. Uma aresta que conecta o vértice x ao vértice y é representada pelo par (x,y) . O conjunto dos vértices é denotado por V e o conjunto das arestas é denotado por A . O número de vértices é denotado por $|V|$ ou por n e o número de arestas é denotado por $|A|$ ou por m .

No exemplo da Figura 3 temos

$$V = \{a, b, c, d, e, f\},$$

e

$$A = \{(a,b), (a,f), (a,e), (b,c), (b,d), (b,e), (b,f), (d,f), (d,c), (c,e)\}.$$

Temos ainda que $n = 6$ e $m = 10$.

2.1 Grau de um Vértice

Observe, na Figura 3, que os vértices possuem diferentes ligações, por exemplo, o vértice a possui 3 arestas ligadas a ele, o vértice b possui 5 arestas ligadas a ele, o vértice d possui 3 arestas ligadas a ele, e assim por diante.

Definição 2.1.1. Quando uma aresta está ligada a um vértice v , se diz que esta aresta é incidente ao vértice v .

Definição 2.1.2. Quando dois vértices u e v estão ligados por uma aresta, diz-se que u e v são adjacentes.

Definição 2.1.3. A quantidade de arestas incidentes a um vértice v é chamado de Grau do vértice v e é denotado por $d(v)$.

Na Figura 3 temos, $d(a) = 3$, $d(b) = 5$, $d(c) = 3$, $d(d) = 3$, $d(e) = 3$ e $d(f) = 3$. Concluimos então que a soma dos graus desse grafo é 20, que é o dobro da quantidade de arestas, dado por $m = 10$. Isso não é uma coincidência, como veremos no Teorema 2.2.1 a seguir.

2.2 Primeiros resultados

Teorema 2.2.1. Para todo grafo G , a soma dos graus de seus vértices é sempre o dobro do número de arestas. Em notação matemática,

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

Demonstração. Dada uma aresta $(a, b) \in G$ incidente aos vértices a e b , ela contribui com um grau para a soma dos graus de a e b . Portanto, cada aresta contribui duas vezes para o somatório dos graus de G . Assim obtemos 2.2.1. ■

Corolário 2.2.2. Todo grafo G possui um número par de vértices de grau ímpar.

Demonstração. Suponha que um grafo G possui um número ímpar de vértices de grau ímpar, digamos que $n = 2k + 1$ vértices de grau ímpar. E suponha que $2X_1 + 1$ seja o grau do vértice x_1 , $2X_2 + 1$ seja o grau do vértice x_2 , assim sucessivamente até que $2X_{2n+1} + 1$ seja o grau do vértice x_{2n+1} . Dessa forma, a soma dos graus destes vértices é:

$$\begin{aligned} (2X_1 + 1) + (2X_2 + 1) + \dots + (2X_{2n+1} + 1) &= \sum_{i=1}^{2k+1} (2X_i + 1) \\ &= \left(\sum_{i=1}^{2k+1} 2X_i \right) + \left(\sum_{i=1}^{2k+1} 1 \right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^{2k+1} (2X_i) \right) + (2k + 1) \\ &= \left(2 \sum_{i=1}^{2k+1} X_i \right) + (2k + 1) \\ &= 2 \left(k + \sum_{i=1}^{2k+1} X_i \right) + 1 \end{aligned}$$

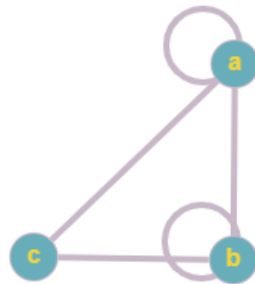
que é um número ímpar. Por outro lado, a soma dos graus dos vértices de grau par é ainda par. Como a soma de um número par com um número ímpar é um número ímpar, temos que se o número de vértices de grau ímpar fosse ímpar, a soma dos graus dos vértices de G seria ímpar o que contradiz o Teorema 2.2.1. ■

Definição 2.2.3. *Uma aresta que liga um vértice a ele mesmo é chamada de **Laço**.*

Veja que na Figura 4 os vértices a e b possuem laços.

Observação 2.2.4. *Para não haver discrepância com o resultado do Teorema 2.2.1, quando calculamos o grau do vértice temos que contar o laço duas vezes (uma para cada extremidade da aresta).*

Figura 4: Exemplo de um Grafo com laços.



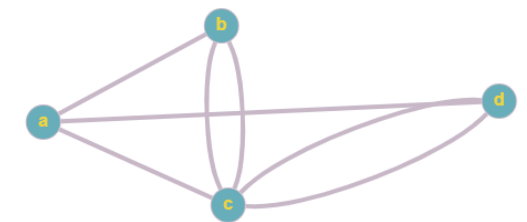
Fonte: Autor.

Definição 2.2.5. *Quando dois vértices estão ligados por mais de uma aresta o grafo recebe o nome de **multigrafo**.*

Definição 2.2.6. *Grafos que não possui laços ou arestas múltiplas são chamados **grafos simples**.*

Para os resultados futuros desse trabalho só serão considerados os grafos simples.

Figura 5: Exemplo de um multigrafo.

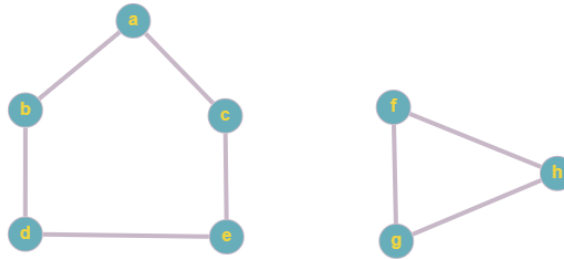


Fonte: Autor.

Definição 2.2.7. Quando um grafo possui partes desconectadas, este recebe o nome de **grafo desconexo**.

Na Figura 6, o "pentágono" e o "triângulo" são as chamadas **componentes conexas do grafo desconexo**.

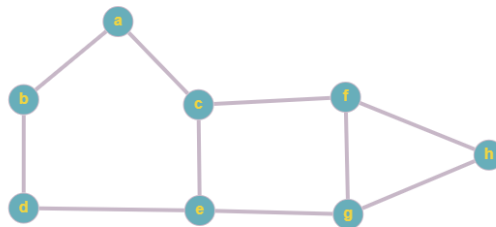
Figura 6: Exemplo de um Grafo desconexo.



Fonte: Autor.

Definição 2.2.8. Um grafo cuja componentes estão conectadas recebe o nome de **grafo conexo**.

Figura 7: Exemplo de um Grafo conexo.



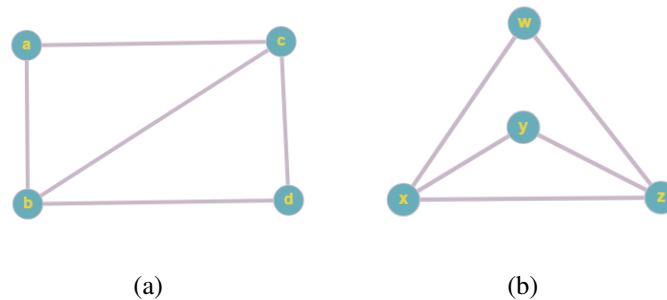
Fonte: Autor.

Quando dois grafos representam a mesma situação, diz-se que eles são **grafos isomorfos**. Claro, estes grafos terão a mesma quantidade de vértices e arestas e outras características mais em comum. Por isso vamos a uma definição mais técnica:

Definição 2.2.9. Dois grafos G_1 e G_2 são isomorfos se existe uma função f que faça a correspondência biunívoca entre os conjuntos dos vértices dos grafos preservando suas adjacências.

Veja o exemplo da Figura 8.

Figura 8: Exemplo de grafos isomorfos.



Fonte: Autor.

a bijeção f que faz as adjacências dos vértices é dada por:

$$\begin{aligned} f & : a \longleftrightarrow w \\ & \quad b \longleftrightarrow x \\ & \quad c \longleftrightarrow z \\ & \quad d \longleftrightarrow y \end{aligned}$$

Observe que se tomarmos uma aresta no primeiro grafo, por exemplo a aresta $(a;b)$, a bijeção fará a correspondência com $(w;x)$ que é uma aresta no segundo grafo. Quando consideramos dois vértices que não são adjacentes, digamos os vértices a e d , a bijeção fará correspondência com dois vértices w e y que também não são adjacentes no segundo grafo.

Definição 2.2.10. *Vizinhança aberta de v é o conjunto de vértices adjacentes a v . Denotada por $N(v)$.*

Definição 2.2.11. *Vizinhança fechada de v inclui a vizinhança e o próprio v . Denotada por $N[v]$ ou $N(v) \cup \{v\}$.*

Definição 2.2.12. *A sequência de graus de um grafo é uma sequência não crescente formada pelos graus dos vértices do grafo.*

Por exemplo, uma sequência do tipo $\{5, 3, 3, 3, 3, 3\}$ é a sequência de graus de um grafo. Ou seja, um vértice possui grau 5 e os demais vértices possuem grau 3.

Definição 2.2.13. *Um vértice de grau 0 é chamado de **isolado**.*

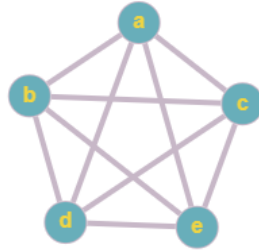
Definição 2.2.14. *O vértice de menor grau de um grafo é chamado de **mínimo**. É denotado por $\delta(G)$.*

Definição 2.2.15. *O vértice de maior grau de um grafo é chamado de **máximo**. É denotado por $\Delta(G)$.*

Definição 2.2.16. Um grafo é dito **completo** quando todo par de vértices é ligado por uma aresta. Um grafo completo com n vértices é denotado por K_n .

O exemplo da Figura 9 é denotado por K_5 .

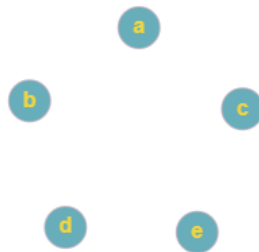
Figura 9: Exemplo de um Grafo completo K_5 .



Fonte: Autor.

Definição 2.2.17. Um grafo é dito **nulo** ou **vazio** quando o conjunto de arestas $|A(G)|$ é vazio, ou seja, o grafo possui apenas o conjunto dos vértices.

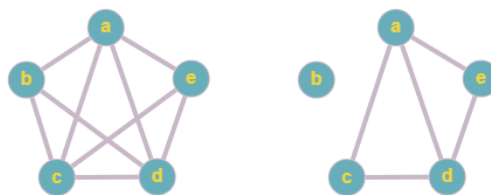
Figura 10: Exemplo de um Grafo vazio.



Fonte: Autor.

Definição 2.2.18. G' é um **subgrafo** de G se $V(G') \subseteq V(G)$ e $A(G') \subseteq A(G)$.

Figura 11: Exemplo de subgrafos.



(a) G

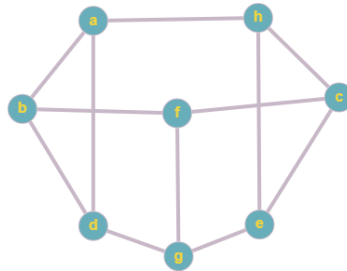
(b) G'

Fonte: Autor

Definição 2.2.19. Um grafo é denominado **regular** quando todos os seus vértices tem o mesmo grau "K", chamado de grafo regular de grau K ou de grafo K-regular.

A Figura 12 mostra um grafo regular de grau 3.

Figura 12: Exemplo de um Grafo regular de grau 3.

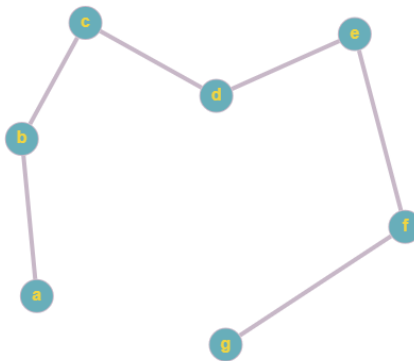


Fonte: Autor.

Definição 2.2.20. Dados dois vértices v_0 e v_k de um grafo, chamamos de **caminho** de v_0 a v_k uma sequencia de arestas $\{(v_0, v_1), (v_1, v_2), (v_2, v_3), \dots, (v_{k-1}, v_k)\}$ conectando esses vértices. A notação do caminho é P_k onde k é a quantidade de vértices.

Na Figura 13 temos um caminho P_7 , conectando os vértices a e g .

Figura 13: Exemplo de um caminho P_7 .



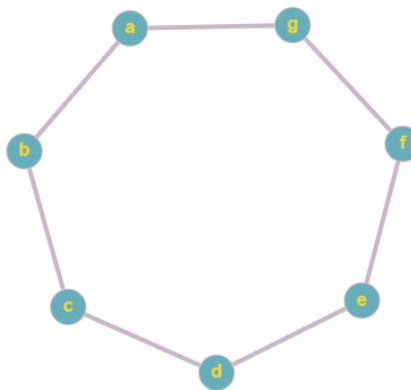
Fonte: Autor.

Definição 2.2.21. **Ciclo** é um grafo regular e conexo onde todos os seus vértices tem grau 2. A notação de ciclo é C_n , onde n é a quantidade de vértices do grafo.

A Figura 14 mostra um ciclo C_7

Observação 2.2.22. Todo ciclo pode ser entendido como um caminho fechado, ou seja, $v_0 = v_k$.

Figura 14: Exemplo de um ciclo C_7 .



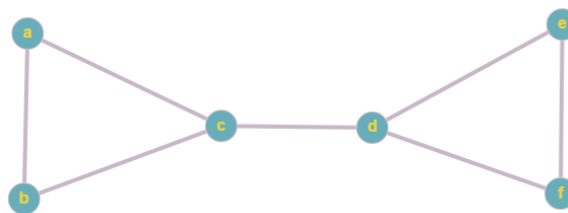
Fonte: Autor.

Definição 2.2.23. Uma *ponte*, conhecida também como *aresta de corte*, é uma aresta, cuja sua exclusão, aumenta o número de componentes conectados do grafo.

Equivalentemente, uma aresta é uma ponte, se e somente se, ela não está contida em qualquer ciclo. As definições de ponte estão estreitamente relacionadas com os conceitos de **vértices de articulação**.

Definição 2.2.24. *Vértices de articulação* são vértices que pertencem a todos os caminhos possíveis entre algum outro par de vértices.

Figura 15: Exemplo de um grafo com ponte.



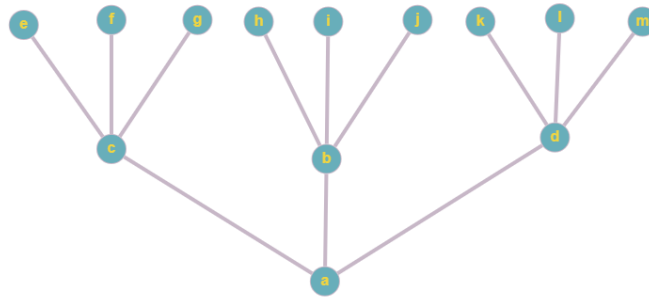
Fonte: Autor.

Na Figura 15 a aresta $(c;d)$ é uma ponte, pois a sua exclusão do grafo resulta em dois componentes desconectados. Os vértices c e d são os vértices de articulação, pois pertencem a todos os caminhos possíveis para se conectar um vértice do triângulo da esquerda a outro vértice do triângulo da direita.

Definição 2.2.25. *Árvore* é um grafo conexo que não possui ciclos.

Veja o exemplo da Figura 16.

Figura 16: Exemplo de um grafo de árvore.



Fonte: Autor.

Esta é uma importante família de grafos. As várias características das árvores estão reunidas no teorema a seguir:

Teorema 2.2.26. *Seja $G = (|V|, |A|)$ um grafo com $|V| = n$ vértices e $|A| = m$ arestas. As seguintes afirmações são equivalentes:*

- (1) G é uma árvore.
- (2) G tem $n - 1$ arestas.
- (3) A adição de uma aresta em G produz um único ciclo.
- (4) Toda aresta de G é uma ponte.
- (5) Todo par de vértices de G é ligado por um único caminho.

Demonstração. (1) \Rightarrow (2) : Utilizando indução em n , ou seja, sobre o número de vértices de G , temos:

Para $n = 1$, a única aresta possível para G seria um laço, entretanto laços são ciclos. Mas por definição G não possui ciclos. Segue então,

$$m = n - 1 = 1 - 1 = 0$$

Como esperado.

Supondo agora que esse resultado seja válido para $1 \leq K \leq n$.

Seja G uma árvore com $n + 1$ vértices, como $n \geq 2$ e G é conexo, existe pelo menos uma aresta em G . Considere então a aresta (u, v) , retirando essa aresta, como G não possui ciclos, os vértices u e v deixam de ser conectados, consequentemente G se torna desconexo. Seja G_1 e G_2 as componentes conexas de G . Note que G_1 e G_2 não contêm ciclos, pois se tivessem induziriam ciclos em G . Segue então que G_1 e G_2 são árvores com $|V(G_1)| \leq K$, $|V(G_2)| \leq K$

e $n + 1 = |V(G_1)| + |V(G_2)|$. Dessa forma, pela hipótese de indução

$$|A(G_1)| = |V(G_1)| - 1 ; |A(G_2)| = |V(G_2)| - 1$$

Logo,

$$\begin{aligned} |A(G)| &= |A(G_1)| + |A(G_2)| + 1 \\ &= [|V(G_1)| - 1] + [|V(G_2)| - 1] + 1 \\ &= |V(G_1)| + |V(G_2)| - 2 + 1 \\ &= (n + 1) - 1 \\ &= n \end{aligned}$$

concluindo a demonstração.

(2) \Rightarrow (3) : Seja uma aresta (u, v) a ser adicionada ao grafo G . Por hipótese G é conexo, portanto, já existe um caminho entre os vértices u e v , ao adicionar a aresta (u, v) , cria-se um ciclo em G , como G não possui ciclos, o ciclo criado com a adição da aresta (u, v) é único.

(3) \Rightarrow (4) : Pela hipótese, G não possui ciclos. Dessa forma, dados dois vértices u e v é possível determinar um caminho entre eles. Subtraindo uma aresta (x, y) do caminho entre quaisquer dois vértices u e v , desconecta o grafo G , ou seja, $G - (x, y)$ é desconexo. Portanto, toda aresta de G é uma ponte.

(4) \Rightarrow (5) : Suponha que quaisquer dois vértices u e v pertencentes a G estejam conectados por dois caminhos distintos, sejam esses caminhos chamados de P' e P'' . Dessa forma, a união desses caminhos, $(P'(u, v) \cup P''(u, v))$, é um ciclo. Assim, a retirada de uma aresta pertencente a um dos caminhos entre os vértices u e v não torna o grafo desconexo, contrariando a hipótese. Portanto, o caminho entre quaisquer dois vértices pertencentes a G é único.

(5) \Rightarrow (1) : Por hipótese existe um único caminho entre quaisquer dois vértices u e v em G , portanto G é conexo. Como o caminho entre u e v é único, não existe um ciclo contendo u e v em G . Dessa forma, G não contém ciclos. Portanto, por definição, G é uma árvore. ■

3 APLICAÇÕES DE GRAFOS EM JOGOS

Nesta seção é apresentado algumas aplicações da teoria de grafos, bem como seu primeiro teorema estabelecido pelo matemático Leonard Euler ao resolver o problema das pontes de Königsberg, faremos também algumas aplicações utilizadas em jogos.

3.1 Grafos Eulerianos

Como visto na Introdução, o problema das sete pontes de Königsberg consistia em partir de um ponto da cidade e atravessar todas as pontes uma única vez e retornar ao ponto de partida. Euler modelou o problema para um grafo, como na Figura 2, além disso, ele demonstra um teorema que estabelece as condições necessárias para atravessar as setes pontes uma única vez e retornar ao ponto de partida.

Antes de irmos ao teorema de Euler e resolvermos o problemas das Pontes de Königsberg, é necessário estabelecer algumas definições.

Definição 3.1.1. *Passeio é uma sequência de arestas do tipo*

$\{(a_0, a_1), (a_1, a_2), (a_2, a_3), \dots, (a_{k-1}, a_k)\}$, *sendo k o tamanho do passeio.*

Observação 3.1.2. *Um passeio cujo todas as arestas são distintas recebe o nome de **Trilha**. Um passeio cujo todas as arestas são distintas e $a_0 = a_k$ recebe o nome **Trilha Fechada**.*

Observação 3.1.3. ***Caminho** é um caso particular de trilha.*

Definição 3.1.4. *Um grafo G que contém m arestas recebe o nome de **Euleriano** se existir uma trilha fechada de comprimento m em G .*

De modo análogo, se conseguimos percorrer todas as arestas de G uma única vez partindo de um vértice e retornando a ele, este é Euleriano.

Começando com um resultado simples, entretanto necessário.

Lema 3.1.5. *Se todo vértice de um grafo G tem grau maior ou igual a 2, então G contém um ciclo.*

Demonstração. Vamos considerar que G não possua arestas múltiplas e/ou laços pois, nesse caso, automaticamente G possui um ciclo.

Para o caso de um grafo simples, escolhemos um vértice qualquer $v_0 \in G$ e iniciamos nossa trilha. Sem perda de generalidade escolhemos v_1 adjacente a v_0 . Dessa forma, para cada $i > 1$, vamos percorrendo a trilha de modo que v_{i+1} é diferente de v_{i-1} e ambos são adjacente a v_i . A hipótese de todos os vértices de G possuir grau maior ou igual a 2 nos garante a existência dessa sequência de vértices. Como G tem um número finito de vértices vai chegar um momento de escolhermos algum vértice já escolhido, obtendo um ciclo. ■

Finalmente o **Teorema de Euler**:

Teorema 3.1.6. *Um grafo conexo G é Euleriano se, e somente se, todos os seus vértices tem grau par.*

Demonstração. (\Rightarrow) Suponha que G possui m arestas e seja K uma trilha fechada pertencente a G de comprimento m . Dessa forma, toda vez que K passa por um vértice qualquer $v \in G$ utiliza de duas arestas, uma para entrar e outra para sair. Sendo K uma trilha fechada, as arestas de G ocorre apenas uma única vez, por consequência o grau de cada vértice deve ser obrigatoriamente par.

(\Leftarrow) Vamos usar indução sobre o número de arestas m de G . Sendo G um grafo conexo com apenas uma aresta, seus vértices possui grau par se, somente se, a aresta em questão for um laço.

Suponha agora que o teorema seja válido para grafos com $m - 1$ arestas. Considere G um grafo conexo com m arestas, cada um de seus vértices tem grau no mínimo 2. Assim, pelo Lema 3.1.5 G tem um ciclo (uma trilha fechada). No meio das trilhas fechadas existentes em G escolhamos uma trilha T com o maior comprimento possível. Se T contiver todo o grafo a demonstração esta completa. Do contrário, retiramos de G as arestas de T , resultando em um grafo, possivelmente desconexo, porém contendo um subgrafo F , conexo com número de arestas menor que m . Ao retirarmos um número par de arestas de cada vértice de T e, por hipótese, todos os vértices do grafo tem grau par, ao menos uma das componentes de F tem vértice em comum com T e todos os vértices de F continuam com grau par. Pela hipótese de indução, F tem uma trilha fechada que perpassa por todos os vértices de F , dessa forma podemos formar uma trilha fechada maior concatenando T com a trilha em F . Porém, isto contraria a maximalidade na escolha de T . ■

Com este resultado demonstrado acima fica fácil resolver o problema das sete pontes de Königsberg. Veja na Figura 2 que é impossível obter uma trilha Euleriana, pois o grafo que representa a situação possui todos os vértices ímpares e, pelo Teorema 3.1.6, uma trilha será Euleriana se, e somente se, possuir todos os vértices pares.

Portanto, não é possível sair de casa e atravessar todas as sete pontes uma, e só uma, vez e retornar para o ponto de partida.

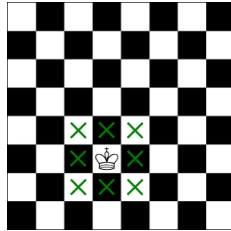
3.2 Grafo e o Jogo de Xadrez

O Xadrez é um jogo de tabuleiro mundialmente conhecido, sendo considerado até como esporte. É disputado entre dois jogadores, utilizando-se de um tabuleiro usual que possui oito linhas e oito colunas, 16 peças nomeadas por peões, torres, cavalos, bispos, um rei e uma rainha. O objetivo do jogo é conquistar o rei do seu adversário.

Embora se assemelhem, cada peça possui movimentos únicos, com exceção do cavalo

todas as peças se movem em linha reta, horizontalmente, verticalmente ou diagonalmente. Vamos observar os movimentos da peça rei, veja Figura 17

Figura 17: Movimentos do rei.

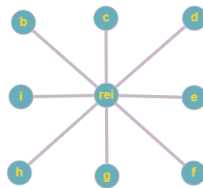


Fonte: https://docs.kde.org/trunk5/pt_BR/knights/knights/piece-movement.html

A Figura 17 mostra os possíveis movimentos do rei naquela posição. Dessa forma o *grafo do rei* será formado pelo vértices adjacentes se, somente se, o rei puder ir com apenas um movimento de um vértice para outro.

A representação do grafo do rei fica assim:

Figura 18: Grafo do rei.



Fonte: Autor.

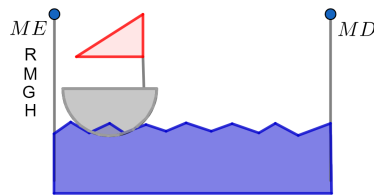
A partir do grafo da Figura 18 conseguimos definir o grafo das outras peças do Xadrez, o grafo da torre, cavalo, bispo e rainha.

3.3 Grafo do problema da travessia do rio

Considere a seguinte situação: Um homem (representado por H) tem em sua posse uma galinha (representada por G), um saco de milho (representado por M) e uma raposa (representada por R). Estes se encontram na margem esquerda ME de um rio. Em determinado momento o homem precisa atravessar para a margem direita MD do rio, para isso ele encontra uma canoa que faz a travessia. Porém, a canoa só pode transportar o homem e mais um de seus pertences por viagem e a canoa não consegue atravessar o rio sozinha. Então o problema consiste em fazer com que o homem consiga atravessar a galinha, o saco de milho e a raposa de modo que, em momento algum, a galinha fique sozinha com o saco de milho ou com a raposa em uma das margens do rio, pois, a galinha sozinha com o saco de milho comerá o milho e a galinha sozinha com a raposa, a raposa comerá a galinha.

Considerando que o homem imagina cada cenário possível antes de atravessar o rio, vamos descrever esses cenários utilizando um grafo. Desta forma, um vértice será um cenário válido e a transição de um cenário para outro será representado por arestas. O barco será denotado por $/B$. Uma representação de um cenário seria: $RMGH/B$: este cenário indica que galinha, homem, milho e raposa estão todos à esquerda do barco, consequentemente estão na margem esquerda do rio (figura 19).

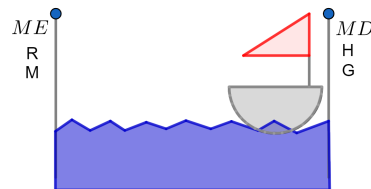
Figura 19: Margem esquerda: raposa, milho, galinha, homem e o barco.



Fonte: Autor.

A representação de outro cenário seria: RM/BHG : Neste cenário, a raposa e o milho estariam na margem esquerda, à esquerda do barco, e o homem e a galinha estariam na margem direita, à direita do barco (figura 20).

Figura 20: Margem esquerda: raposa, milho. Margem direita: barco, homem, galinha.

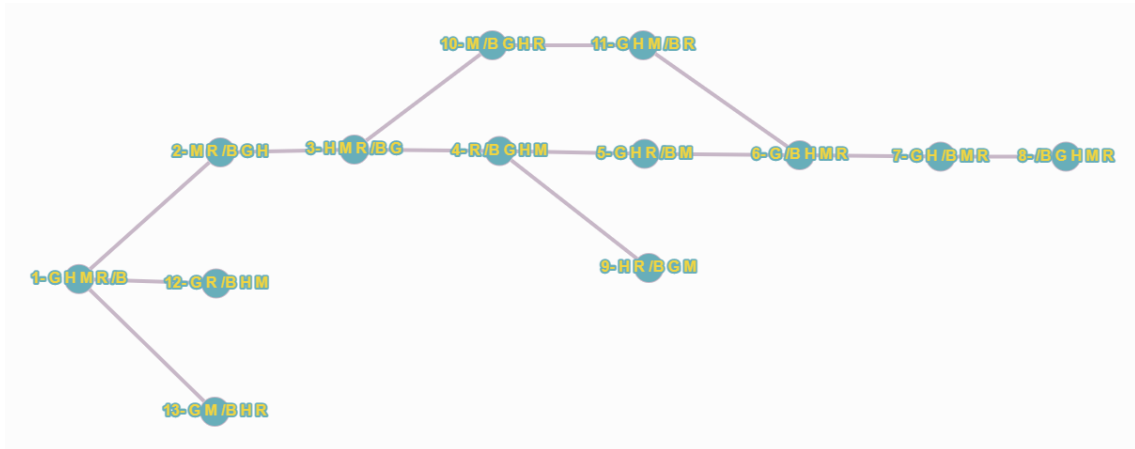


Fonte: Autor.

Seguindo este raciocínio conseguimos construir um grafo que representa as várias possibilidades de se tentar atravessar o rio, veja a figura 21.

Observe no Grafo da Figura 21 existem diferentes caminhos que representam os vários cenários deste problema. Vamos analisar o que acontece em cada um deles (para facilitar a notação vamos utilizar apenas dos números indicados nos vértices do Grafo, a letra grega α para representar o caminho em questão).

Figura 21: Grafo que representa o Problema da travessia do rio.



Fonte: Autor.

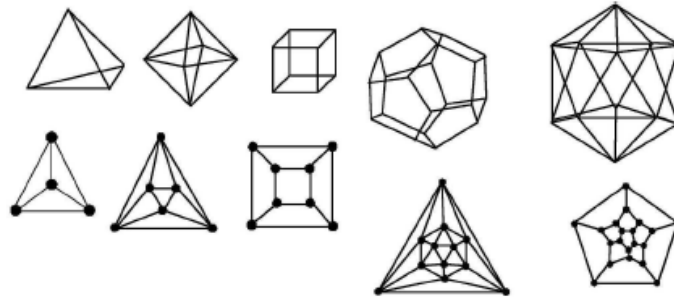
Observe que o caminho $\alpha_1 = \{(1, 13)\}$ possui tamanho igual a uma aresta, pois recai no fato da galinha estar sozinha com o milho na margem esquerda do rio, portanto o problema não é resolvido. O caminho $\alpha_2 = \{(1, 12)\}$ possui o mesmo tamanho de α_1 , pois recai no fato da galinha estar sozinha com a raposa do lado esquerdo do rio, resultando na não solução do problema. Já $\alpha_3 = \{(1, 2), (2, 3), (3, 4), (4, 9)\}$, apesar de possuir mais cenários possíveis, não consegue resolver o problema, pois acaba recaindo no fato da galinha estar sozinha com o milho na margem direita do rio. Os caminhos que resolvem o problema são $\alpha_4 = \{(1, 2), (2, 3), (3, 4), (4, 5), (5, 6), (6, 7), (7, 8)\}$ e $\alpha_5 = \{(1, 2), (2, 3), (3, 10), (10, 11), (11, 6), (6, 7), (7, 8)\}$, pois todos os cenários são possíveis, portanto o homem consegue atravessar galinha, milho e raposa obedecendo a condição da galinha não ficar sozinha com o milho e nem com a raposa em uma das margens do rio.

3.4 Grafos Planares

Definição 3.4.1. Um **grafo planar** é um grafo que pode ser desenhado no plano de tal maneira que suas arestas não se cruzam. De modo análogo, é um grafo onde suas arestas só se encontram nos vértices em que são incidentes.

Os mais conhecidos grafos planares são os grafos que representam os poliedros, por exemplo, os grafos dos cinco sólidos platônicos: tetraedro, cubo, octaedro, dodecaedro e icosaedro.

Figura 22: Grafos dos sólidos platônicos.



Fonte: JURKIEWICZ, Samuel, 2009, pg. 95.

Quando falamos de grafos planares temos que ter em mente que um Grafo que tem ao menos um ciclo divide o plano em regiões, as quais recebem o nome de **faces** (observe que os Grafos de árvores só possui uma única região (face), pois as árvores não possuem ciclos). Vamos representar o número de faces de um grafo planar por f .

A famosa Relação de Euler para poliedros convexos se aplica para grafos planares.

Teorema 3.4.2. *Em um grafo planar conexo vale $f - m + n = 2$.*

Demonstração. Vamos utilizar indução sobre o número de arestas. Temos um grafo G planar conexo qualquer. Supondo que G seja um árvore temos o seguinte:

$$\begin{aligned} f - m + n &= 1 - (n - 1) + n \\ &= 1 + 1 - n + n \\ &= 2. \end{aligned}$$

Supondo agora que G possua um ciclo, então retiramos uma aresta desse ciclo, resultando em um novo grafo F com uma face a menos que G . Nesse sentido, a cada uma aresta retirada de um ciclo pertencente a G resulta em uma face a menos. Pela hipótese de indução, a relação vale para o grafo F . Temos então:

$$(f - 1) - (m - 1) + n = 2.$$

Portanto,

$$f - m + n = 2.$$

■

Notemos que se pode adicionar arestas em um grafo planar sempre que suas faces estiverem limitadas por ciclos de comprimento maior que 3.

Definição 3.4.3. *Grafo maximal planar é uma grafo onde não podemos acrescentar arestas sem comprometer a sua planaridade.*

Os grafos maximais planares tem a sua representação composta por ciclos de comprimento igual a 3. Dito isso, conseguimos chegar a outra relação muito importante.

Teorema 3.4.4. *Em um grafo G planar e conexo, é valido a relação $m \leq 3n - 6$. A igualdade é válida se G é maximal planar.*

Demonstração. Observe que se formos contar as arestas de cada face, estaremos contando duas vezes a quantidade das arestas do grafo G , ou seja, cada aresta pode contribuir com no máximo duas faces. Temos o seguinte:

$$2m = 3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + \dots + if_i ; \quad i \geq 3.$$

Onde f_i são as faces com i arestas.

Sendo a soma das faces dada da seguinte maneira:

$$f = f_3 + f_4 + f_5 + \dots + f_i.$$

Como cada face é limitada por no mínimo por 3 arestas temos:

$$\begin{aligned} 2m &= 3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + \dots + if_i \\ &= (3f_3 + 3f_4 + 3f_5 + \dots + 3f_i) + (f_4 + 2f_5 + \dots + (i-3)f_i) \\ &= 3f + (f_4 + 2f_5 + \dots + (i-3)f_i) \\ &\geq 3f. \end{aligned}$$

Logo,

$$3f \leq 2m. \tag{1}$$

Considerando a relação de Euler temos;

$$f - m + n = 2.$$

Multiplicando por 3,

$$3f - 3m + 3n = 6.$$

Substituindo em 1

$$2m - 3m + 3n \geq 6.$$

Assim,

$$-m + 3n \geq 6.$$

Consequentemente

$$m \leq 3n - 6.$$

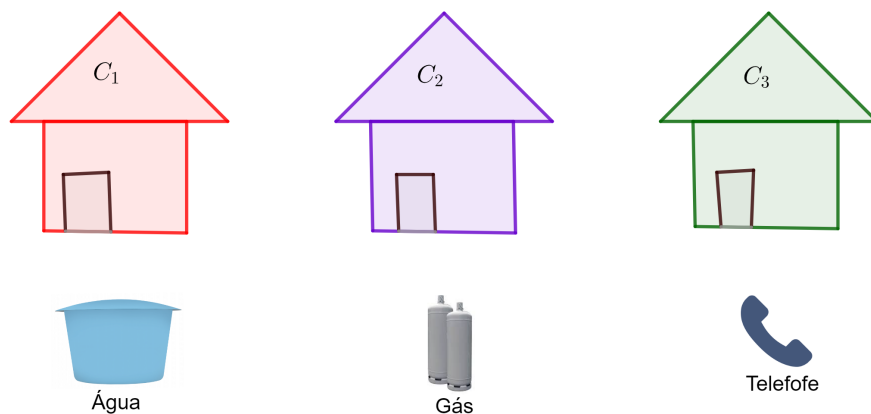
■

O teorema 3.4.4 nos dá uma demonstração de que todos os grafos completos com mais do que 4 vértices não é planar, pois não obedece a relação estabelecida. Por exemplo, em um grafo completo K_5 teremos: $10 > 3 * 5 - 6$, contrariando o teorema.

3.4.1 O Problema das Casas

Este problema é enunciado da seguinte maneira: Temos três casas, para estas precisamos levar redes de água, gás e telefone de modo que as linhas não se interceptem. Como está representado na Figura 23

Figura 23: Problema das casas.



Fonte: Autor.

Vamos apresentar uma solução para este problema através de um modelo de grafo, no caso, de um grafo bipartido.

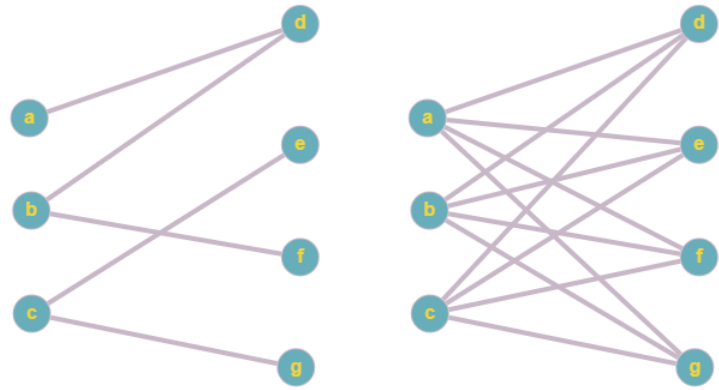
Definição 3.4.5. *Grafo Bipartido* é um grafo G que possui um conjunto V de vértices seccionados formando dois subconjuntos disjuntos V_1 e V_2 de tal forma que toda aresta de G tem uma extremidade em V_1 e outra em V_2 .

Observação 3.4.6. V_1 e V_2 são ditos subconjuntos independentes de G pois não existe arestas ligando vértices de V_1 a vértices de V_1 , o mesmo se aplica a V_2 .

Definição 3.4.7. *Grafo Bipartido Completo* é um grafo bipartido tal que cada vértice de V_1 é adjacente a todos os vértices de V_2 . Tem como notação $K_{p,q}$, onde p e q é o número de vértices de V_1 e V_2 respectivamente.

Na figura 24(a) temos um exemplo de grafo bipartido e na Figura 23(b) temos o exemplo de um grafo bipartido completo $K_{3,4}$.

Figura 24: Grafos bipartidos.



(a) Grafo bipartido

(b) Grafo bipartido completo $K_{3,4}$

Fonte: Autor.

Corolário 3.4.8. *Suponha que G seja um grafo planar, bipartido e conexo no qual vale a relação: $m \leq 2n - 4$.*

Demonstração. Observe que grafos bipartidos só possuem ciclos de comprimento par. Pois, se houver pelo menos um ciclo de comprimento ímpar, necessariamente haverá vértices adjacente num mesmo subconjunto de vértices num grafo bipartido. Desta forma, cada face possui no mínimo 4 arestas. Análogo ao Teorema 3.4.4, segue que:

$$4f \leq 2m. \quad (2)$$

Considerando a relação de Euler, temos:

$$f - m + n = 2.$$

Multiplicando por 4,

$$4f - 4m + 4n = 8.$$

Substituindo em 2,

$$2m - 4m + 4n \geq 8.$$

Assim,

$$-2m + 4n \geq 8$$

Dividindo por 2,

$$-m + 2n \geq 4.$$

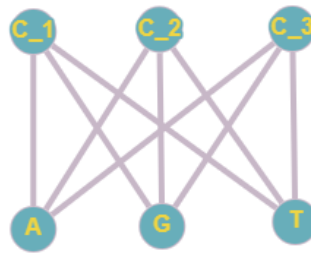
Por fim,

$$m \leq 2n - 4.$$

■

Note que podemos modelar o problema das casas, representado na Figura 23, em um grafo bipartido completo $K_{3,3}$. Veja Figura 25.

Figura 25: Grafo bipartido $K_{3,3}$ que representa o problema das casas.



Fonte: Autor.

Observe que $K_{3,3}$ não é planar, pois não obedece a relação estabelecida pelo Corolário 3.4.1. Uma vez que $9 > 2 * 6 - 4$. Portanto, o problema das casas não possui solução no plano.

4 ESPECTRO DE UM GRAFO

Serão apresentadas nesta seção algumas noções de Álgebra Linear, tais como, alguns conceitos de matriz, determinante de uma matriz, valores próprios e vetores próprios e polinômio característico. Estas noções são importantes para os resultados que serão apresentados na sequência do capítulo.

4.1 Alguns conceitos de matriz

Definição 4.1.1. *É chamado de matriz um quadro/tabela de ordem m por n de elementos (números, funções, polinômios) que estão dispostos em m linhas e n colunas. Cada entrada da matriz é denotado por a_{ij} , onde o índice i variando de $1 \leq i \leq m$ representa a linha e o índice j variando de $1 \leq j \leq n$ representa a coluna a qual esta entrada pertence. Matrizes são representadas por letras maiúsculas do alfabeto Latino ou por $[a_{ij}]$.*

Exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

4.1.1 Alguns tipos de matrizes

Definição 4.1.2. *Matriz-coluna é a matriz de ordem m por 1 .*

Exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix}$$

Definição 4.1.3. *Matriz-linha é a matriz de ordem 1 por n .*

Exemplo:

$$A = [a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13} \quad \cdots \quad a_{1n}]$$

Observação 4.1.4. *As matrizes-linha e as matrizes-coluna são chamadas de **vetores**.*

Definição 4.1.5. *Matriz quadrada é a matriz cujo o número de linhas é igual o número de colunas. A ordem dessa matriz é n por n ou simplesmente n .*

Exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Numa matriz quadrada A de ordem n , as entradas a_{ij} , em que $i = j$ é denominada **diagonal principal** ou simplesmente **diagonal**. Assim, a diagonal é formada pelas entradas:

$$a_{11}, a_{22}, a_{33}, \dots, a_{nn}.$$

Definição 4.1.6. *Matriz identidade é uma matriz quadrada de qualquer ordem que possui as entradas $a_{ij} = 0$ para $i \neq j$. A matriz identidade é indicada por I_n ou por I .*

Exemplo de matriz identidade de ordem 4:

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

Definição 4.1.7. *Matriz escalar é a matriz quadrada cujo as entradas a_{ij} para $i = j$ são iguais entre si e $a_{ij} = 0$ para $i \neq j$.*

Exemplo de matriz escalar:

$$A = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \quad \lambda \in \mathbb{R}.$$

4.1.2 Operações com matrizes

Definição 4.1.8. *Dadas duas matrizes $A = [a_{ij}]$ e $B = [b_{ij}]$ que possuem ordem $m \times n$ são iguais se, somente se, $a_{ij} = b_{ij}$ para todo i e para todo j .*

Exemplo: Seja a matriz $A = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 0 \\ 6 & -3 & 8 \\ 1 & 4 & 8 \\ 2 & -9 & 4 \end{bmatrix}$ e a matriz $B = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 0 \\ 6 & -3 & 8 \\ 1 & 4 & 8 \\ 2 & -9 & 4 \end{bmatrix}$, então $A = B$.

Definição 4.1.9. A *adição* de duas matrizes $A = [a_{ij}]$ e $B = [b_{ij}]$ de ordem $m \times n$ resulta em uma matriz $C = [c_{ij}]$ de tal forma que $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$.

Exemplo 1: Considere as matrizes $A = [a_{ij}]_{4 \times 3}$ e a matriz $B = [b_{ij}]_{4 \times 3}$, logo:

$$A + B = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & a_{13} + b_{13} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & a_{23} + b_{23} \\ a_{31} + b_{31} & a_{32} + b_{32} & a_{33} + b_{33} \\ a_{41} + b_{41} & a_{42} + b_{42} & a_{43} + b_{43} \end{bmatrix} = C$$

Exemplo 2: Seja a matriz $A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 4 & 9 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \\ 2 & 9 & 5 & 8 \end{bmatrix}$ e a matriz $B = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 9 & 5 \\ 8 & 6 & 4 & 3 \\ 0 & 5 & 3 & 2 \end{bmatrix}$. Determine

$(A + B)$.

$$A + B = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 4 & 9 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \\ 2 & 9 & 5 & 8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 9 & 5 \\ 8 & 6 & 4 & 3 \\ 0 & 5 & 3 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 13 & 14 \\ 10 & 9 & 5 & 3 \\ 2 & 14 & 8 & 10 \end{bmatrix}$$

Definição 4.1.10. Produto de uma matriz por escalar. Seja $\lambda \in \mathbb{R}$, o produto de uma matriz $A = [a_{ij}]$ por λ é uma matriz $C = [c_{ij}]$ de tal forma que $c_{ij} = \lambda a_{ij}$.

Exemplo:

$$\lambda \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \lambda a_{13} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \lambda a_{23} \\ \lambda a_{31} & \lambda a_{32} & \lambda a_{33} \\ \lambda a_{41} & \lambda a_{42} & \lambda a_{43} \end{bmatrix}$$

Definição 4.1.11. Matriz transposta. Considere uma matriz A , de ordem $m \times n$, a matriz transposta de A será uma matriz de ordem $n \times m$ que é obtida permutando as linhas pelas colunas de mesmo índice, é representada por A^T .

Exemplo:

Seja a matriz $A_{2 \times 4} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \end{bmatrix}$, a matriz transposta de A será $A_{4 \times 2}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \\ a_{14} & a_{24} \end{bmatrix}$.

4.1.3 Determinantes

O conceito de determinante de uma matriz é entendido como uma função matricial que associa a cada matriz quadrada um escalar que evidencia algumas propriedades da própria matriz, como por exemplo, se a matriz é inversível ou se o sistema linear associado a referida matriz possui ou não soluções. O determinante de uma matriz D é representado por $\det D$ ou por $|D|$.

Exemplo 1: Determinantes de matrizes de ordem 1.

O determinante de uma matriz $D = [d_{11}]$ de ordem 1 é o próprio elemento da matriz. Ou seja, $\det D = d_{11}$.

Exemplo 2: Determinantes de matrizes de ordem 2.

O determinante de uma matriz de ordem 2 é encontrado a partir da diferença entre o produto da diagonal principal e a diagonal secundária.

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

Exemplo 3: Determinantes de matrizes de ordem 3.

O determinante de uma matriz de ordem 3 pode ser encontrado através da regra de **Sarrus**, de maneira semelhante ao processo feito nas matrizes de ordem 2.

$$\det \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = (a_{11} a_{22} a_{33} + a_{12} a_{23} a_{31} + a_{13} a_{21} a_{32}) - (a_{13} a_{22} a_{31} + a_{11} a_{23} a_{32} + a_{12} a_{21} a_{33})$$

De modo geral, podemos encontrar o determinante de matrizes de ordem n utilizando o **Teorema de Laplace**.

Teorema 4.1.12. Teorema de Laplace. *O determinante de uma Matriz A de ordem n é dado por:*

$$\sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} \times a_{ij} \times \det(A_{-i-j})$$

ou

$$\sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} \times a_{ij} \times \det(A_{-i-j}).$$

sendo n o número de linhas da matriz, i é a posição relacionada às linhas, j é a posição com relação às colunas e $\det(A_{-i-j})$ é o determinante da matriz A_{-i-j} , obtida da matriz A , excluindo a linha i e a coluna j .

Exemplo 4. Calcule o determinante da matriz A .

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 3 & 2 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 3 & 7 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Observe que selecionar a linha ou a coluna que possuir a maior quantidade de zeros pode facilitar os cálculos, pois o somatório anterior vai depender das colunas em relação a uma linha i escolhida ou vai depender das linhas em relação a uma coluna j escolhida. Para o determinante de A escolheremos a coluna 3. Dessa forma, temos

$$\det A = \sum_{i=1}^4 (-1)^{i+3} \times a_{i3} \times \det(A - i - 3)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \det A &= 3(-1)^{1+3} \det \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 3 & 7 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} + 0(-1)^{2+3} \det \begin{bmatrix} 5 & 0 & 2 \\ 3 & 7 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ &+ 0(-1)^{3+3} \det \begin{bmatrix} 5 & 0 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} + 1(-1)^{4+3} \det \begin{bmatrix} 5 & 0 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \\ 3 & 7 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Resolvendo cada um dos determinantes acima pela regra de Sarrus, chegamos ao $\det A = 40$.

4.1.3.1 Determinantes de matrizes em Blocos

Para este determinante precisamos das definições de operações elementares com matrizes, as quais são definidas da seguinte maneira.

Definição 4.1.13. Operações Elementares.

(I) *Permutar duas linhas da matriz. A notação é: $l_i \longleftrightarrow l_j$.*

(II) *Multiplicar uma linha por um escalar $K \neq 0 \in \mathbb{R}$. A notação é: $l_i \longleftrightarrow Kl_i$.*

(III) *Somar com uma linha da matriz uma outra multiplicada por um escalar $K \neq 0 \in \mathbb{R}$. A notação é: $l_i \longleftrightarrow l_i + Kl_j$.*

Analogamente se pode definir essas operações sobre as colunas de uma matriz.

Definição 4.1.14. Matrizes equivalentes. Uma matriz $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ é dita equivalente a uma matriz $B = [b_{ij}]_{m \times n}$, se pudermos obter B a partir da matriz A por meio de uma sequência de operações elementares sobre suas linhas.

Observação 4.1.15. Embora as matrizes A e B sejam equivalentes, ao aplicar as operações elementares, os seus determinantes serão distintos. Por exemplo:

- i) Na primeira operação elementar, ao se permutar uma linha ou coluna da matriz A , o sinal do determinante da matriz A é alterado.
- ii) Na segunda operação elementar, ao se multiplicar uma linha da matriz A por um escalar $K \in \mathbb{R}$, o determinante da matriz resultante A' é igual $k|A|$, conseqüentemente, $|A| = \frac{1}{k}|A'|$.
- iii) A terceira operação elementar não altera o determinante.

Exemplo 4.1.16. Seja a matriz $A = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix}$, o $\det A = -29$. Vamos observar o que cada uma das operações elementares provoca no determinante.

Primeira operação elementar: Vamos permutar a linha 2 com a linha 3, $A_{l_2 \leftrightarrow l_3}$. Então

A será equivalente a matriz $B = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$. E o $\det B = 29$, conforme havíamos observado.

Segunda operação elementar: Vamos multiplicar a linha 1 pelo escalar $\frac{1}{3}$, $A_{l_1 \leftrightarrow \frac{1}{3}l_1}$.

Então A será equivalente a matriz $B = \begin{bmatrix} 1 & \frac{5}{3} & \frac{2}{3} \\ 1 & 2 & 4 \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix}$. E o $\det B = -\frac{29}{3}$, conforme havíamos observado.

Terceira operação elementar: Vamos somar a linha 2 a linha 1 multiplicada pelo

escalar $-\frac{1}{3}$, $A_{l_2 \leftrightarrow l_2 - \frac{1}{3}l_1}$. Então A será equivalente a matriz $B = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 2 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{10}{3} \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix}$. E o $\det B = -29$,

conforme havíamos observado.

Definição 4.1.17. Uma matriz quadrada A , de ordem $m+n$, é dita triangular superior (inferior) em blocos se existem as matrizes X de ordem m , Z de ordem n e Y de ordem $m \times n$ tais que

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

onde O é matriz nula de ordem $n \times m$.

Proposição 4.1.18. *O determinante de uma matriz A superior em blocos é igual ao produto dos determinantes das matrizes da diagonal principal.*

$$|A| = |X||Z|.$$

Demonstração. Vamos fazer uso das operações elementares para triangularizar a matriz A por meio das triangularizações das matrizes X e Z da seguinte maneira:

- (i) Vamos usar as operações elementares nas primeiras m linhas e m colunas de A para transformar X em uma matriz X' triangular superior. Tais operações vão transformar Y em uma matriz modificada \bar{Y} .
- (ii) Agora usaremos as operações elementares nas últimas n linhas e n colunas de A para transformar Z em uma matriz Z' triangular superior. Observe que essas operações não alteram X' , apenas poderá, eventualmente, transformar \bar{Y} em outra matriz $\bar{\bar{Y}}$.

Dessa forma, encontramos a matriz A' triangular superior equivalente a matriz A ,

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} x_{11} & * & * & & & \\ & \ddots & * & & & \\ 0 & & x_{mm} & & & \\ \hline & & & z_{11} & * & * \\ & 0 & & & \ddots & * \\ & & & 0 & & z_{nn} \end{array} \right].$$

E o determinante de A será dado por:

$$|A| = (x_{11} x_{22} \cdots x_{mm} z_{11} z_{22} \cdots z_{nn})$$

ou,

$$|A| = -(x_{11} x_{22} \cdots x_{mm} z_{11} z_{22} \cdots z_{nn})$$

de acordo com o número de trocas de linhas ou colunas efetuado nas operações.

Seja p o número de trocas de linhas ou colunas em X e q o número de trocas de colunas ou linhas em Z , dessa forma, $(p + q)$ foi o número de trocas para triangularizar A . Se $(p + q)$ é par, então

$$|A| = |X||Z| = (x_{11} x_{22} \cdots x_{mm} z_{11} z_{22} \cdots z_{nn})$$

caso contrário,

$$|A| = -(x_{11} x_{22} \cdots x_{mm} z_{11} z_{22} \cdots z_{nn}) = |X||Z|.$$

Para o caso onde $A = \begin{bmatrix} O & X \\ Y & Z \end{bmatrix}$ com X e Y matrizes de ordem m e n respectivamente, é preciso trocar O por X e Y por Z , levando as m colunas de X para a esquerda, movimentando mn colunas. Dessa forma, temos que:

$$\begin{vmatrix} O & X \\ Y & Z \end{vmatrix} = (-1)^{mn} \begin{vmatrix} X & O \\ Z & Y \end{vmatrix} = (-1)^{mn} |X||Y|.$$

Analogamente, considerando Y e Z matrizes de ordem m e n respectivamente, temos,

$$\begin{vmatrix} X & Y \\ Z & O \end{vmatrix} = (-1)^{mn} |Y||Z|.$$

■

Observação 4.1.19. Observe que usamos apenas a primeira e a terceira operação elementar, uma vez que nos interessa modificar minimamente o determinante final.

Exemplo 4.1.20. Considere a matriz A triangular em blocos

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ -1 & 5 & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 7 \\ 0 & 0 & 2 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & 9 & -3 & 4 \end{bmatrix}$$

Temos que o determinante de A será dado por:

$$|A| = \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ -1 & 5 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 2 & -1 & 5 \\ 9 & -3 & 4 \end{vmatrix}.$$

Ao resolver os cálculos, chegamos ao resultado que $|A| = 1859$.

4.1.4 Valores próprios e vetores próprios

Definição 4.1.21. Considere uma matriz A quadrada de ordem n . Um vetor v não nulo é denominado de vetor próprio de A se existir um escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ de tal forma que $Av^t = \lambda v$. Se diz que o escalar λ é o valor próprio associado a matriz A . O conjunto de valores próprios associados a matriz A é denominado de espectro da matriz A .

Considere A a matriz quadrada de ordem n ,

$$Av = \lambda v, \quad v \neq 0.$$

Onde v é matriz coluna de ordem $n \times 1$, sendo assim;

$$Av - \lambda v = 0.$$

Observe que $v = Iv$, onde I é a matriz identidade de ordem n , dessa forma;

$$Av - \lambda Iv = 0.$$

Consequentemente,

$$(A - \lambda I)v = 0.$$

Para que esse sistema possua soluções não nulas, já que $v \neq 0$, devemos ter $\det(A - \lambda I) = 0$. Do $\det(A - \lambda I)$ é obtido um polinômio em λ , o qual recebe o nome de *polinômio característico*, e suas raízes são os *valores próprios* associados a matriz A .

4.2 Representação de um grafo através de uma matriz

Uma das maneiras mais comuns de "construir" um grafo em um computador é através das matrizes. No caso dos grafos elas podem ser utilizadas para representa-los de diferentes maneiras. Ilustraremos algumas abaixo tendo como exemplo a Figura 3.

4.2.1 Matriz de Incidência

Definição 4.2.1. A Matriz de Incidência de uma grafo é a matriz $n \times m$ onde cada elemento x_{ij} pode ser representado por:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se a aresta } e_j \text{ é incidente ao vértice } v_i \\ 0 & \text{se a aresta } e_j \text{ não for incidente ao vértice } v_i. \end{cases}$$

No exemplo do grafo da Figura 3 a Matriz de Incidência é:

	(a,b)	(a,e)	(a,f)	(b,c)	(b,d)	(b,e)	(b,f)	(d,f)	(d,c)	(c,e)
a	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0
b	1	0	0	1	1	1	1	0	0	0
c	0	0	0	1	0	0	0	0	1	1
d	0	0	0	0	1	0	0	1	1	0
e	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1
f	0	0	1	0	0	0	1	1	0	0

4.2.2 Matriz de Adjacência

Definição 4.2.2. Os elementos de uma Matriz de Adjacências A_G de um grafo é definida como:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes} \\ 0 & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ não são adjacentes.} \end{cases}$$

No exemplo do grafo da Figura 3 a Matriz de Adjacência A_G é:

	a	b	c	d	e	f
a	0	1	0	0	1	1
b	1	0	1	1	1	1
c	0	1	0	1	1	0
d	0	1	1	0	0	1
e	1	1	1	0	0	0
f	1	1	0	1	0	0

Definição 4.2.3. A Matriz de Adjacência A_G de um multigrafo G , é a matriz cuja as entradas são determinadas por:

$$x_{ij} = \begin{cases} \text{o número de arestas entre } v_i \text{ e } v_j, \text{ se } v_i \neq v_j \\ \text{o número de laços em } v_i, \text{ se } v_i = v_j. \end{cases}$$

Considerando o Multigrafo da Figura 5 temos que a sua Matriz de Adjacência é:

	a	b	c	d
a	0	1	1	1
b	1	0	2	0
c	1	2	0	2
d	1	0	2	0

Definição 4.2.4. Dado um grafo G , o polinômio característico associado a este grafo pela sua Matriz de Adjacência, é definido como $P_{A_G}(\lambda) = \det(A_G - \lambda I)$. Onde I é a matriz identidade.

Proposição 4.2.5. Considere um grafo G simples, a soma das entradas de cada linha da sua Matriz de Adjacência corresponde ao grau do vértice correspondente.

Demonstração. Como cada entrada ij da Matriz de Adjacências A_G recebe o valor 1 para indicar que existe uma aresta conectando os vértices a_i e a_j e recebe o valor 0 caso contrário, temos que a soma das entradas da linha i é igual ao número de arestas que incidem sobre o vértice a_i , ou seja, é igual ao grau de a_i . ■

Proposição 4.2.6. Considere o grafo G como sendo a união de dois grafos disjuntos G_1 e G_2 , então o polinômio característico associado ao grafo G será dado pelo produto dos polinômios de seus respectivos subgrafos G_1 e G_2 .

$$P_G(\lambda) = P_{G_1}(\lambda) \times P_{G_2}(\lambda).$$

De modo análogo, se G_1, G_2, \dots, G_i , com $i \geq 1$, são as componentes conexas (seja qual for o subgrafo conexo maximal do grafo em questão) do grafo G , então

$$P_G(\lambda) = P_{G_1}(\lambda) \times P_{G_2}(\lambda) \times \dots \times P_{G_i}(\lambda).$$

Demonstração. Considere A_{G_i} como sendo a Matriz de Adjacência de um grafo G_i , com $i \in \{1, 2\}$. Dessa forma, a matriz de adjacência associada ao grafo $G = G_1 \cup G_2$ será

$$A_{G_{n_1+n_2}} = \begin{bmatrix} A_{G_{1n_1}} & 0_{n_1 \times n_2} \\ 0_{n_2 \times n_1} & A_{G_{2n_2}} \end{bmatrix},$$

sendo n_i o número de vértices de G_i . Observe que a matriz $A_{G_{n_1+n_2}}$ é uma matriz em blocos, portanto, de acordo com as definições de matriz em blocos 4.1.3.1, o $\det(A_{G_{n_1+n_2}})$ é igual ao produto das submatrizes associadas à sua diagonal principal, ou seja,

$$\det(A_{G_{n_1+n_2}}) = \det(A_{G_{1n_1}}) \times \det(A_{G_{2n_2}}).$$

Dessa forma o polinômio característico do grafo G será,

$$P_G(\lambda) = P_{G_1}(\lambda) \times P_{G_2}(\lambda).$$

■

4.2.3 Matriz Laplaciana

Definição 4.2.7. A Matriz Laplaciana L_G de um grafo G é definida como:

$$L_G = D - A_G = \begin{cases} d(v_i), & \text{se } i = j \\ -1, & \text{se } i \neq j \text{ e } v_i \text{ é adjacente a } v_j \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Onde D é a matriz diagonal com entradas $D_{ii} = d(v_i)$ e A_G é a matriz de adjacência de G .

No exemplo do grafo da Figura 3 a Matriz Laplaciana L_G é:

	a	b	c	d	e	f
a	3	-1	0	0	-1	-1
b	-1	5	-1	-1	-1	-1
c	0	-1	3	-1	-1	0
d	0	-1	-1	3	0	-1
e	-1	-1	-1	0	3	0
f	-1	-1	0	-1	0	3

Proposição 4.2.8. *Seja L_G a Matriz Laplaciana associada a um grafo G simples, a soma das entradas de cada linha de L_G é igual a zero.*

Demonstração. De acordo com a Definição 4.2.7 a Matriz Laplaciana é definida como sendo a matriz diagonal com entradas $D_{ii} = d(v_i)$ subtraída de A_G que é a a matriz de adjacência do grafo em estudo. Portanto, ao somar as entradas de cada linha de L_G nos deparamos com o seguinte,

$$d(v_i) - d(v_i) = 0$$

pois, conforme a Proposição 4.2.5, a soma das entradas das linhas da matriz de adjacência A_G é igual ao grau do vértice correspondente. ■

Proposição 4.2.9. *Considere G um grafo que possui n vértices e m arestas, sejam*

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$$

os seus valores próprios laplacianos, dessa forma

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 2m = \text{tr}(L).$$

Demonstração. Observe que cada aresta do grafo é computada duas vezes na soma dos graus, sendo uma para cada vértice que esta é incidente, portanto,

$$\sum_{i=1}^n d(v_i) = 2m = \sum_{i=1}^n \lambda_i.$$

■

Sendo $\sum_{i=1}^n d(v_i) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$, daqui deduzimos que a média dos valores próprios laplacianos é exatamente igual a média dos graus dos vértices do grafo em estudo. Se caso o grafo em estudo for uma árvore conexa, então $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 2(n - 1)$.

4.3 Espectro de um grafo

Ao representar um grafo por meio de uma matriz, podemos utilizar de alguns resultados de Álgebra Linear envolvendo matrizes, como valores próprios e vetores próprios juntamente com o polinômio característico. A teoria espectral dos grafos busca compreender e estudar as peculiaridades de um grafo por meio das suas representações matriciais e dos seus espectros, isto é, correlaciona propriedades algébricas do espectro das matrizes associadas de um grafo em estudo e as propriedades de estrutura desse grafo.

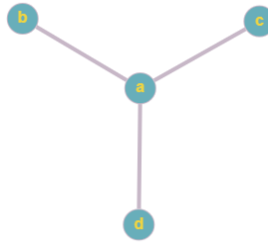
Definição 4.3.1. *Dado uma Matriz de Adjacência A_G de um grafo G a qual possui valores próprios distintos $\lambda_1 > \dots > \lambda_k$ com multiplicidades iguais a $w(\lambda_1), \dots, w(\lambda_k)$ respectivamente. O espectro do grafo G , representado por $\text{spect}(G)$, é a matriz $2 \times k$ onde a primeira linha*

é constituída pelos valores próprios da matriz A_G e a segunda linha é definida pelas suas respectivas multiplicidades algébricas. Tendo que o maior valor próprio de A_G é chamado de índice de G , sendo representado por $\text{ind}(G)$.

$$\text{spect}(A_G) = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & \lambda_k \\ w(\lambda_1) & \dots & w(\lambda_k) \end{bmatrix}.$$

Exemplo 4.3.2. Considerando o grafo G representado na figura abaixo, estabeleça sua Matriz de Adjacência, seu espectro e o seu índice.

Figura 26: Grafo G



Fonte: Autor.

Utilizando da Definição 4.2.2, temos que a Matriz de Adjacência do grafo G representado na Figura 26 é

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

Para encontrarmos o espectro de G é necessário determinar os valores próprios associados a matriz A_G . Para isso utilizamos da propriedade algébrica,

$$\det(A_G - \lambda I) = 0,$$

onde I é a matriz identidade de ordem 4.

Dessa forma,

$$(A_G - \lambda I) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\lambda \end{bmatrix}.$$

Concluimos então que

$$\det(A_G - \lambda I) = \det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\lambda \end{bmatrix}.$$

Resolvendo este determinante pelo método de Laplace chegamos ao polinômio característico

$$P_{A_G}(\lambda) = \lambda^4 - 3\lambda^2.$$

Sendo que este polinômio possui raízes $\lambda_1 = \sqrt{3}$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$, e $\lambda_4 = -\sqrt{3}$. Dessa forma, pela Definição 4.3.1 o $\text{spect}(G)$ é dado por,

$$\text{spect}(A_G) = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

E o $\text{ind}(A_G) = \sqrt{3}$.

Definição 4.3.3. *Seja G um grafo e L_G a sua Matriz Laplaciana, o espectro de L_G , denotado por $\text{spect}(L_G)$, é a matriz tal qual as entradas da primeira linha são todos valores próprios de L_G e a segunda linha é composta pelas respectivas multiplicidades algébricas. Dessa maneira, sendo $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$ valores próprios de L_G e $w(\lambda_1), w(\lambda_2), \dots, w(\lambda_k)$ suas respectivas multiplicidades algébricas, então $\text{spect}(L_G)$ será*

$$\text{spect}(L_G) = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_k \\ w(\lambda_1) & w(\lambda_2) & \dots & w(\lambda_k) \end{bmatrix}.$$

Exemplo 4.3.4. *Considere o exemplo do grafo representado na Figura 26. Temos o seguinte,*

$$P_{L_G} = \det(L_G - \lambda I).$$

Por outro lado,

$$(L_G - \lambda I) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3-\lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1-\lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1-\lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1-\lambda \end{bmatrix}.$$

Concluimos então que

$$\det(L_G - \lambda I) = \det \begin{bmatrix} 3 - \lambda & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 - \lambda & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 - \lambda & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 - \lambda \end{bmatrix}.$$

Resolvendo este determinante pelo método de Laplace chegamos ao polinômio característico

$$P_{L_G}(\lambda) = \lambda^4 - 6\lambda^3 + 10\lambda^2 - 6\lambda + 1.$$

Sendo que este polinômio possui raízes $\lambda_1 = 2 + \sqrt{3}$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 1$ e $\lambda_4 = 2 - \sqrt{3}$. Dessa forma, o $\text{spect}(L_G)$ é dado por,

$$\text{spect}(L_G) = \begin{bmatrix} 2 + \sqrt{3} & 1 & 2 - \sqrt{3} \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

E o $\text{ind}(L_G) = 2 + \sqrt{3}$.

4.3.1 Casos em que se relacionam Matriz de Adjacência e a teoria espectral de grafos

Proposição 4.3.5. *Considere um grafo G regular de grau k . Desse modo;*

- (i) k é um valor próprio do grafo G ,
- (ii) G será um grafo conexo se, somente se, k tiver multiplicidade 1,
- (iii) para qualquer valor próprio λ de G , temos que $|\lambda| \leq k$.

Demonstração. (i) Considere A_G a Matriz de Adjacência do grafo G regular de grau k .

Sabemos que a soma dos elementos de cada linha de A_G é igual a soma dos graus de G a ela associada. Como G é regular de grau k , temos que

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{ni} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \\ k \\ \vdots \\ k \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Por outro lado, temos que,

$$A_G \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{ni} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Considerando 3 e 4, concluímos que k é um valor próprio de A_G e $u = [1, 1, \dots, 1]^t$ é um vetor próprio de A_G .

(ii) Considere $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ um vetor próprio que está associado ao valor próprio k . Considere x_l uma entrada do vetor x tal que $|x_i| \leq |x_l|, \forall i \in \{1, \dots, n\}$.

Vamos definir $A_G(x_l)$, como sendo o produto da linha l de A_G , associado ao vértice v_l de G , com o vetor x , em outras palavras a posição l do vetor $A_G x$. Assim,

$$A_G(x_l) = \sum x_i,$$

tais que x_i são associados aos vértices v_i adjacentes ao vértice v_l . Mas, por 3, $\sum x_i = kx_l$.

Temos ainda que para cada r , tal que v_r é adjacente a v_l

$$|x_l| + (k-1)|x_l| = |\sum x_i| \leq \sum |x_i| \leq |x_r| + (k-1)|x_l|.$$

A desigualdade decorre do fato que

$$|x_i| \leq |x_l|, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

Ou seja,

$$|x_l| + (k-1)|x_l| \leq |x_r| + (k-1)|x_l|,$$

que equivale a $|x_l| \leq |x_r|$. Concluímos então que $x_r = x_l$ para qualquer vértice v_r adjacente a v_l

Suponha que G seja conexo, então todos os seus vértices estão conectados entre si por um caminho. Assim, podemos concluir que $x_i = x_l, \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$, ou seja, $x = ku$. Daí temos que a dimensão do espaço gerado pelos vetores próprios associados a k é igual a 1, consequentemente a multiplicidade de k é igual a 1.

(iii) Considere y um vetor não nulo de G que está associado a um valor próprio λ de G . Seja y_s uma entrada de y com o valor absoluto maximal. De acordo com (ii), temos que $\sum y_i = \lambda y_s$ e $|\lambda| |y_s| = |\sum y_i| \leq k |y_s|$, portanto, $|\lambda| \leq k$ para quaisquer valor próprio λ de G . ■

Exemplo 4.3.6. Considere o grafo G regular de grau 3 a seguir:

Figura 27: Grafo regular de grau 3.



Fonte: Autor.

Temos que a Matriz de Adjacência desse grafo é

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

E seu polinômio característico será dado por:

$$\det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -\lambda \end{bmatrix} = \lambda^4 - 6\lambda^2 - 8\lambda - 3.$$

Tendo como valores próprios:

$$\lambda_1 = 3$$

$$\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = -1$$

Como está disposto na Proposição 4.3.5.

Lema 4.3.7. *Seja G um grafo regular de grau k com n vértices. Se $v = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ é vetor próprio associado ao valor próprio $\lambda \neq k$, temos que v é ortogonal a $u = (1, 1, \dots, 1)$.*

Demonstração. Considere a matriz

$$A_G = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & 0 & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

em que o valor das entradas a_{ii} é igual 0 e

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes,} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Vamos considerar dois casos em que $\lambda \neq 0$ e $\lambda = 0$.

Para o caso em que $\lambda \neq 0$.

Observe que,

$$uv = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$$

Por outro lado

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} (0 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n) &= x_1 \\ \frac{1}{\lambda} (a_{21}x_1 + 0 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n) &= x_2 \\ \frac{1}{\lambda} (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + 0 + \cdots + a_{3n}x_n) &= x_3 \\ &\vdots \\ \frac{1}{\lambda} (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + 0) &= x_n. \end{aligned}$$

Dessa forma, podemos concluir que

$$uv = \frac{1}{\lambda} [(0 + a_{21} + a_{31} + \cdots + a_{n1})x_1 + \cdots + (a_{1n} + a_{2n} + a_{3n} + \cdots + 0)x_n].$$

Como a soma das entradas de cada coluna da matriz A_G é igual ao grau do vértice associado, ou seja, k . Segue que

$$uv = \frac{1}{\lambda} k (x_1 + x_2 + \cdots + x_n),$$

o que implica que

$$uv = \frac{k}{\lambda} uv \Rightarrow uv \left(1 - \frac{k}{\lambda} \right) = 0 \Rightarrow uv = 0.$$

Para o caso em que $\lambda = 0$.

Se λ igual a zero, teremos o seguinte

$$(0 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n) = 0$$

$$(a_{21}x_1 + 0 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n) = 0$$

$$\begin{aligned}
(a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + 0 + \cdots + a_{3n}x_n) &= 0 \\
&\vdots \\
(a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + 0) &= 0.
\end{aligned}$$

Dessa forma, podemos concluir que

$$kx_1 + kx_2 + kx_3 + \cdots + kx_n = 0,$$

o que implica que

$$k(x_1 + x_2 + x_3 + \cdots + x_n) = 0 \Rightarrow uv = 0$$

Portanto, u é ortogonal a v para todo vetor próprio associado ao valor próprio $\lambda \neq k$. ■

Definição 4.3.8. Considere a Matriz de Adjacência A_G de um grafo G , então a Matriz de Adjacência do seu grafo complementar \overline{G} pode ser encontrado através da expressão

$$A_{\overline{G}} = J - I - A_G,$$

Do qual J é a matriz de ordem n e suas entradas são todas iguais a 1 e I é a matriz identidade de ordem n .

Exemplo 4.3.9. Considere a matriz A_G de um grafo G simples,

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

A sua matriz $A_{\overline{G}}$ será,

$$\begin{aligned}
A_{\overline{G}} &= J - I - A_G = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Proposição 4.3.10. *Considere um grafo G regular de grau k com n vértices e valores próprios $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, desse modo, os valores próprios do seu complementar \overline{G} são*

$$n - k - 1, -1 - \lambda_n, -1 - \lambda_{n-1}, \dots, -1 - \lambda_2,$$

respectivamente, que estão associados aos seus respectivos vetores próprios de G .

Demonstração. Considere $\{u, w_2, w_3, \dots, w_n\}$ uma base ortogonal tal que w_i é ortogonal a u para todo $i \geq 2$. É sabido que em grafos regulares de grau k , temos que a soma das entradas de cada linha da sua Matriz de Adjacência A_G é o próprio k . Dessa maneira, como $A_G u = k u$, temos o seguinte,

$$\begin{aligned} A_{\overline{G}} u &= (J - I - A_G) u = J u - I u - A_G u \\ &= \begin{bmatrix} n \\ n \\ \vdots \\ n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} - k u = n u - u - k u = (n - 1 - k) u, \end{aligned}$$

nesse sentido, o u é um vetor próprio associado ao valor próprio $n - k - 1$ de \overline{G} .

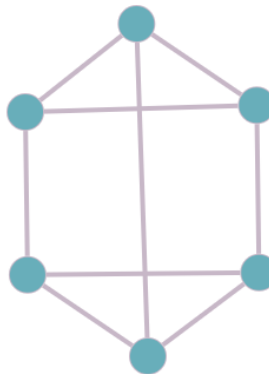
Como w_i é ortogonal a u , para todo $i \in \{2, \dots, n\}$, temos que $u w_i = 0$, conseqüentemente $J w_i$ é igual ao vetor nulo. Assim,

$$A_{\overline{G}} u = (J - I - A_G) w_i = J w_i - I w_i - A_G w_i = -w_i - \lambda_i w_i = (-1 - \lambda_i) w_i,$$

nesse sentido, concluímos que w_i é um vetor próprio associado ao valor próprio $-1 - \lambda_i$ de \overline{G} . ■

Exemplo 4.3.11. *Considere o grafo G regular de grau 3 a seguir.*

Figura 28: Grafo regular de grau 3.



Fonte: Autor.

A sua Matriz de Adjacência é,

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

A qual tem como polinômio característico,

$$P_{A_G}(\lambda) = \lambda^6 - 9\lambda^4 - 4\lambda^3 + 12\lambda^2.$$

E valores próprios,

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_4 & \lambda_5 & \lambda_6 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & -2 & -2 \end{bmatrix}.$$

Fazendo uso da Proposição 4.3.10, obtemos os seguintes valores próprios para o grafo complementar de G .

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \bar{\lambda}_1 & \bar{\lambda}_2 & \bar{\lambda}_3 & \bar{\lambda}_4 & \bar{\lambda}_5 & \bar{\lambda}_6 \\ n-k-1 & -1-\lambda_n & -1-\lambda_{n-1} & -1-\lambda_{n-2} & -1-\lambda_{n-3} & -1-\lambda_{n-4} \end{bmatrix} &= \\ &= \begin{bmatrix} \bar{\lambda}_1 & \bar{\lambda}_2 & \bar{\lambda}_3 & \bar{\lambda}_4 & \bar{\lambda}_5 & \bar{\lambda}_6 \\ 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & -2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Por outro lado, recorrendo a Definição 4.3.8, encontramos a matriz $A_{\bar{G}}$ do complementar de G .

$$\begin{aligned} A_{\bar{G}} = J - I - A_G &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Daí, encontramos o polinômio característico da matriz $A_{\overline{G}}$ do complementar de G .

$$P_{A_{\overline{G}}}(\lambda) = \lambda^6 - 6\lambda^4 + 9\lambda^2 - 4.$$

E os seus respectivos valores próprios são,

$$\begin{bmatrix} \overline{\lambda}_1 & \overline{\lambda}_2 & \overline{\lambda}_3 & \overline{\lambda}_4 & \overline{\lambda}_5 & \overline{\lambda}_6 \\ 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Conforme tínhamos feito utilizando a Proposição 4.3.10.

4.3.2 Casos em que se relacionam Matriz Laplaciana e a teoria espectral de grafos

Proposição 4.3.12. *Considere G um grafo regular de grau k que possui valores próprios associados a Matriz de Adjacência $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r$ e valores próprios associados a Matriz Laplaciana $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \dots \geq \theta_r$. temos o seguinte,*

$$\theta_i = k - \lambda_{r-i+1}$$

para $i \in \{1, 2, \dots, r\}$.

Demonstração. De acordo com a Definição 4.2.7 temos que a Matriz Laplaciana $L_G = D - A_G$, porém, observe que o grafo G é um grafo regular de grau k , dessa forma, podemos reescrever essa Matriz Laplaciana como $L_G = kI - A_G$, onde I é a matriz identidade. Considerando os valores próprios de L_G e A_G temos,

$$L_G v = (kI - A_G) v = kI v - A_G v = k v - \lambda v$$

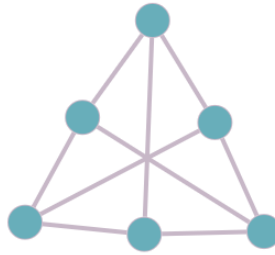
Portanto, se λ_i é valor próprio de A_G , então $k - \lambda_i$ é valor próprio de L_G . Consequentemente, tem-se a desigualdade,

$$\begin{aligned} L_G &= (k - \lambda_1), (k - \lambda_2), \dots, (k - \lambda_r) \\ &= (k - \lambda_r) \geq (k - \lambda_{r-1}) \geq \dots \geq (k - \lambda_{r-i+1}) \geq \dots \geq (k - \lambda_1). \end{aligned}$$

Concluimos então que todos os vetores próprios da matriz A_G com valores próprios λ_i são vetores próprios da matriz L_G com valores próprios $k - \lambda_{r-i+1}$. ■

Exemplo 4.3.13. *Considere o grafo G regular de grau 3:*

Figura 29: Grafo regular de grau 3.



Fonte: Autor.

Primeiramente vamos encontrar a matriz de A_G do grafo G acima, em seguida vamos calcular os seus valores próprios adjacentes e fazer uso da Proposição 4.3.2 para encontrar os valores próprios laplacianos de G . Então,

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

O seu polinômio característico é dado por,

$$P_{A_G}(\lambda) = \lambda^6 - 9\lambda^4.$$

E seus valores próprios relacionados são:

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_4 & \lambda_5 & \lambda_6 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}.$$

Dessa forma, fazendo uso da Proposição 4.3.2, os valores próprios laplacianos será,

$$\theta_1 = k - \lambda_6 = 3 + 3 = 6$$

$$\theta_2 = k - \lambda_5 = 3 - 0 = 3$$

$$\theta_3 = k - \lambda_4 = 3 - 0 = 3$$

$$\theta_4 = k - \lambda_3 = 3 - 0 = 3$$

$$\theta_5 = k - \lambda_2 = 3 - 0 = 3$$

$$\theta_6 = k - \lambda_1 = 3 - 3 = 0.$$

Veja que, por outro lado, a Matriz Laplaciana L_G do grafo G é,

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

Consequentemente, seu polinômio característico será,

$$P_{L_G}(\theta) = \theta^6 - 18\theta^5 + 126\theta^4 - 432\theta^3 + 729\theta^2 - 486\theta.$$

E os seus valores próprios são,

$$\begin{bmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 & \theta_6 \\ 6 & 3 & 3 & 3 & 3 & 0 \end{bmatrix}.$$

Conforme disposto anteriormente.

Definição 4.3.14. Considere a Matriz Laplaciana L_G de um grafo G , então a Matriz Laplaciana do grafo complementar de G é definida por

$$L_{\bar{G}} = nI - J - L_G,$$

onde n é a ordem da matriz L_G , I é a matriz identidade e J é a matriz de ordem n onde todas as entradas possui valor 1.

Proposição 4.3.15. Considere L_G a Matriz Laplaciana de um grafo G com n vértices. Temos que:

- (i) $\lambda_1 = 0$ é valor próprio de L_G e $u = (1, 1, \dots, 1)$ é vetor próprio associado a λ_1 .
- (ii) Para todo λ_i , tal que $v_i = (x_1^i, x_2^i, \dots, x_n^i)$ é vetor próprio associado a λ_i , tem-se que o produto escalar de v_i por u é igual a zero, ou seja $v_i u = 0$.

Demonstração. (i) Observe que $L_G u = \lambda u$, dessa forma;

$$L_G u = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = 0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

pois a soma de cada linha da matriz L_G é igual a zero.

Portanto, 0 é valor próprio de L_G e u é vetor próprio associado a $\lambda_1 = 0$.

(ii) Considere a matriz

$$L_G = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

em que o valor das entradas a_{ij} é igual ao grau do vértice v_i e

$$a_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{se } v_i \text{ e } v_j \text{ são adjacentes,} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Observe que,

$$L_G v_i = \lambda_i v_i \Leftrightarrow \frac{1}{\lambda_i} (L_G v_i) = v_i.$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_i} (a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n) &= x_1 \\ \frac{1}{\lambda_i} (a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n) &= x_2 \\ \frac{1}{\lambda_i} (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n) &= x_3 \\ &\vdots \\ \frac{1}{\lambda_i} (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n) &= x_n. \end{aligned}$$

Como a soma das entradas de cada coluna da matriz L_G é igual a zero e

$$(x_1 + x_2 + \cdots + x_n) = \frac{1}{\lambda_i} [(a_{11} + a_{21} + \cdots + a_{n1})x_1 + \cdots + (a_{1n} + a_{2n} + \cdots + a_{nn})x_n].$$

Por outro lado, temos que

$$(x_1 + x_2 + \cdots + x_n) = (x_1, x_2, \cdots, x_n)(1, 1, \cdots, 1).$$

Assim, podemos concluir que $v_i u = 0$. ■

Proposição 4.3.16. *Considere um grafo G com n vértices e w um vetor próprio da Matriz Laplaciana L_G com valores próprios λ_i diferentes de 0. Então w é vetor próprio da Matriz Laplaciana $L_{\bar{G}}$ do complementar de G com valores próprios $n - \lambda_{n-i}$.*

Demonstração. De acordo com a Definição 4.3.14, temos que $L_G + L_{\bar{G}} = nI - J$, onde I é a

matriz identidade e J é a matriz cuja todas suas entradas são iguais a 1, conforme o item (ii) da Proposição 4.3.15, $Jv = 0$. Assim, temos que:

$$\begin{aligned}
 nv &= nIv - 0 \\
 &= nIv - Jv \\
 &= (nI - J)v \\
 &= (L_G + L_{\bar{G}})v \\
 &= L_G v + L_{\bar{G}}v \\
 &= \lambda v + L_{\bar{G}}v
 \end{aligned}$$

Por transitividade, temos que

$$nv = \lambda v + L_{\bar{G}}v \Leftrightarrow nv - \lambda v = L_{\bar{G}}v$$

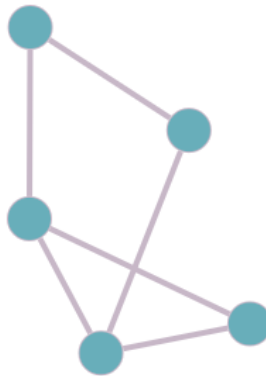
Finalmente,

$$(n - \lambda)v = L_{\bar{G}}v$$

■

Exemplo 4.3.17. Considere um grafo com 5 vértices, como o da figura abaixo,

Figura 30: Grafo G.



Fonte: Autor.

Sua Matriz Laplaciana será,

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

Primeiramente vamos encontrar o polinômio característico da matriz L_G e seus

respectivos valores próprios, em seguida vamos fazer uso da Definição 4.3.14 para encontrar a Matriz Laplaciana $L_{\overline{G}}$ e calcular seu polinômio característico e seus respectivos valores próprios. Então,

O polinômio característico de L_G é,

$$P_{L_G}(\lambda) = -\lambda^5 + 12\lambda^4 - 51\lambda^3 + 90\lambda^2 - 55\lambda.$$

Consequentemente, seus valores próprios são,

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_4 & \lambda_5 \\ 4.619 & 3.619 & 2.382 & 1.382 & 0 \end{bmatrix}.$$

Agora encontraremos a matriz $L_{\overline{G}}$ associada ao grafo G .

$$\begin{aligned} L_{\overline{G}} &= \begin{matrix} & & & & & nI - J - L_G \\ \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} & - & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} & - & \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \\ &= & & & & \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \end{matrix} \end{aligned}$$

O polinômio característico de $L_{\overline{G}}$ será,

$$P_{L_{\overline{G}}}(\theta) = -\theta^5 + 8\theta^4 - 21\theta^3 + 20\theta^2 - 5\theta.$$

Consequentemente, seus valores próprios serão,

$$\begin{bmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 \\ 3.618 & 2.618 & 1.381 & 0.381 & 0 \end{bmatrix}.$$

Por outro lado, fazendo uso da Proposição 4.3.16, temos que os valores próprios de $L_{\overline{G}}$ serão:

$$\begin{bmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 \\ n - \lambda_{n-1} & n - \lambda_{n-2} & n - \lambda_{n-3} & n - \lambda_{n-4} & 0 \end{bmatrix}.$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 \\ 5 - 1.382 & 5 - 2.382 & 5 - 3.619 & 5 - 4.619 & 0 \end{bmatrix} = \\ & = \begin{bmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 & \theta_5 \\ 3.618 & 2.618 & 1.381 & 0.381 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

4.3.3 Energia de um Grafo

Apresentaremos nesta subseção um estudo breve e introdutório sobre os conceitos de energia de um grafo. Para uma leitura mais profunda, a respeito deste tema, indicamos (PINHEIRO, 2018) e as referências ali contidas.

Os conceitos de energia de um grafo foram introduzidos em meados do ano de 1977 pelo químico e matemático sérvio Iván Gutman quando o mesmo incorporou o conceito de energia de um grafo molecular, definindo-o como a soma dos valores absolutos de seus valores próprios. Tais estudos feitos por Gutman se basearam em um tipo de energia relacionada às características químicas de uma molécula, a qual se pode representar sua estrutura por um grafo. Mais tarde, tais definições de energia de grafos foram ampliadas para grafos quaisquer pelo próprio Gutman. A partir daí, muitas propriedades a respeito deste conceito vem sendo estabelecidas.

4.3.3.1 Energia adjacente de um grafo

Definição 4.3.18. *Seja um grafo G com n vértices, a energia de G é definida como*

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

onde se tem $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ valores próprios da matriz de adjacência do grafo G .

Exemplo 4.3.19. *Considere a seguinte Matriz de Adjacência associada a um grafo G .*

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

O seu polinômio característico é,

$$P_{A_G}(\lambda) = \lambda^4 - 5\lambda^2 - 4\lambda.$$

Consequentemente, seus valores próprios são,

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_4 \\ 2,561 & 0 & -1 & -1,561 \end{bmatrix}.$$

Conforme a Definição 4.3.18 a energia desse grafo será,

$$E_A(G) = |2.561| + |0| + |-1| + |-1.561| = 5.122.$$

4.3.3.2 Energia laplaciana de um grafo

Definição 4.3.20. Considere G um grafo com n vértices, a energia laplaciana de G é definida como

$$E_L(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i - \bar{d}|,$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são valores próprios da matriz laplaciana do grafo G e \bar{d} é a média desses valores próprios.

Exemplo 4.3.21. Considere a seguinte Matriz Laplaciana associada a um grafo G .

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

O seu polinômio característico é,

$$P_{L_G}(\lambda) = \lambda^4 - 10\lambda^3 + 32\lambda^2 - 32\lambda.$$

Seus respectivos valores próprios são,

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \lambda_4 \\ 4 & 4 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Conforme a Definição 4.3.20 a energia laplaciana desse grafo será,

$$E_L(G) = |4 - 2.5| + |4 - 2.5| + |2 - 2.5| + |0 - 2.5| = 6.$$

4.3.4 Uma aplicação de energia na química

O carbono possui uma capacidade única de realizar ligações encadeadas, formando o que se conhece como cadeias carbônicas. Essas cadeias de carbonos que estão ligados entre si, compõe a estrutura básica das moléculas orgânicas. Essas moléculas, por sua vez, formam a base de muitas estruturas encontradas na natureza e que são essenciais à vida.

Vimos anteriormente que uma árvore é um grafo conexo e acíclico, Definição 2.2.25. Na química, um grafo em árvore possui os seus vértices com grau máximo menor ou igual a 4, no qual, referem-se a grafos moleculares que representam isômeros¹ de alcanos².

Nesse sentido, usa-se o símbolo Δ para representar o grau máximo de um vértice do grafo em estudo. Se $\Delta = 1$, então se trata de um grafo molecular que representa o mais simples hidrocarboneto saturado que possui o nome de etano. Se $\Delta = 2$, então se trata da representação de isômeros de cadeia linear de alcanos, isto é, que não possui ramificações. Quando $\Delta = 3$, então essa molécula possui ao menos um átomo de carbono terciário. Por fim, se $\Delta = 4$, significa que essa molécula possui ao menos um átomo de carbono quaternário.

Dessa forma, se pode concluir que Δ descreve bem uma estrutura molecular, sendo que este está intimamente relacionado ao maior valor próprio laplaciano de um alcano.

Conforme Gutman, Stevanovic e Vidovic, o grau máximo e o maior valor próprio laplaciano está relacionado por meio da seguinte desigualdade,

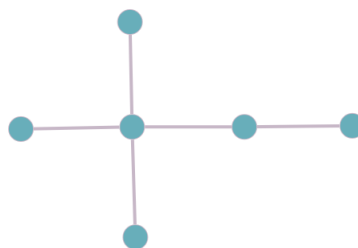
$$\Delta + 1 < \lambda_1 < \Delta + 1 + 2\sqrt{\Delta - 1}.$$

Portanto, ao determinar o valor de λ_1 é possível afirmar se há presença ou não de carbono quaternário.

Vamos a um exemplo:

Exemplo 4.3.22. Considere G o grafo molecular a seguir, vamos verificar se há presença de carbono quaternário nessa molécula.

Figura 31: Figura de um Grafo molecular.



Fonte: Autor.

A sua Matriz Laplaciana é:

¹Isômeros são substâncias químicas distintas que dispõem de propriedades químicas e físicas diferentes, porém, apresentam a mesma fórmula molecular.

²Os alcanos são hidrocarbonetos que possuem apenas conexões simples e cadeias abertas.

$$L_G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Dessa forma, o seu polinômio característico será:

$$\begin{aligned} P_{L_G} &= \det \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \right) \\ &= \det \begin{bmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1-\lambda & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 4-\lambda & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1-\lambda \end{bmatrix} \\ &= \lambda^6 - 10\lambda^5 + 33\lambda^4 - 46\lambda^3 + 28\lambda^2 - 6\lambda. \end{aligned}$$

Por fim, seus valores próprios são:

$$\lambda_1 \approx 5.0861, \quad \lambda_2 \approx 2.4280, \quad \lambda_3 \approx 0.4858, \quad \lambda_4 = \lambda_5 = 1, \quad \lambda_6 = 0.$$

Observe que $5 < \lambda_1 < 5 + \sqrt{3}$, portanto existe a presença de carbono quaternário no grafo molecular representado na Figura 31.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Mediante as informações apresentadas nessa pesquisa, fica evidente o quão intrigante é a Teoria de Grafos. Uma teoria que surgiu como um desafio aparentemente banal tido como uma diversão para os matemáticos e que se tornou uma área de estudo com inúmeras aplicações de extrema utilidade no dia a dia, desde a problemas simples até aplicações de extrema complexidade, o qual recebe o nome de Redes Complexas.

Neste trabalho é possível se familiarizar com a estrutura a qual possui os grafos, se tem o entendimento de como surgiu a teoria com o problema das sete pontes de Königsberg. É apresentado também como se modela problemas em estruturas de grafos, evidenciando a aplicabilidade do mesmo para a sociedade. É possível verificar também que os conceitos de Álgebra Linear são muito utilizados, uma vez que podemos representar um grafo por meio de matrizes bem específicas, envolvendo o conceito acerca de polinômio característico, valores próprios e vetores próprios e o espectro de matrizes, estes possuem aplicações no ramo da química por exemplo, no tratamento de elementos radioativos e em cadeias carbônicas.

Com a elaboração dessa monografia foi possível expandir os horizontes do conhecimento ao explorar um tópico que não é abordado no curso de Licenciatura em Matemática. Ao mesmo tem em que foi possível reforçar e aprofundar os conhecimentos adquiridos em Álgebra Linear. Trabalhar com o editor de texto LaTeX e o Graph Online, ferramenta para criar grafos online, foram outras aprendizagens um tanto quanto significativas.

Vale ressaltar que ainda existem inúmeras possibilidade e temas que podem ser estudados dentro da teoria de grafos, como por exemplo os grafos Hamiltonianos e as aplicações de grafos em árvores. O que foi exposto aqui nesta pesquisa é apenas uma pequena parte do que se desenvolveu e ainda pode ser desenvolvido, um vez que estes estudos estão em constante evolução.

Como se trata de um assunto com inúmeras aplicações no dia a dia, muitos pesquisadores tem voltado seus estudos para esta área, o que contribui para uma continuidade nas pesquisas, expandindo os estudos para o campo de Redes Complexas por exemplo, a qual procura entender e formular teorias de como pessoas ou coisas estão interconectadas, seguindo um certo grau de interconexão. Alguns exemplos de redes complexas são rede de rios, redes de neurônios, redes sanguíneas, redes de internet, redes de estradas, redes elétricas, etc. Essa área vem se desenvolvendo ao longo dos anos devido à necessidade de entender o comportamento dessas interconexões.

REFERÊNCIAS

- BOLDRINI, J. L.; COSTA, S. I. R.; FIGUEIREDO, V. L.; WETZLER, H. G. **Álgebra Linear**. 3ª ed. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1980. 411 p.
- CORREIA, S. P. **Otimização de rotas para a entrega de correspondências**. TCC (Licença em Matemática)- Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Cornélio Procopio, 2019. 60 p. Disponível em: <http://riut.utfpr.edu.br/jspui/handle/1/7401>. Acesso em: 08 agosto 2022.
- GUTMAN, I.; VIDOVIC, D.; STEVANOVIC, D. Chemical applications of the laplacian spectrum. vi on the largest laplacian eigenvalue of alkanes. **Journal of The Serbian Chemical Society - J SERB CHEM SOC**, v. 67, p. 407–413, 01 2002. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/244754558_Chemical_applications_of_the_Laplacian_spectrum_VI_On_the_largest_Laplacian_eigenvalue_of_alkanes/citation/download. Acesso em: 25 agosto 2022.
- JESUS, J. V. O. d. **Introdução à teoria espectral de grafos**. Dissertação (Mestre em Matemática)- Universidade de Madeira, 2018. 86 p. Disponível em: <https://digituma.uma.pt/handle/10400.13/2115>. Acesso em: 15 agosto 2022.
- JÚNIOR, J. A. d. S. et al. **Grafos e suas aplicações**. Dissertação (Mestre em Matemática em Rede Nacional)- Universidade Federal do Goiás, Jataí, 2016. 76 p. Disponível em: <https://repositorio.bc.ufg.br/tede/handle/tede/6798>. Acesso em: 10 julho 2022.
- JURKIEWICZ, S. **Grafos–uma introdução**. São Paulo: OBMEP, 2009. Disponível em: <http://147.65.23.4/docs/apostila5.pdf>. Acesso em: 10 abril 2022.
- PINHEIRO, L. K. **Energia laplaciana sem sinal de grafos**. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada)- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2018. 97 p. Disponível em: <https://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/174502>. Acesso em: 22 julho 2022.
- SANTOS, P. L. F. **Teoria Espectral de Grafos Aplicada ao Problema de Isomorfismo de Grafos**. Dissertação (Mestre em Informática)- Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2010. 56 p. Disponível em: <https://repositorio.ufes.br/bitstream/10/6388/1/Dissertacao%20de%20Philippe%20Leal%20Freire%20dos%20Santos.pdf>. Acesso em: 10 agosto 2022.
- SOARES, F. V. S. **Três teoremas interessantes em teoria dos grafos**. Dissertação (Mestre em Matemática) - Universidade Federal do Ceará, 2017. 57 p. Disponível em: <https://repositorio.ufc.br/handle/riufc/24437>. Acesso em: 22 maio 2022.
- TAMAROZZI, A. C. **Matrizes em Blocos**. RPM 40, Três Lagoas MS. Disponível em: <https://rpm.org.br/cdrpm/40/8.htm#:~:text=Determinantes%20de%20matrizes%20em%20blocos&text=Para%20isso%20triangularizaremos%20M%20atrav%C3%A9s,matriz%20B%20em%20uma%20modificada%20>. Acesso em: 07 outubro 2022.
- TEXEIRA, P. J. M. **CONTAGEM E CODIFICAÇÃO DE ÁRVORES**. Disponível em: <https://ime.ufg.br/bienal/2006/mini/p.jorge.contagem.pdf>. Acesso em: 02 setembro 2022.
- WINTERLE, P.; STEINBRUCH, A. **Álgebra Linear**. 2ª ed. São Paulo: Pearson, Makron Books, 1987. 583 p.