



BRUNO DIAS AMARO

A SOMA DOS MAIORES AUTOVALORES DA MATRIZ
LAPLACIANA SEM SINAL EM FAMÍLIAS DE GRAFOS

CAMPINAS
2014



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística
e Computação Científica

BRUNO DIAS AMARO

A SOMA DOS MAIORES AUTOVALORES DA MATRIZ LAPLACIANA SEM SINAL EM FAMÍLIAS DE GRAFOS

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Matemática Aplicada.

Orientador: Carlile Campos Lavor

Coorientador: Leonardo Silva de Lima

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO BRUNO DIAS
AMARO E ORIENTADA PELO PROF. DR. CARLILE
CAMPOS LAVOR.

Assinatura do Orientador

Assinatura do Coorientador

CAMPINAS
2014

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

Am13s Amaro, Bruno Dias, 1984 -
A soma dos maiores autovalores da matriz laplaciana sem sinal em famílias de grafos / Bruno Dias Amaro. - Campinas, SP : [s.n.], 2014.

Orientador: Carlile Campos Lavor.

Coorientador: Leonardo Silva de Lima.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Laplaciana sem sinal. 2. Autovalores. 3. Teoria espectral de grafos. I. Lavor, Carlile Campos, 1968-. II. Lima, Leonardo Silva de. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: The sum of the largest eigenvalues of singless Laplacian matrix on graphs families

Palavras-chave em inglês:

Singless Laplacian

Eigenvalues

Spectral graph theory

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Carlile Campos Lavor [Orientador]

Marcelo Firer

Sueli Irene Rodrigues Costa

Nair Maria Maia de Abreu

Eduardo Xavier Miqueles

Data da defesa: 05-12-2014

Programa de Pós Graduação: Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 05 de dezembro de 2014 e aprovada

pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof. Dr. CARLILE CAMPOS LAVOR



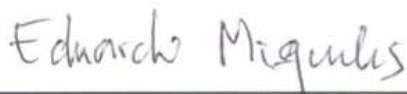
Prof. Dr. MARCELO FIRER



Profa. Dra. SUELI IRENE RODRIGUES COSTA



Profa. Dra. NAIR MARIA MAIA DE ABREU



Prof. Dr. EDUARDO XAVIER MIQUELES

Abstract

The Spectral Graph Theory is a branch of Discrete Mathematics that is concerned with relations between the algebraic properties of spectrum of some matrices associated to graphs, as the Adjacency, Laplacian and signless Laplacian matrices and their respective topologies. The eigenvalues and eigenvectors of matrices associated to graphs are the invariants which constitute the eigenspace of graphs.

On Spectral Graph Theory the conjecture proposed by Brouwer and Haemers, associating the sum of k largest eigenvalues of Laplacian matrix of a graph G with its edges numbers plus a combinatorial factor (which depends on the choosed k) is an open interesting question in the Literature. There are several works that attempt to prove this conjecture. In 2013, Ashraf et al. stretch the conjecture out to signless Laplacian matrix and proved that it is true for the sum of the 2 largest eigenvalues of signless Laplacian matrix and it is also true for all k if G is a regular graph.

Our work approaches on the version of the conjecture concerning to signless Laplacian matrix. We could obtain a family of graphs which satisfies the conjecture for the sum of the 3 largest eigenvalues of signless Laplacian matrix and we prove that the family of complete split graphs plus one edge satisfies the Conjecture for all eigenvalues. Moreover, based on Schur's inequality, we could show that the sum of the k smallest eigenvalues of Laplacian and signless Laplacian matrices are bounded by the sum of the k smallest degrees of G .

Resumo

A Teoria Espectral de Grafos é um ramo da Matemática Discreta que se preocupa com a relação entre as propriedades algébricas do espectro de certas matrizes associadas a grafos, como a matriz de Adjacência, Laplaciana ou Laplaciana sem sinal e a topologia dos mesmos. Os autovalores e autovetores das matrizes associadas a um grafo são os invariantes que formam o autoespaço de grafos.

Em Teoria Espectral de Grafos a conjectura proposta por Brouwer e Haemers, que associa a soma dos k maiores autovalores da matriz Laplaciana de um grafo G com seu número de arestas mais um fator combinatório (que depende do valor k adotado) é uma das questões interessantes e que está em aberto na literatura. Essa mostra diversos trabalhos que tentam provar tal conjectura. Em 2013, Ashraf et al. estenderam essa conjectura para a matriz Laplaciana sem sinal e provaram que ela é válida para a soma dos 2 maiores autovalores e que também é válida para todo k , caso o grafo seja regular.

Nosso trabalho aborda a versão dessa conjectura para a matriz Laplaciana sem sinal. Conseguimos obter uma família de grafos que satisfaz a conjectura para a soma dos 3 maiores autovalores da matriz Laplaciana sem sinal e a família de grafos *split* completo mais uma aresta satisfaz a conjectura para todos os autovalores. Ainda, baseado na desigualdade de Schur, conseguimos mostrar que a soma dos k menores autovalores das matrizes Laplaciana e Laplaciana sem sinal são limitadas superiormente pela soma dos k menores graus de G .

Sumário

Agradecimentos	xv
Lista de Figuras	xvii
1 Introdução	1
2 Grafos e Teoria Espectral de Grafos	5
2.1 Grafos: Definições, propriedades e modelos.	5
2.2 Teoria Espectral de Grafos.	13
2.2.1 Grafos Regulares.	25
2.2.2 Analogias com a matriz A	29
3 Estado da Arte	37
3.1 Resultados sobre a matriz laplaciana	37
3.2 Resultados sobre a matriz laplaciana sem sinal.	39
3.3 Desigualdade de Schur.	40
4 Novos Resultados em TEG	41
4.1 Limitantes superiores de $S_n - S_{n-k}$ e $T_n - T_{n-k}$	41
4.2 Família de grafos $G_{n,t}$	45

4.3 A família de grafos $H_{n,k}$	62
Considerações Finais e Perspectivas	79
Referências Bibliográficas	83
A Programas	86
A.1 Cálculos Realizados no Lema 2	87
A.2 Cálculos Realizados no Lema 3	91
A.3 Cálculos Realizados no Lema 5	92

*"Aos meus pais, Luiz e Sônia, que
me ensinaram com empenho a resolver
meus primeiros problemas"*

"Todo conhecimento inicia-se na imaginação, no sonho; só depois desce à realidade material e terrena por meio da lógica"

Albert Einstein

Agradecimentos

Agradeço inicialmente a Deus, por ter me capacitado a vencer mais esse desafio, por ter suprido cada uma das minhas necessidades e ter me auxiliado e ser sempre o meu refúgio em momentos de angústia. Sem Ele tudo o que foi feito ainda estaria por fazer.

Aos meus pais, pela formação moral que me proporcionaram, por terem abdicado na maioria das vezes de seus sonhos em favor dos meus, por todo amor e toda dedicação que sempre puseram e confiaram a mim, por todas orações, noites em claro e, principalmente, por terem me incentivado na busca de meus sonhos, por mais distantes que eles parecem estar. Se hoje sou o que sou e conquistei tudo o que tenho é porque eles sempre me instruíram de forma precisa e correta.

A minha noiva e futura esposa Heidi Batista. A você, um agradecimento todo especial, por estar sempre ao meu lado, se esforçando junto comigo para que essa conquista fosse real. Seu amor, lealdade, cumplicidade e paciência foram fundamentais em tudo.

Aos meus professores do IMECC, em especial ao meu orientador Prof. Dr. Carlile Campos Lavor e ao meu coorientador Prof. Dr. Leonardo Silva de Lima, do Centro Federal de Educação Tecnológica, no Maracanã - Rio de Janeiro - RJ, que depositaram sua confiança em mim, fazendo com que esse trabalho se tornasse uma realidade em minha vida. Com certeza os nossos encontros e discussões sobre o trabalho fizeram com que eu aprendesse muito e, além de se mostrarem grandes mestres, tornaram-se grandes amigos.

À Profa. Dra. Carla Silva Oliveira da Escola Nacional de Ciências Estatísticas do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística - ENCE/IBGE, que também foi uma pessoa fundamental para a realização desse trabalho. Aos encontros que fizemos para discutir melhorias nesse trabalho, muitas vezes até em finais de semana e feriados. Saiba que essa conquista também é sua.

Aos meus professores da UNESP por terem me proporcionado uma formação básica sólida, tornando possível essa empreitada, em especial ao Prof. Dr. Luis Antônio e a Profa. Roseli Arbach, meus orientadores e grandes amigos durante os 4 anos de minha graduação.

Aos grandes e inesquecíveis amigos que fiz no Laboratório de Matemática Discreta e Códigos (LabMDC) do IMECC-Unicamp durante esses anos de doutorado. Muito obrigado pela força e ajuda em diversos trabalhos, estudos e até mesmo das boas risadas de coisas aleatórias ditas nesse tempo. Não há como expresar minha gratidão e a saudade que sentirei de todos vocês. Elen, Marcos, Germano, Christiane, Cecília, Kênia, Jerry, Juliana, Roberto, Ana, Campello, Grasi, vocês foram, são e sempre serão muito importantes pra mim. Ao Jorge Alencar pela contribuição, ajuda e ideia nas demonstrações dos resultados de alguns limitantes. Ao professor da Faculdade de Ciências Aplicadas - FCA/ Unicamp Dr. João Eloir Strapasson pela ajuda e dicas primordiais não apenas ao trabalho mas também com o software Mathematica®.

Aos funcionários da Secretaria de Pós-graduação: Tânia, Edinaldo, Livia e Eliana, que sempre se mostraram tão solícitos e prestativos em todas as vezes que precisei, e que não foram poucas.

Aos meus amigos de um modo geral de Andradina, Ilha Solteira, Campinas, Jundiaí e tantos outros lugares, meu muito obrigado, em especial aos amigos Rodrigo e Celeste Dissele e Devanir e Lúcia Cruz, duas das primeiras famílias que me acolheram de forma toda especial quando cheguei em Campinas. Certamente nesse período sempre nos falamos e toda a minha conquista vai também para vocês.

Por fim, mas de forma alguma menos importante, agradeço a CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Lista de Figuras

2.1	Exemplos de grafos não direcionado e direcionado.	6
2.2	Multigrafo com <i>loop</i>	6
2.3	Exemplos de grafos completos.	7
2.4	Exemplo de um grafo e seu grafo linha $\mathcal{L}(G)$ (à direita)	7
2.5	Exemplo de um grafo nulo G_1 e de um grafo G_2 com 4 vértices independentes.	8
2.6	Exemplo de um passeio dado pela sequência de vértices v_1, v_2, v_3, v_6, v_7 e do ciclo C_3 dado pela sequência de vértices v_3, v_4, v_6	9
2.7	Grafo conexo formado pelo conjunto de partições $A = A_1 \cup A_2 \cup A_1$	9
2.8	Exemplos de grafos k -partidos.	10
2.9	Exemplos de grafos ponderados.	10
2.10	Exemplos de grafos com alguns respectivos subgrafos.	11
2.11	Exemplos de grafos com cliques de tamanho 4 (à esquerda) e tamanho 7 (à direita).	11
2.12	Exemplos de grafos G_1 e G_2 com $G_1 \simeq G_2$	12
2.13	Exemplos de um grafo G e seu grafo complementar $\overline{G}$	12
2.14	Exemplos de grafos G_1 e G_2 (à esquerda) e seu grafo <i>join</i> $G = G_1 \vee G_2$ (à direita)	13
2.15	Exemplo de um grafo <i>split</i> G (à esquerda) e o grafo <i>split</i> completo CS_6^3 (à direita)	14

2.16	Grafo Simples com 6 vértices e 8 arestas e sua matriz de incidência, de ordem 6×8	15
2.17	Exemplos de dois grafos que são A -coespectrais com relação aos respectivos grafos linhas e estes não são Q -coespectrais.	25
2.18	Exemplos de dois grafos que são Q -coespectrais	25
2.19	Grafo G usado como base do Exemplo 1	31
4.1	Exemplos de grafos da família $G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t)$, $2 \leq t \leq n-4$. .	46
4.2	Gráfico do polinômio $p(x, n, t)$ em x , para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n-4$. . .	52
4.3	Grafo $G_{n,2} = \overline{(K_{n-4} \vee \overline{K}_2)} \cup 2K_1 = ((n-4)K_1 \cup K_2) \vee K_2$, $n \geq 4$	60
4.4	Exemplos de grafos da família $H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}$	63
4.5	Gráfico do polinômio $p(x, n, t)$ em x , para todo $n \geq 13$ e $3 \leq k \leq n-2$. . .	67

Capítulo 1

Introdução

A Teoria dos Grafos é um ramo da matemática discreta que estuda as relações entre os objetos de um determinado conjunto. Para tal, são empregadas estruturas chamadas de grafos e comumente denotadas por $G(V, E)$, onde V é um conjunto não vazio de objetos, denominados vértices, e E é um conjunto de pares não ordenados dos elementos de V , chamado arestas. Estruturas que podem ser representadas por grafos estão em toda parte e muitos problemas de interesse prático podem ser formulados como questões sobre certos grafos. Um exemplo clássico do uso de grafos é o “*problema do caixeiro viajante*”, que visa determinar a menor rota para percorrer uma série de cidades (visitando cada uma pelo menos uma vez) e retornando à cidade de origem. Nesse contexto, cada cidade pode ser representada como um vértice de um grafo e as estradas como as arestas do mesmo. Assim, de um modo geral, a razão do grande interesse na Teoria de Grafos é porque redes complexas, em vários ramos da ciência e da engenharia, tais como engenharia elétrica, rede de computadores e moléculas bioquímicas podem ser modelados por grafos e suas propriedades podem ser obtidas por algoritmos computacionais.

A representação geométrica é extremamente útil na visualização de um grafo. Entretanto, extrair propriedades topológicas e/ou estruturais de um grafo apenas por visualização torna-se um trabalho não exequível. Porém, um grafo pode ser convertido em uma forma algébrica via matrizes. Quando um grafo é representado na forma matricial algumas operações e propriedades podem ser realizadas. Assim, a partir da Teoria de Grafos, uma área que vem cada vez mais se consolidando é a Teoria Espectral de Grafos (TEG).

Introdução

A Teoria Espectral de Grafos se preocupa com a relação entre as propriedades algébricas do espectro de certas matrizes associadas a grafos, como as matrizes de adjacência A , laplaciana L ou laplaciana sem sinal Q bem como a topologia dos mesmos. Os autovalores e autovetores das matrizes associadas a um grafo são os invariantes que formam o autoespaço de grafos. Nesse sentido podemos dizer que há várias vertentes de estudo na Teoria Espectral de Grafos, uma para cada tipo de matriz associada a um grafo. Muitas das demonstrações matemáticas que relacionam a estrutura de um grafo com seu espectro podem ser encontradas, por exemplo, nos livros de Norman Biggs [2], Dragoš Cvetković [10] e Chris Godsil [17]. Vários trabalhos com aplicações diretas de TEG (coeficientes de polinômios de Chebyshev, Identidade de Newton, energia de um grafo, etc) podem ser vistos, por exemplo, em [11], [15], [18], [19], [23], [24], [25] e [26].

Dentre as matrizes citada acima, a matriz laplaciana sem sinal vem ganhando nos últimos anos um forte destaque no estudo da TEG. As referências [1], [8], [9], [12], [20], [21], [28], [30], [33] e [35] trazem, por exemplo, alguns resultados em TEG relacionados à matriz Q . A fim de dar uma motivação para a escolha da matriz laplaciana sem sinal, apresentamos algumas definições e resultados computacionais relevantes.

Grafos com o mesmo espectro associado a uma matriz M são chamados de grafos coespectrais em relação a M , ou grafos M -coespectrais. Um grafo G_2 coespectral ao grafo G_1 , mas não isomorfo a G_1 é chamado de *companheiro coespectral* de G_1 . Seja então $\mathcal{G}$ um conjunto finito de grafos e $\mathcal{G}'$ um subconjunto de $\mathcal{G}$ que tem um companheiro coespectral em $\mathcal{G}$ em relação a uma matriz M . A razão $\frac{|\mathcal{G}'|}{|\mathcal{G}|}$ é chamada de *incerteza espectral* de $\mathcal{G}$ em relação a M . A tabela abaixo, que pode ser vista em [21] e [30], descreve as incertezas espectrais r_n em relação à matriz A , s_n em relação à matriz L e t_n em relação à matriz Q , para todos os grafos com n vértices, $2 \leq n \leq 11$:

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
r_n	0	0	0	0.059	0.064	0.105	0.139	0.186	0.213	0.211
s_n	0	0	0	0	0.026	0.125	0.143	0.155	0.118	0.090
t_n	0	0	0.182	0.118	0.103	0.098	0.097	0.069	0.053	0.038

Podemos ver que os números de t_n são menores que os números de r_n para $n \geq 7$. Ainda, a sequência t_n é decrescente para $n \leq 11$, enquanto que a sequência r_n é crescente para $n \leq 10$. Essa é uma forte evidência de que estudar grafos a partir do espectro da

matriz Q é mais eficiente que o espectro da matriz de adjacência. Uma vez que o espectro da matriz laplaciana sem sinal traz melhores propriedades (são todos valores reais e não negativos, por exemplo), em comparação com os espectros de outras matrizes associadas a grafos comumente utilizadas (como adjacência e laplaciana), uma ideia expressa em [30] foi que, entre as matrizes associadas a grafos, a matriz laplaciana sem sinal parece ser mais conveniente para o uso no estudo de propriedades de grafos. Por esta razão, focamos nosso estudo na matriz laplaciana sem sinal Q .

Em Teoria Espectral de Grafos, a conjectura proposta por Brouwer e Haemers [3] que associa a soma dos k maiores autovalores da matriz laplaciana de um grafo G com seu número de arestas mais um fator combinatório que depende do valor k adotado é uma das questões interessantes e que está em aberto na literatura. Recentemente, Ashraf et al. [1] estenderam essa conjectura para a laplaciana sem sinal e provaram que ela é válida para a soma dos 2 maiores autovalores da matriz laplaciana sem sinal e que a conjectura é válida para todo k caso o grafo seja regular.

Nosso trabalho baseia-se numa versão dessa conjectura para a matriz laplaciana sem sinal. Conseguimos obter uma família de grafos que satisfaz a conjectura para a soma dos 3 maiores autovalores da matriz laplaciana sem sinal e a família de grafos *split* completo mais uma aresta que satisfaz a conjectura para todos os autovalores. Ainda, baseado na desigualdade de Schur [22], conseguimos limitar superiormente a soma dos menores autovalores das matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal pela soma de seus menores graus.

No Capítulo 2, introduzimos conceitos da Teoria de Grafos bem como a Teoria Espectral de Grafos, trazendo definições, teoremas e resultados que serão úteis ao longo do trabalho. O Capítulo 3 apresenta os resultados já conhecidos sobre o tema proposto nesta tese. No Capítulo 4, abordamos os novos resultados que obtivemos em TEG, com as devidas demonstrações dos resultados e devidas conclusões/perspectivas futuras. No Apêndice, colocamos os códigos dos programas¹ que auxiliaram as diversas operações matemáticas que apareceram em muitas demonstrações.

¹Programas feitos no software Wolfram Mathematica®.

Capítulo 2

Grafos e Teoria Espectral de Grafos

Neste Capítulo apresentamos os conceitos básicos da Teoria de Grafos e da Teoria Espectral de Grafos e suas principais características, através de definições, exemplos e alguns resultados que serão utilizados ao longo do trabalho. As principais referências utilizadas foram [2], [3], [5], [9], [10], [12], [14] e [17]. Ainda, os teoremas já presentes na literatura e que apresentam suas demonstrações foram feitos com a intenção de melhor esclarecer seus resultados, em uma forma mais detalhada e não tão imediata.

2.1 Grafos: Definições, propriedades e modelos.

Um **grafo** $G = G(V, E)$ consiste de um conjunto de vértices V , com $|V| = n$, e de um conjunto de arestas E com $|E| = e(G)$ que relacionam vértices e arestas. Dois vértices v_i e v_j de um grafo G são chamados de **adjacentes** se há uma aresta e_{ij} conectando-os. Os vértices v_i e v_j são chamados de **incidentes** à aresta e_{ij} . Duas arestas distintas de G são adjacentes se elas têm um vértice em comum. O **grau** de um vértice, denotado por d_i , é igual ao número de vértices adjacentes ao vértice v_i . O **vetor de graus**, denotado por $d(G)$, é formado por cada um dos d_i de tal forma que $d_i \geq d_{i+1}$, $i = 1, 2, \dots, n$. O grafo G da Figura 2.1(a) é composto por 7 vértices e 7 arestas, onde o conjunto de vértices é dado por $V(G) = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7\}$, o conjunto de arestas por $E(G) = \{e_{12}, e_{23}, e_{34}, e_{36}, e_{45}, e_{46}, e_{67}\}$ e o vetor de graus $d(G) = (3, 3, 3, 2, 1, 1, 1)$.

Um grafo pode ser **não direcionado** ou **direcionado (digrafo)**, como mostram os grafos das Figuras 2.1(a) e 2.1(b), respectivamente. Em um grafo não direcionado, a direção das arestas é irrelevante. Em outras palavras, $e_{ij} = e_{ji}$. Grafos químicos, por exemplo, que representam ligações entre dois átomos, são representados por grafos não direcionados. Por outro lado, uma aresta (ou arestas) em um digrafo é direcionada, de tal forma que e_{ij} não é necessariamente igual a e_{ji} . Nesta tese lidamos apenas com grafos não direcionados.

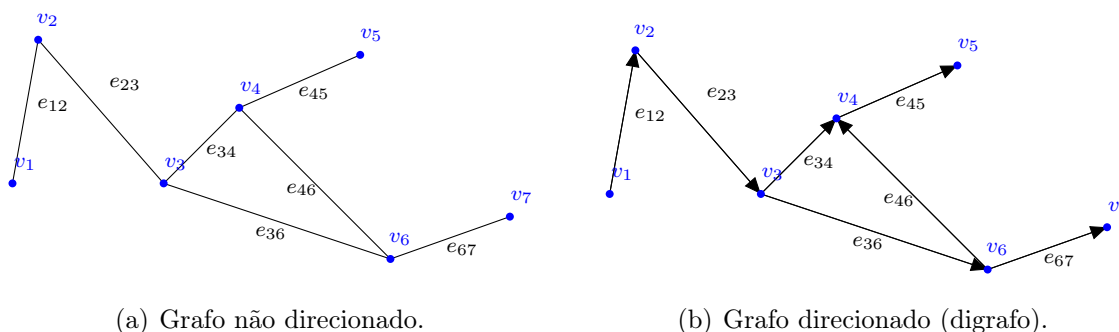


Figura 2.1. Exemplos de grafos não direcionado e direcionado.

Um **multigrafo** é um grafo em que alguns de seus vértices podem ser conectados por mais de uma aresta (como exibido na Figura 2.2). Os vértices v_1 e v_2 no grafo da Figura 2.2 estão conectados por duas arestas. Já no vértice v_5 há um *loop* que junta o vértice nele mesmo. Grafos sem múltiplas arestas e *loops* são chamados de **grafos simples**. Neste estudo focaremos apenas nos grafos simples.

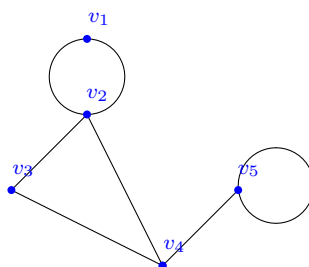


Figura 2.2. Multigrafo com *loop*.

Um **grafo completo**, denotado por K_n , é um grafo simples em que todo vértice é adjacente a todos os outros vértices. Uma propriedade dessa classe de grafos é que eles têm o número de arestas dado por $\binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$. A Figura 2.3 mostra alguns exemplos de grafos completos.

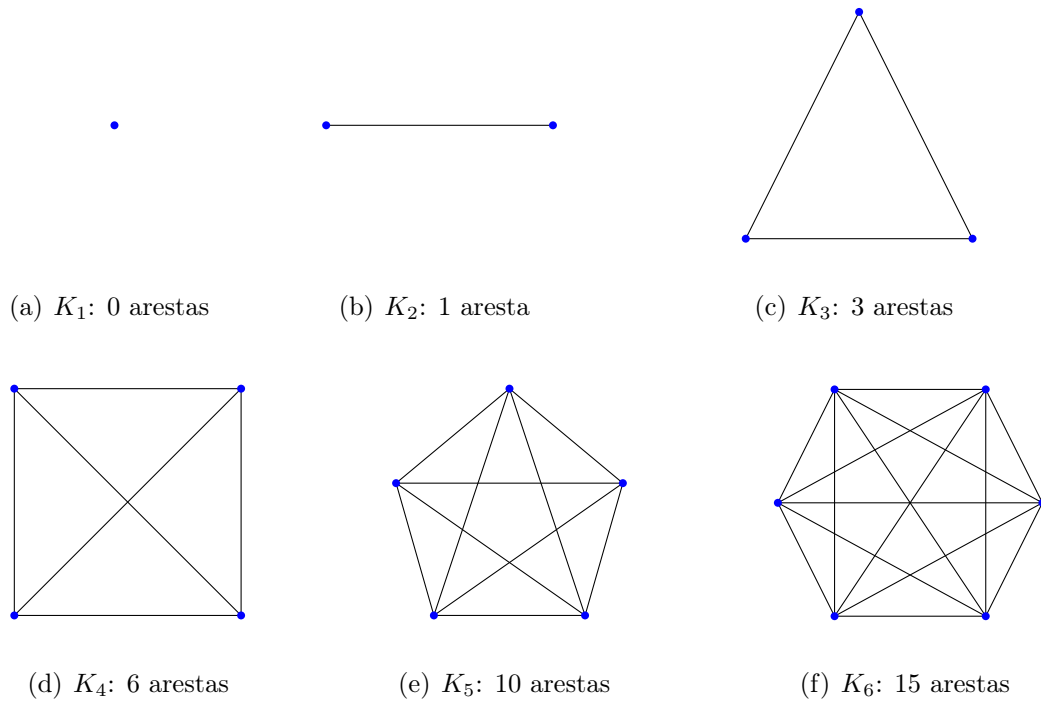


Figura 2.3. Exemplos de grafos completos.

Um **grafo linha** $\mathcal{L}(G)$ de um grafo G é um grafo cujos vértices correspondem às arestas de G e um par de vértices está conectado por uma aresta em $\mathcal{L}(G)$ se, e somente se, esses vértices são adjacentes em G . A Figura 2.4 mostra um exemplo de um grafo com seu respectivo grafo linha.

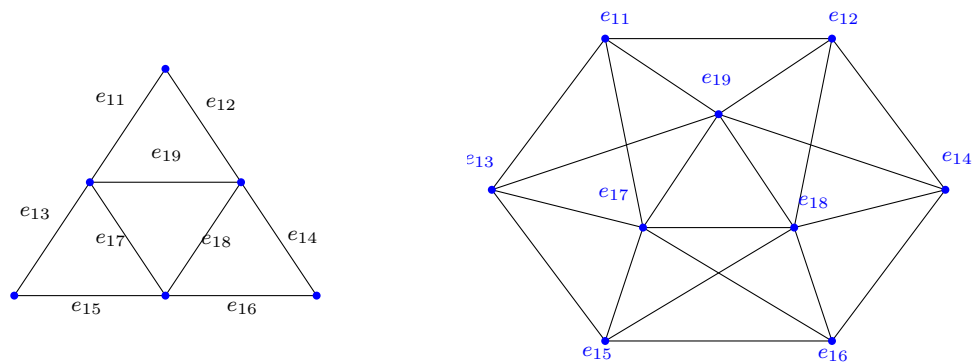


Figura 2.4. Exemplo de um grafo e seu grafo linha $\mathcal{L}(G)$ (à direita)

Um **grafo vazio** com n vértices é um grafo composto por n vértices isolados, sem arestas. Esses grafos são também chamados de **grafos nulos** (embora o termo grafo nulo também é usado para se referir, em especial, para o grafo vazio com nenhum vértice e,

portanto, nenhuma aresta).

Um **conjunto independente de vértices** de um grafo G é um subconjunto S de vértices de G tal que não existem dois vértices adjacentes contidos em S . Em outras palavras, se v_1 e v_2 são vértices quaisquer de um conjunto independente, então não há aresta conectando v_1 e v_2 . A Figura 2.5 mostra um exemplo de um grafo nulo G_1 e de um grafo G_2 que possui um subconjunto S_2 com 4 vértices independentes, a saber, $S_2 = \{v_5, v_8, v_9, v_{10}\}$.

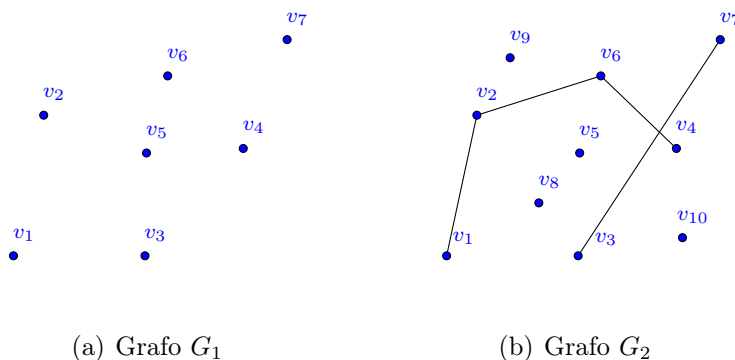


Figura 2.5. Exemplo de um grafo nulo G_1 e de um grafo G_2 com 4 vértices independentes.

Um **passeio** em um grafo é uma sequência de vértices em que cada dois vértices consecutivos são ligados por uma aresta. Assim, um passeio com k vértices possui $k - 1$ arestas. Um **caminho** (de comprimento k) em um grafo não direcionado é formado por uma sequência alternada $v_1, e_{12}, v_2, e_{23}, \dots, v_k, e_{k,k+1}, v_{k+1}$ de vértices $v_1, v_2, \dots, v_k, v_{k+1}$ e arestas $e_{12}, e_{23}, \dots, e_{k,k+1}$ tal que, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, v_i é distinto de v_{i+1} e um **ciclo** é um passeio onde os vértices inicial e final coincidem. Um passeio e um ciclo de tamanho n são comumente denotados por P_n e C_n , respectivamente. A Figura 2.6 mostra um exemplo de um grafo que contém um ciclo C_3 (formado pelos vértices v_3, v_4, v_6) e com diversos caminhos (por exemplo, o caminho P_5 que passa pelos vértices v_1, v_2, v_3, v_6, v_7).

Um subconjunto $A \subset V$ de um grafo é **conexo** se quaisquer dois vértices em A podem ser conectados (ligados) por um caminho tal que todos os pontos intermediários também estão em A . Um subconjunto A é chamado de **componente conexa** se ele é conexo e se não há conexões entre os vértices de A e A^c , onde A^c representa o conjunto complementar de A , isto é, $V \setminus A = A^c$. onde $V \setminus A = \{v \mid v \in V \text{ e } v \notin A\}$ Os subconjuntos não vazios $A_1, A_2, \dots, A_k$ formam uma **partição** do grafo se $A_i \cap A_j = \emptyset$ e $A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_k = A$. A Figura 2.7 mostra um grafo conexo com partições A_1, A_2 e A_3 , onde $A_1 = \{v_1, v_2, v_3\}$,

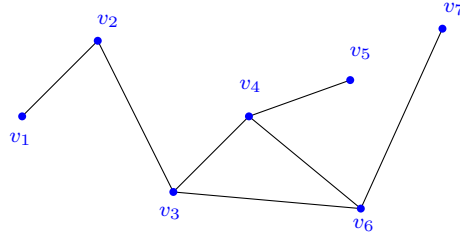


Figura 2.6. Exemplo de um passeio dado pela sequência de vértices v_1, v_2, v_3, v_6, v_7 e do ciclo C_3 dado pela sequência de vértices v_3, v_4, v_6

$$A_2 = \{v_4, v_5, v_6, v_7\} \text{ e } A_3 = \{v_8, v_9, v_{10}, v_{11}, v_{12}\}.$$

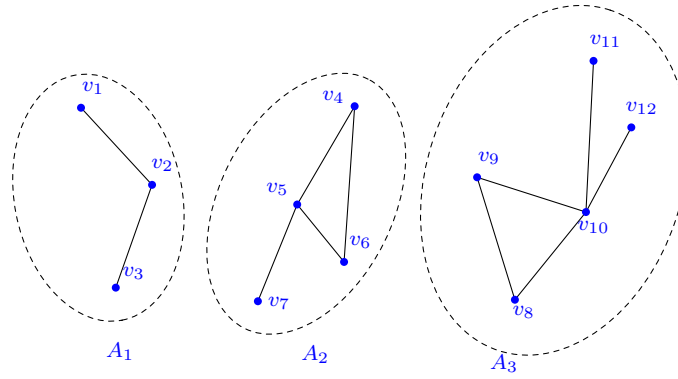


Figura 2.7. Grafo conexo formado pelo conjunto de partições $A = A_1 \cup A_2 \cup A_3$

Um grafo $G(V, E)$ é dito **k -partido** se existir uma partição $P = \{V_i \mid V_i \cap V_j = \emptyset, i \neq j, i = 1, 2, \dots, k, k \leq n\}$ tal que não existam ligações entre elementos de um mesmo V_i , ou seja, todas as ligações de G são da forma (p, q) tais que $p \in V_i$ e $q \in V_j, i \neq j$. Em particular, quando $k = 2$ o grafo é chamado de **grafo bipartido**. Assim, um grafo bipartido é um grafo que não contém qualquer ciclo de comprimento ímpar. Consequentemente, um **grafo bipartido completo** é um tipo especial de grafo bipartido onde cada vértice do conjunto V_1 está associado a cada vértice do conjunto V_2 . Denotamos por $K_{m,n}$ um grafo bipartido completo com partições de tamanhos m e n . O grafo bipartido completo $K_{n-1,1}$ é chamado de **estrela** e é denotado por S_n . A Figura 2.8 mostra exemplos de grafos bipartidos. Em 2.8(a) tem-se um grafo bipartido qualquer, em 2.8(b) o bipartido completo $K_{5,3}$ e, em 2.8(c), o grafo estrela S_6 , que é o grafo bipartido completo $K_{1,5}$.

Um **grafo ponderado** é um grafo em que os vértices e/ou as arestas são discriminadas uma das outras atribuindo diferentes valores, a qual chamamos de **pesos**, para cada um deles. Os vértices $v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7$ no grafo da Figura 2.9(a) têm pesos 0.5, 0.5, 0.9,

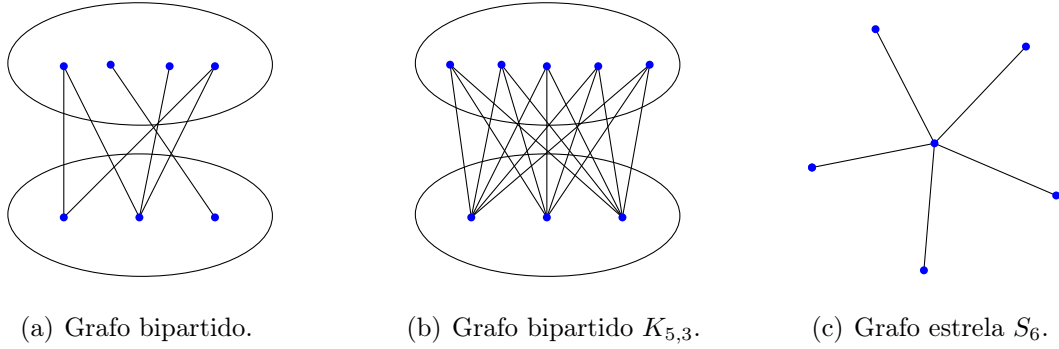


Figura 2.8. Exemplos de grafos k -partidos.

0.7, 1.1, 1.3 e 1.5, respectivamente. Na Figura 2.9(b) as arestas têm pesos diferenciados.

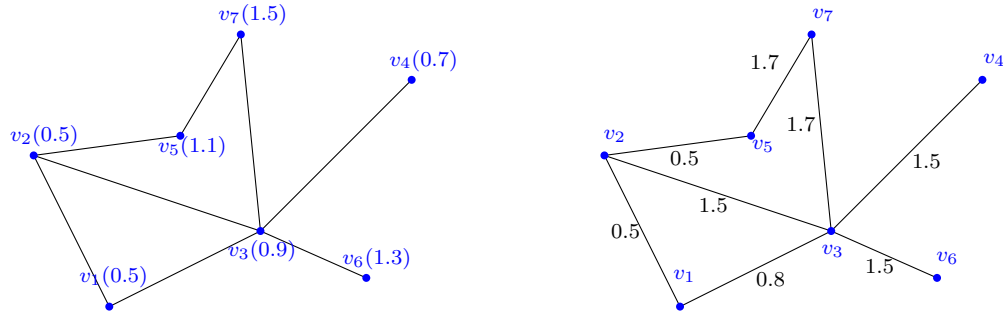
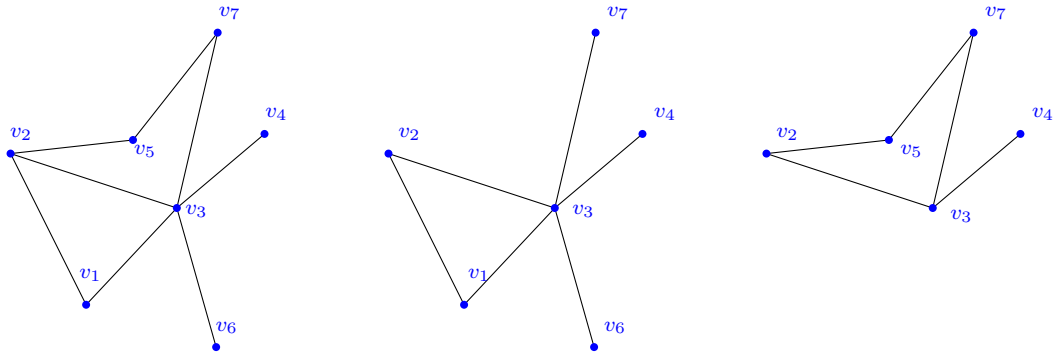


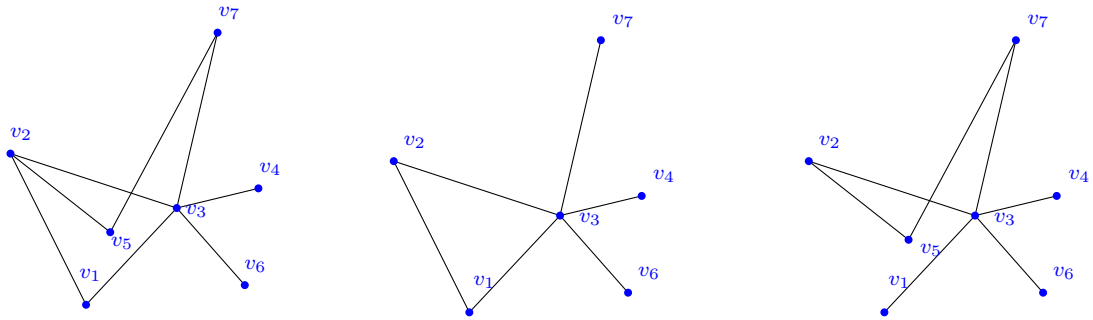
Figura 2.9. Exemplos de grafos ponderados.

Um **subgrafo** $G' = (V', E')$ de um grafo $G = (V, E)$ é um grafo tal que $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$. A Figura 2.10(a) mostra um exemplo de um grafo e dois possíveis subgrafos do mesmo. O subgrafo $(G - v)$ foi obtido do grafo G excluindo o vértice v e suas arestas incidentes. O vértice v_5 no grafo 2.10(b) foi excluído e o grafo 2.10(c) foi obtido. O subgrafo $(G \setminus S)$ é o subgrafo obtido a partir da remoção das arestas de S do grafo G . O grafo 2.10(d) foi obtido do grafo 2.10(b) excluindo a aresta e_{12} .

Uma **clique** em um grafo G com n vértices é um subconjunto de G com t vértices ($t \leq n$) tais que cada dois vértices do subconjunto são conectados por uma aresta. Em outras palavras, uma clique é um subgrafo completo com t vértices do grafo G . Nesse caso dizemos que o grafo G possui uma clique de tamanho t . A Figura 2.11 apresenta dois grafos, um com uma clique de tamanho 4 o outro com uma clique de tamanho 7.



(a) Exemplo de um grafo (à esquerda) e dois subgrafos (ao centro e à direita)



(b) Grafo G

(c) Grafo $(G - v_5)$

(d) Grafo $(G - e_{12})$

Figura 2.10. Exemplos de grafos com alguns respectivos subgrafos.

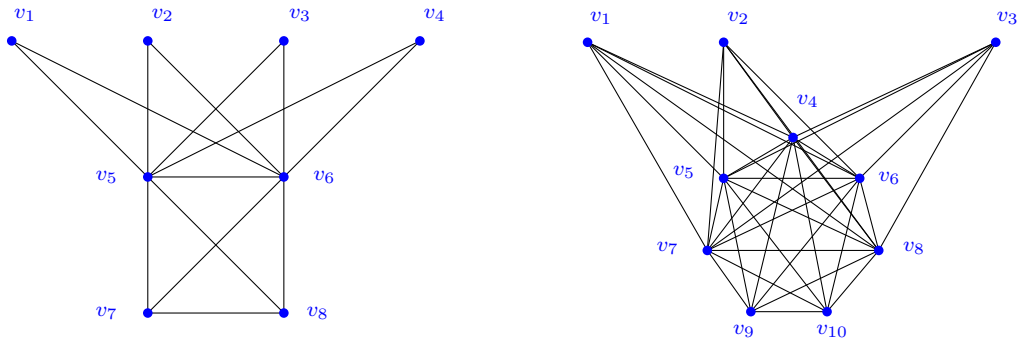


Figura 2.11. Exemplos de grafos com cliques de tamanho 4 (à esquerda) e tamanho 7 (à direita).

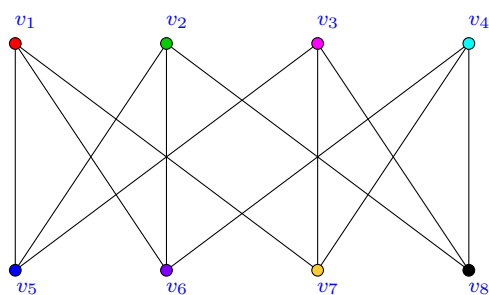
Um **isomorfismo** dos grafos G_1 e G_2 é uma bijeção entre os conjuntos de vértices de

G_1 e G_2

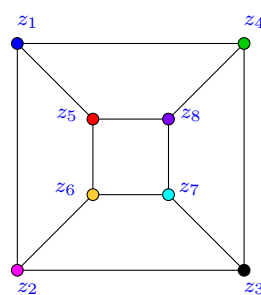
$$f : V(G_1) \longrightarrow V(G_2)$$

de tal forma que quaisquer dois vértices v_i e v_j de G_1 são adjacentes em G_1 se, e somente se $f(v_i)$ e $f(v_j)$ são adjacentes em G_2 . Notação: $G_1 \simeq G_2$. Isso quer dizer que dois grafos são isomorfos se ele preserva o número de vértices, arestas e graus dos vértices. A Figura 2.12 mostra um exemplo de dois grafos que são isomorfos. Um isomorfismo entre G_1 e G_2 é dado por

$$\begin{array}{llll} f(v_1) = z_5 & f(v_2) = z_4 & f(v_3) = z_2 & f(v_4) = z_7 \\ f(v_5) = z_1 & f(v_6) = z_8 & f(v_7) = z_6 & f(v_8) = z_3. \end{array}$$



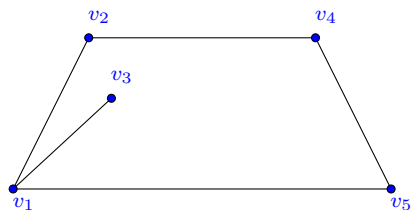
(a) Grafo G_1



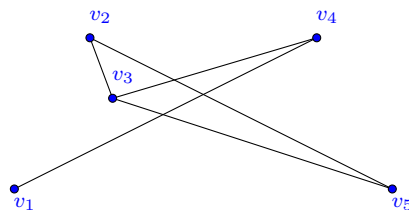
(b) Grafo G_2

Figura 2.12. Exemplos de grafos G_1 e G_2 com $G_1 \simeq G_2$.

O **grafo complementar** de um grafo G , denotado por $\overline{G}$, é o grafo que tem o mesmo conjunto de vértices de G e dois vértices formam uma aresta em $\overline{G}$ se e somente se não formam uma aresta de G . A Figura 2.13 mostra um grafo G e seu grafo complementar $\overline{G}$.



(a) Grafo G



(b) Grafo $\overline{G}$

Figura 2.13. Exemplos de um grafo G e seu grafo complementar $\overline{G}$.

A seguir, as operações de junção e união de grafos são definidas.

Definição 2.1.1. *Sejam $G_1(V_1, E_1)$ e $G_2(V_2, E_2)$ grafos disjuntos com V_1, V_2 e E_1, E_2 seus respectivos conjuntos de vértices e arestas. A união $G_1 \cup G_2$ é o grafo $(V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. A junção (join) $G = G_1 \vee G_2$ é obtida de $G_1 \cup G_2$ onde cada vértice de G_1 é ligado por uma nova aresta a cada vértice de G_2 .*

A Figura 2.14 mostra dois grafos G_1 e G_2 e seu grafo *join* $G = G_1 \vee G_2$. As arestas em laranja são as novas arestas obtidas ao ligar cada vértice de G_1 a cada vértice de G_2 .

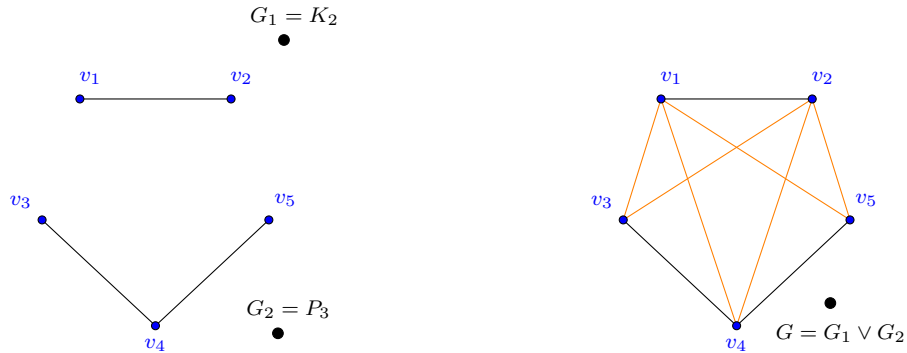


Figura 2.14. Exemplos de grafos G_1 e G_2 (à esquerda) e seu grafo *join* $G = G_1 \vee G_2$ (à direita)

Um **grafo *split*** é um grafo cujos vértices podem ser particionados em uma clique e um conjunto independentes de vértices. Quando todos os vértices do conjunto independente de um grafo *split* estão conectados aos vértices da clique dizemos que ele é um **grafo *split* completo**, e denotamos por CS_n^k , onde k é o tamanho da clique e $n - k$ é o tamanho do conjunto independente de vértices. Além disso, um grafo *split* completo pode ser escrito como o *join* $CS_n^k = K_k \vee \overline{K_{n-k}}$. A Figura 2.15 mostra um modelo de grafo *split* e um modelo de grafo *split* completo.

2.2 Teoria Espectral de Grafos.

A Teoria Espectral de Grafos é uma linha de pesquisa que atua na fronteira entre a Álgebra Linear e a Teoria de Grafos. Um dos principais instrumentos dessa teoria baseia-se no uso de autovalores e autovetores de matrizes associadas a grafos, que trazem informações à respeito da topologia dos mesmos.

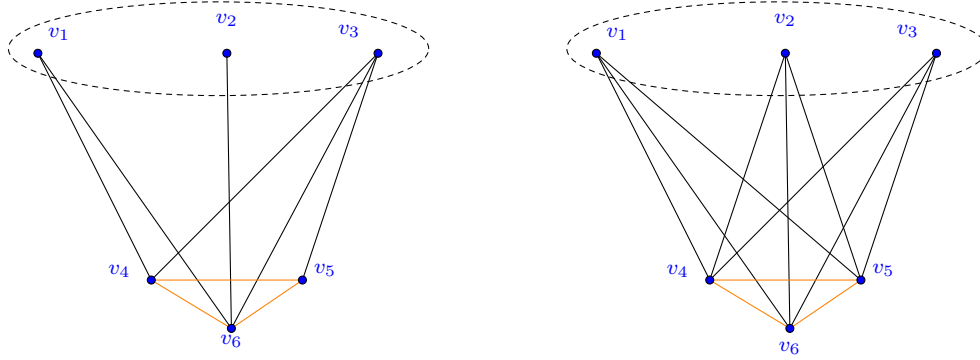


Figura 2.15. Exemplo de um grafo *split* G (à esquerda) e o grafo *split* completo CS_6^3 (à direita)

A representação geométrica é extremamente útil na visualização de um grafo. Entretanto, um grafo pode ser representado em uma forma algébrica via matriz. Quando um grafo é representado na forma matricial algumas operações e propriedades podem ser realizadas. Soluções analíticas podem ser obtidas e algoritmos numéricos podem ser aplicados. A razão de um grande interesse na teoria espectral de grafos é porque redes complexas em vários ramos da ciência e engenharia, tais como engenharia elétrica, rede de computadores, moléculas bioquímicas de grande porte podem ser obtidas por algoritmos computacionais. O tipo de representação matricial depende das propriedades a qual procuramos. A matriz mais comum é a **matriz de adjacência**, que contém informações básicas sobre as conexões de vértices de um grafo.

A matriz de adjacência $A = A(G)$ de um grafo não direcionado G com n vértices é a matriz simétrica $n \times n$ cujos elementos a_{ij} são definidos da forma:

$$a_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & \text{se } i \neq j \text{ e } e_{ij} \in E; \\ 0, & \text{se } i = j \text{ ou } e_{ij} \notin E, \end{cases}$$

onde $w_{ij} = 1$ para um grafo não ponderado ou w_{ij} assume o valor do peso da aresta e_{ij} em um grafo ponderado.

As matrizes de adjacências dos grafos G e G' , o primeiro não-ponderado e o segundo ponderado, exibidos nas Figuras 2.6 e 2.9(b), respectivamente, são

$$A(G) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A(G') = \begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0 & 1.5 & 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0.8 & 1.5 & 0 & 1.5 & 0 & 1.5 & 1.7 \\ 0 & 0 & 1.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.7 \\ 0 & 0 & 1.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.7 & 0 & 1.7 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

onde os coeficientes de $A(G')$ são dados pelos pesos das arestas do grafo correspondente.

A **Matriz de Incidência** $R = R(G)$ de um grafo simples não direcionado G com n vértices e m arestas é a matriz $n \times m$ cujos elementos r_{ij} são definidos da forma:

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a aresta } e_j \text{ é incidente ao vértice } v_i; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A Figura 2.16 abaixo exibe um grafo simples não direcionado e a sua respectiva matriz de incidência.

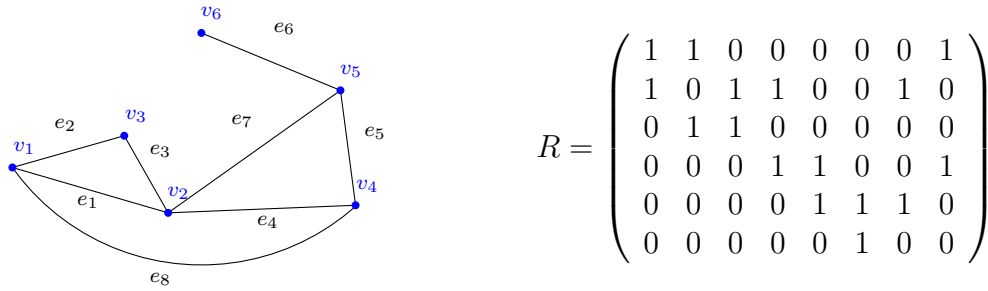


Figura 2.16. Grafo Simples com 6 vértices e 8 arestas e sua matriz de incidência, de ordem 6×8 .

Duas outras matrizes bastante utilizadas em Teoria Espectral de Grafos são as matrizes **laplaciana** e **laplaciana sem sinal** de um grafo G , dadas respectivamente por:

$$L = L(G) = D(G) - A(G)$$

e

$$Q = Q(G) = D(G) + A(G),$$

onde $D(G)$ é uma matriz diagonal $n \times n$ tal que $d_{ii} = d(v_i)$ e $A(G)$ é a matriz de adjacência do grafo G . A matriz dos graus do grafo exibido na Figura 2.6, por exemplo, é dada por

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde as matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal do referido grafo são dadas, respectivamente, por:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Técnicas espectrais são utilizadas, com muita frequência, em redes de computadores para a identificação de *clusters* (agrupamentos) e similaridades, etc. Ainda, padrões de conectividade podem ser deduzidos da análise espectral de grafos conexos. A obtenção de informações sobre a topologia da rede implícita nos autovalores e autovetores de matrizes associadas a grafos é o principal objetivo da Teoria Espectral de Grafos. Wilf ([34]), por exemplo, relacionou o maior autovalor da matriz de adjacência, $\lambda_1(G)$, com o número cromático da rede, $\chi(G)$, da seguinte forma: $\chi(G) \leq 1 + \lambda_1(G)$.

Abaixo apresentamos algumas definições e teoremas da Álgebra Linear que serão úteis para o estudo do espectro de A , L e Q utilizados nas seções subsequentes.

Sejam $\mathbb{V}$ um espaço vetorial sobre um corpo $\mathbb{F}$ e $T : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ um operador linear. Se existirem $v \in \mathbb{V}$, não nulos, e $\lambda \in \mathbb{F}$ tais que $T(v) = \lambda v$, então o escalar $\lambda \in \mathbb{F}$ é um **autovalor** de T e o elemento v é um **autovetor** de T associado ao autovalor λ .

Ainda, definimos o **polinômio característico** do operador T como sendo o polinômio dado por $\det(\lambda I - M)$, onde M é a matriz do operador T com relação a alguma base ordenada de V .

Seja G um grafo simples com n vértices e seja M uma matriz real e simétrica associada a G . O polinômio característico $\det(\lambda I - M)$ é chamado de **M -polinômio** de G e será aqui denotado por $M_G(\lambda)$. Os autovalores de M (ou seja, as raízes de $\det(M - \lambda I)$) e o espectro de M (o conjunto formado pelos autovalores de M) são chamados de **M -autovalores** e **M -espectro** de G , respectivamente. O maior autovalor de M é chamado de **M -índice** de G .

Em particular, se M é igual a uma das matrizes A , L e Q , então os autovalores correspondentes são chamados de **A -autovalores**, **L -autovalores** e **Q -autovalores**. Neste trabalho os autovalores de A , L e Q serão denotados, respectivamente, por $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ e $q_1, q_2, \dots, q_n$ de tal forma que:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &\geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n, \\ \mu_1 &\geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n, \\ q_1 &\geq q_2 \geq \dots \geq q_n.\end{aligned}$$

Esses são as raízes dos polinômios característicos $P_G(x) = \det(xI - A)$, $L_G(x) = \det(xI - L)$ e $Q_G(x) = \det(xI - Q)$. Os maiores autovalores de cada uma dessas três matrizes, isto é, λ_1 , μ_1 e q_1 , são os **A -índice**, **L -índice** e **Q -índice** de G , respectivamente.

Teorema 2.2.1. *Seja M uma matriz real simétrica. Se u e v são autovetores de M com diferentes autovalores, então u e v são ortogonais.*

Teorema 2.2.2. *Os autovalores de uma matriz real simétrica M são reais.*

Teorema 2.2.3. *Seja M uma matriz real simétrica de ordem $n \times n$. Então $\mathbb{R}^n$ possui uma base ortonormal de autovetores de $\mathbb{R}^n$.*

Teorema 2.2.4. *Se M é uma matriz real simétrica, então existem matrizes P e D tais que $PP^t = P^tP = I$ e $PMP^t = D$, onde D é uma matriz diagonal composta pelos autovalores de M e P uma matriz ortonormal composta pelos autovetores de M .*

Teorema 2.2.5. *O polinômio característico $M_G(x) = p_0x^n + p_1x^{n-1} + \dots + p_{n-1}x^1 + p_n$ de uma matriz quadrada M é mônico, ou seja, o coeficiente p_0 de $M_G(x)$ é igual a 1.*

Teorema 2.2.6 ([10], [14] pg.5). *Seja M uma matriz quadrada de ordem n . Suponhamos que M seja da forma:*

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1k} \\ M_{21} & M_{22} & \cdots & M_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{k1} & M_{k2} & \cdots & M_{kk} \end{pmatrix},$$

onde M_{ij} , $1 \leq i, j \leq k$, é uma matriz de ordem $n_i \times m_j$ tal que suas linhas têm soma constante igual a c_{ij} . Seja então a matriz

$$RM = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1k} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{k1} & c_{k2} & \cdots & c_{kk} \end{pmatrix},$$

onde RM é chamada de matriz reduzida associada a matriz M . Então, o polinômio característico de RM divide o polinômio característico de M .

Teorema 2.2.7 ([10], [31]). *Sejam G um grafo com n vértices, L a matriz laplaciana de G e $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t \in \mathbb{R}^n$. Então:*

- (i) $x^t Lx = \sum_{i \leq j} a_{ij} (x_i - x_j)^2 \leq \sum_{i < j} (x_i - x_j)^2$;
- (ii) L é simétrica e semi definida positiva, isto é, $x^t Lx \geq 0$ e $\mu_i \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$;
- (iii) O menor autovalor de L é 0 com autovetor associado $\mathbb{1} = (1, 1, \dots, 1)^t$.

Demonstração.

- (i) Como $\sum_{j=1}^n a_{ij} = d_i$ temos:

$$\begin{aligned} x^t Lx &= x^t D x - x^t A x &= \sum_{i=1}^n d_i x_i^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j a_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} \right) x_i^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j a_{ij} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_{ij} x_i^2 - a_{ij} x_i x_j) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i < j} (a_{ij}x_i^2 - a_{ij}x_ix_j + a_{ji}x_j^2 - a_{ji}x_jx_i) = \sum_{i < j} a_{ij} (x_i^2 - 2x_ix_j + x_j^2) \\
&= \sum_{i < j} a_{ij} (x_i - x_j)^2 \leq \sum_{i < j} (x_i - x_j)^2.
\end{aligned}$$

(ii) L é simétrica por definição. Por (i) temos $x^t L x \geq 0$. Assim, se x for um autovetor de L associado ao autovalor μ , temos $x^t L x = x^t \mu x = \mu x^t x = \mu \|x\|^2 \Leftrightarrow \mu \geq 0$.

$$(iii) \quad L\mathbb{1} = D\mathbb{1} - A\mathbb{1} = (d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn})^t - \left(\sum_{i=1}^n a_{1j}, \sum_{i=1}^n a_{2j}, \dots, \sum_{i=1}^n a_{nj} \right)^t = 0.$$

□

Baseado no Teorema 2.2.7, podemos obter um resultado semelhante para a matriz Q , bem como para a multiplicidade do autovalor nulo de L .

Teorema 2.2.8 ([10]). *Sejam G um grafo com n vértices, Q a matriz laplaciana sem sinal de G e $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t \in \mathbb{R}^n$. Então:*

$$(i) \quad x^t Q x = \sum_{i \leq j} (x_i + x_j)^2;$$

(ii) Q é simétrica e semi definida positiva, isto é, $x^t Q x \geq 0$ e $q_i \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Teorema 2.2.9 ([10]). *Seja G um grafo não direcionado. Então a multiplicidade k do autovalor 0 de L é igual ao número de componentes conexas $A_1, A_2, \dots, A_k$. O autoespaço do autovalor 0 é gerado pelos autovetores $\mathbb{1}_{A_1}, \mathbb{1}_{A_2}, \dots, \mathbb{1}_{A_k}$ dessas componentes.*

Os próximos teoremas nos dão condições de obter uma relação entre os polinômios característicos da matriz Q e de $A(\mathcal{L}(G))$, sendo $\mathcal{L}(G)$ o grafo linha de G .

Teorema 2.2.10 ([17], pg.166). *Sejam $R(G)$ a matriz de incidência e $\mathcal{L}(G)$ o grafo linha de um grafo G . Então:*

$$(i) \quad R(G)^t R(G) = 2I + A(\mathcal{L}(G));$$

$$(ii) \quad R(G) R(G)^t = D(G) + A(G) = Q(G),$$

onde $A(\mathcal{L}(G))$ representa a matriz de adjacência do grafo linha $\mathcal{L}(G)$ e I é a matriz identidade.

Teorema 2.2.11 ([9]). *Seja G um grafo com n vértices e $e(G) = m$ arestas e $\mathcal{L}(G)$ seu grafo linha. Então:*

$$P_{\mathcal{L}(G)}(x) = (x+2)^{m-n} Q_G(x+2). \quad (2.1)$$

Demonstração. Sejam R a matriz de incidência $n \times m$ do grafo G e $Q_G(x)$ o polinômio característico de Q . Tomemos agora as matrizes U e V , ambas de ordem $(n+m) \times (n+m)$, em blocos,

$$U = \begin{pmatrix} xI_n & -R \\ 0 & I_m \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad V = \begin{pmatrix} I_n & R \\ R^t & xI_m \end{pmatrix}.$$

Assim, temos:

$$UV = \begin{pmatrix} xI_n - RR^t & 0 \\ R^t & xI_m \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad VU = \begin{pmatrix} xI_n & 0 \\ xR^t & xI_m - R^t R \end{pmatrix}.$$

Uma vez que $\det(UV) = \det(VU)$, obtém-se:

$$\begin{aligned} \det(UV) &= \det(VU) && \Leftrightarrow \\ \det((xI_n - RR^t)(xI_m)) &= \det((xI_n)(xI_m - R^t R)) && \Leftrightarrow \\ x^m \det((xI_n - RR^t)) &= x^n \det((xI_m - R^t R)) && \Leftrightarrow \\ x^{m-n} \det((xI_n - RR^t)) &= \det((xI_m - R^t R)) && * \end{aligned}$$

Pelo Teorema 2.2.10 temos que

$$A(\mathcal{L}) = R^t R - 2I \quad \text{e} \quad RR^t = Q,$$

e, portanto:

$$\begin{aligned} P_{A(\mathcal{L}(G))}(x) &= \det(xI_m - A(\mathcal{L})) &= \det(xI_m - R^t R + 2I_m) \\ &= \det((x+2)I_m - R^t R) &\stackrel{*}{=} (x+2)^{m-n} \det((x+2)I_n - RR^t) \\ &= (x+2)^{m-n} \det((x+2)I_n - Q) &= (x+2)^{m-n} Q_G(x+2) \end{aligned}$$

seguindo o resultado. □

Uma vez conhecido o Q -espectro, concluimos do Teorema 2.2.11 que os A -autovalores

do grafo linha de G são dados por

$$q_1 - 2, q_2 - 2, \dots, q_n - 2, -2^{m-n}.$$

A respeito do menor autovalor de Q temos os resultados a seguir.

Teorema 2.2.12 ([9]). *O menor autovalor da matriz laplaciana sem sinal Q de um grafo conexo é 0 se, e somente se, o grafo é bipartido. Nesse caso 0 é um autovalor simples.*

Corolário 2.2.1 ([9]). *Em qualquer grafo, a multiplicidade do autovalor 0 da matriz Q é igual ao número de componentes bipartidas.*

É interessante notar, dos resultados exibidos nos Teoremas 2.2.9 e 2.2.12 e do Corolário 2.2.1 que o Q -polinômio, juntamente com a informação de uma das duas propriedades em questão (conexão e bipartição), nos permite obter as informações sobre a outra propriedade. Se conhecemos o número de componentes do grafo, então podemos decidir se o grafo é bipartido ou não, e se o grafo for bipartido, então podemos descobrir se ele é conexo ou não.

Outra observação importante é acerca do autovalor 0. Enquanto que na matriz L o elemento 0 sempre é um autovalor e sua multiplicidade depende exclusivamente do número de componentes conexas do grafo (Teoremas 2.2.7 e 2.2.9), na matriz Q o elemento 0 só será autovalor em grafos bipartidos e sua multiplicidade depende do número de componentes bipartidas (Teorema 2.2.12 e Corolário 2.2.1). Porém, o próximo resultado traz uma observação importante acerca do espectro das matrizes L e Q .

Teorema 2.2.13 ([9]). *O Q -polinômio de um grafo é igual ao L -polinômio se, e somente se, o grafo é bipartido.*

Demonstração. Seja G um grafo com n vértices e suponha que ele seja bipartido com partições dadas por U e V de tal forma que a partição U contenha k vértices de G e que V contenha t vértices (isto é, $k + t = n$). Consideremos também o Q -polinômio de G , $Q_G(x)$, que é dado, nesse caso, pelo determinante da matriz em blocos

$$Q - xI = \left(\begin{array}{c|c} U_{k \times k} & M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2) \\ \hline M_{t \times k}(\mathbb{Z}_2) & V_{t \times t} \end{array} \right), \quad (2.2)$$

onde

$$U_{k \times k} = \begin{pmatrix} d_{11} - x_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} - x_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{kk} - x_k \end{pmatrix}$$

e

$$V_{t \times t} = \begin{pmatrix} d_{k+1,k+1} - x_{k+1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{k+2,k+2} - x_{k+2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{nn} - x_n \end{pmatrix}$$

são matrizes diagonais (uma vez que, num grafo bipartido, todos os vértices de uma partição não estão conectados por nenhuma aresta) e $M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2)$ é uma matriz de ordem $k \times t$ cujas entradas são, de forma aleatória, todas iguais a 0 ou a 1.

Multiplicando por -1 todas as linhas correspondentes aos vértices em U (isto é, as k primeiras linhas da matriz 2.2) e logo depois multiplicando por -1 as colunas correspondentes aos vértices de U (k primeiras colunas da matriz 2.2) obtemos a matriz em blocos

$$\left(\begin{array}{c|c} U_{k \times k} & -M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2) \\ \hline -M_{t \times k}(\mathbb{Z}_2) & V_{t \times t} \end{array} \right). \quad (2.3)$$

Portanto:

$$\begin{aligned} Q_G(x) &= \det(Q - xI) = \\ &= \left| \begin{array}{c|c} U_{k \times k} & M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2) \\ \hline M_{t \times k}(\mathbb{Z}_2) & V_{t \times t} \end{array} \right| = (-1)^k (-1)^k \left| \begin{array}{c|c} U_{k \times k} & -M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2) \\ \hline -M_{t \times k}(\mathbb{Z}_2) & V_{t \times t} \end{array} \right| \\ &= \left| \begin{array}{c|c} U_{k \times k} & -M_{k \times t}(\mathbb{Z}_2) \\ \hline -M_{t \times k}(\mathbb{Z}_2) & V_{t \times t} \end{array} \right| = \det(L - xI) = L_G(x). \end{aligned} \quad (2.4)$$

□

Teorema 2.2.14 ([3]). *Seja G um grafo simples com n vértices, $\overline{G}$ seu grafo complemen-*

tar, $L(G)$ a matriz laplaciana de G e $\mu_1(G) \geq \mu_2(G) \geq \dots \geq \mu_n(G) = 0$ seus autovalores. Então:

$$i) \mu_i(\overline{G}) = n - \mu_{n-i}(G) \text{ para } i = 1, 2, \dots, n-1;$$

$$ii) \mu_1(G) \leq n.$$

Demonstração.

i) Observemos que

$$L(G) + L(\overline{G}) = L(K_n) = nI - \mathbb{1}_{n \times n},$$

onde $\mathbb{1}_{n \times n}$ é a matriz de ordem $n \times n$ cujas entradas são todas iguais a 1. O vetor $\mathbb{1}_{n \times 1}$ é um autovetor de $L(G)$ e de $L(\overline{G})$ associado ao autovalor 0. Seja então x outro autovetor de $L(G)$ associado ao autovalor μ . Podemos assumir que x é ortogonal a $\mathbb{1}_{n \times 1}$. Logo, $\mathbb{1}_{n \times 1}x = 0$ e, portanto,

$$nx = (nI - \mathbb{1}_{n \times n})x = (L(G) + L(\overline{G}))x = L(G)x + L(\overline{G})x = \mu x + L(\overline{G})x,$$

isto é,

$$L(\overline{G})x = nx - \mu x = (n - \mu)x.$$

Assim, $(n - \mu)$ é autovalor de $L(\overline{G})$. Admitindo

$$\mu_1(G) \geq \mu_2(G) \geq \dots \geq \mu_{n-1}(G) \geq \mu_n(G) = 0,$$

segue que:

$$\begin{aligned} \mu_1(\overline{G}) \geq \mu_2(\overline{G}) \geq \dots \geq \mu_{n-1}(\overline{G}) \geq \mu_n(\overline{G}) = 0 & \Leftrightarrow \\ n - \mu_{n-1}(G) \geq n - \mu_{n-2}(G) \geq \dots \geq n - \mu_1(G) \geq 0 & \Leftrightarrow ; \\ \mu_i(\overline{G}) = n - \mu_{n-i}(G) \text{ para } i = 1, 2, \dots, n-1 & \end{aligned}$$

ii) Uma vez que $n - \mu_1(G) \geq 0$ temos $\mu_1(G) \leq n$, seguindo o resultado.

□

Teorema 2.2.15 ([9]). *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Então $m = \frac{-p_1}{2}$, onde p_1 é o coeficiente de x^{n-1} no Q -polinômio de G .*

Demonstração. Seja $Q_G(x) = p_0x^n + p_1x^{n-1} + \dots + p_{n-1}x + p_n$ o Q -polinômio de G . Sabemos que $\text{tr}(Q) = 2m$. Por outro lado, através das relações de Girard, e pelo fato de $p_0 = 1$ (Teorema 2.2.5) obtemos,

$$q_1 + q_2 + \dots + q_n = -\frac{p_1}{p_0} = -p_1.$$

Logo:

$$2m = \text{tr}(Q) = q_1 + q_2 + \dots + q_n = -p_1 \Leftrightarrow m = -\frac{p_1}{2}.$$

□

Definição 2.2.1. *Dizemos que dois grafos são M -coespectrais se eles possuem o mesmo polinômio característico $M_G(x)$.*

A partir da Definição 2.2.1 acima, temos o seguinte Teorema:

Teorema 2.2.16 ([9]). *Se dois grafos são Q -coespectrais, então eles são $A(\mathcal{L})$ -coespectrais.*

Demonstração. O resultado segue de imediato a partir da equação (2.1), uma vez que grafos Q -coespectrais têm o mesmo número de vértices e arestas. □

Entretanto, a recíproca do Teorema 2.2.16 não é válida. Se dois grafos são A -coespectrais com relação aos respectivos grafos linhas, então não precisam ser necessariamente Q -coespectrais. As Figuras 2.17 e 2.18 mostram, cada uma, um exemplo de dois grafos e de seus respectivos grafos linhas.

Os grafos linhas em questão têm, ambos, polinômios característicos iguais a $P_{\mathcal{L}(G_1)}(x) = P_{\mathcal{L}(G_2)}(x) = x(x^2 - x - 4)(x - 1)(x + 1)^2$, enquanto que seus grafos de origem têm, respectivamente, Q -polinômios iguais a $Q_{G_1}(x) = x(x - 1)^2(x - 2)(x - 3)(x^2 - 5x + 2)$ e $Q_{G_2}(x) = x^2(x - 1)^2(x - 2)(x - 3)(x^2 - 5x + 2)$. Perceba que o grafo da Figura 2.17(a) possui 7 vértices, enquanto que o grafo da Figura 2.17(b) possui 8 vértices.

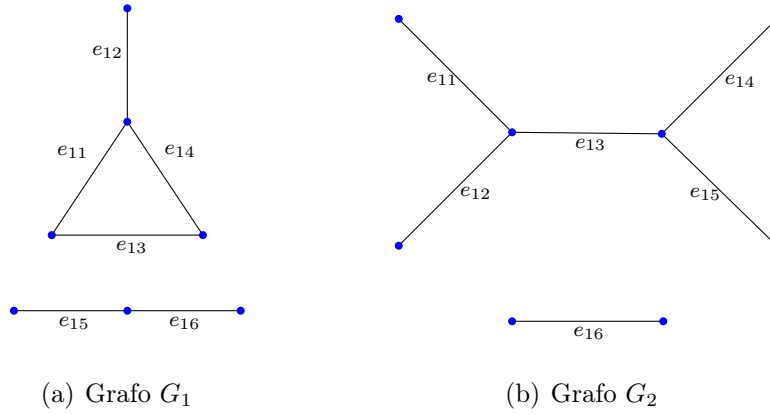


Figura 2.17. Exemplos de dois grafos que são A -coespectrais com relação aos respectivos grafos linhas e estes não são Q -coespectrais.

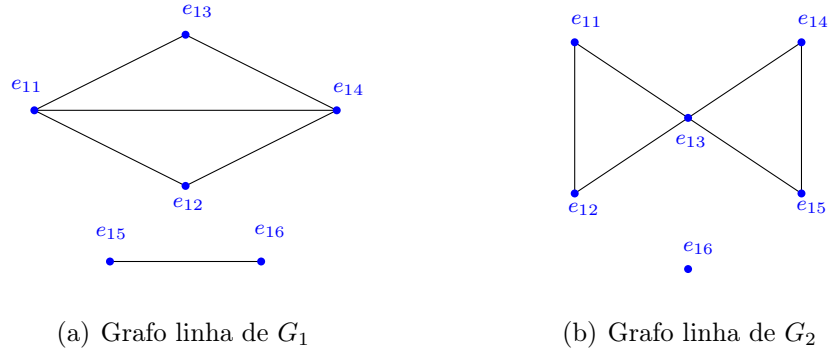


Figura 2.18. Exemplos de dois grafos que são Q -coespectrais

2.2.1 Grafos Regulares.

Uma importante ferramenta da Teoria Espectral de Grafos é reconhecer, através da referida teoria, se um grafo é regular ou não. Nesta Seção apresentamos alguns resultados acerca de grafos regulares e as matrizes associadas A , L e Q .

Definição 2.2.2. *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Dizemos que G é **regular** se cada vértice de G tem o mesmo número de adjacências, isto é, cada vértice tem o mesmo grau. Ainda, um grafo regular de grau k é chamado de um grafo **k -regular**.*

Observação: Da própria definição acima temos que todo grafo completo K_n é um grafo $(n - 1)$ -regular e que todo ciclo C_n é 2-regular.

Teorema 2.2.17 ([9]).

(i) os A -autovalores de K_n são -1 (com multiplicidade $n - 1$) e $n - 1$;

(ii) Os A -autovalores de C_n são $2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right)$, $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Teorema 2.2.18 ([9], [31]). *Se G é um grafo k -regular, então os L -autovalores e Q -autovalores são dados em função dos A -autovalores da forma*

$$\mu_i = k - \lambda_i \quad e \quad q_i = k + \lambda_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Demonstração. Uma vez que G é regular, segue que $L = D - A = kI - A$ e $Q = D + A = kI + A$. Assim, se v for um autovetor de A , então:

$$Lv = (kI - A)v = kv - Av = kv - \lambda v = (k - \lambda)v.$$

$$Qv = (kI + A)v = kv + Av = kv + \lambda v = (k + \lambda)v.$$

□

Teorema 2.2.19 ([9]).

(i) Os L -autovalores de K_n são n (com multiplicidade $n - 1$) e 0 ;

(ii) Os Q -autovalores de K_n são $n - 2$ (com multiplicidade $n - 1$) e $2n - 2$;

(iii) Os L -autovalores de C_n são $2 - 2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right)$, $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$;

(iv) Os Q -autovalores de C_n , ($n \geq 3$), são $2 + 2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right)$, $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Demonstração. Por definição, K_n e C_n são grafos regulares de ordem $k = n - 1$ e $k = 2$, respectivamente. Assim, pelos Teoremas 2.2.17 e 2.2.18:

(i)

$$Lv_i = (n - 1 - \lambda_i)v_i = (n - 1 - (-1))v_i = nv_i, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1$$

$$Lv_n = (n - 1 - \lambda_n)v_n = (n - 1 - (n - 1))v_n = 0v_n.$$

(ii)

$$\begin{aligned} Qv_i &= (n-1+\lambda_i)v_i = (n-1+(-1))v_i = (n-2)v_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \\ Qv_n &= (n-1+\lambda_n)v_n = (n-1+(n-1))v_n = (2n-2)v_n. \end{aligned}$$

(iii)

$$Lv_i = (2-\lambda_i)v_i = \left(2 - 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right)v_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

(iv)

$$Qv_i = (2+\lambda_i)v_i = \left(2 + 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right)v_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

□

Teorema 2.2.20 ([9]). *Seja G um grafo regular com n vértices e de grau k . Então:*

$$(i) \quad P_G(x) = Q_G(x+k);$$

$$(ii) \quad L_G(x) = (-1)^n Q_G(2k-x).$$

Demonstração. Uma vez que $D = kI$ (pois G é regular), e que podemos escrever $L = 2D - Q$ ($L = D - A$ e $Q = D + A \Leftrightarrow L + Q = 2D$), temos:

$$(i) \quad Q_G(x+k) = \det((x+k)I - Q) = \det(xI + kI - (D+A)) = \det(xI + kI - D - A) = \det(xI + kI - kI - A) = \det(xI - A) = P_G(x).$$

$$(ii) \quad L_G(x) = \det((xI - L) = \det(xI - 2D + Q)) = \det(xI - 2kI + Q) = \det((-1)(2kI - xI - Q)) = (-1)^n \det((2k-x)I - Q) = (-1)^n Q_G(2k-x).$$

□

O resultado do Teorema 2.2.20 nos diz que, para grafos regulares, podemos associar os polinômios da matriz de adjacência A e da laplaciana L com a matriz laplaciana sem sinal

Q . Assim, para grafos regulares, toda a teoria já existente sobre o espectro das matrizes A e L pode ser utilizada para obter o espectro da matriz Q .

Observação: Os resultados apresentados no Teorema 2.2.19 poderiam também ser obtidos usando o Teorema 2.2.20, uma vez que, para o caso de K_n , temos:

$$\begin{aligned} L_{K_n}(0) &= (-1)^n Q_{K_n}(2k) = (-1)^n Q_{K_n}(2(n-1)) = (-1)^n Q_{K_n}(2n-2). \\ L_{K_n}(n) &= (-1)^n Q_{K_n}(2k-n) = (-1)^n Q_{K_n}(2(n-1)-n) = (-1)^n Q_{K_n}(n-2), \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned} P_{K_n}(n-1) &= Q_{K_n}(n-1+k) = Q_{K_n}(n-1+n-1) = Q_{K_n}(2n-2). \\ P_{K_n}(-1) &= Q_{K_n}(-1+k) = Q_{K_n}(-1+n-1) = Q_{K_n}(n-2) \end{aligned}$$

e, para o caso de C_n , temos:

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

ou então

$$P_{C_n} \left(2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right) \right) = Q_{C_n} \left(k + \left(2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right) \right) \right) = Q_{C_n} \left(2 + 2 \cos \left(\frac{2\pi j}{n} \right) \right).$$

Teorema 2.2.21 ([9]). *Sejam G um grafo com n vértices e m arestas e q_1 o Q -índice de G . Então:*

- (i) G é regular se, e somente se, $4m = nq_1$;
- (ii) Se G é regular, então seu grau é igual a $\frac{q_1}{2}$ e o número de componentes é igual a multiplicidade de q_1 .

O próximo resultado, que caracteriza grafos regulares através da matriz de adjacência A ([10], página 104) pode ser estendido para a matriz laplaciana sem sinal Q .

Teorema 2.2.22 ([9]). *Um grafo G é regular se, e somente se, a matriz Q associada a G tem um autovetor associado ao autovalor n cujas coordenadas são todas iguais a 1.*

2.2.2 Analogias com a matriz A .

Os resultados examinados nesta subseção foram obtidos aplicando-se à matriz laplaciana sem sinal Q o mesmo raciocínio utilizado para obter os resultados referentes à matriz de adjacência A . Aqui consideraremos grafos num aspecto geral, em especial os não regulares (alguns resultados sobre grafos regulares foram apresentados na Seção anterior).

Da definição de caminho (descrita na Seção 2.1) podemos imaginar um caminho como a trajetória de um viajante ao longo das arestas através de uma representação esquemática. O viajante sempre caminha ao longo de uma aresta a partir de uma extremidade, de um vértice para o outro. Suponha que agora seja permitido para o viajante mudar o trajeto quando esse chegar no meio dele. Em vez de ele continuar ao longo da aresta (terminado o trajeto, por exemplo, entre os vértices v_k e v_{k+1} por completo), ele pode voltar ao vértice v_k e continuar o caminho por onde desejar. Ou ainda, partir do vértice v_k , ir até o vértice v_{k+1} e deste voltar para v_k . (maiores detalhes sobre semi-caminhos podem ser obtidas em [9]). Assim temos a seguinte definição de semi-caminho.

Um **semi-caminho** (de comprimento k) em um grafo não direcionado é formado por uma sequência alternada $v_1, e_{12}, v_2, e_{23}, \dots, v_k, e_{k,k+1}, v_{k+1}$ de vértices $v_1, v_2, \dots, v_k, v_{k+1}$ e arestas $e_{12}, e_{23}, \dots, e_{k,k+1}$ tal que, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, v_k e v_{k+1} são vértices iniciais e finais **não necessariamente distintos** ligados pela aresta $e_{i,i+1}$.

O Teorema 2.2.23 exhibe uma relação entre a matriz Q e o número de semi-caminhos no grafo.

Teorema 2.2.23 ([9]). *Seja G um grafo e a matriz Q associada a G . A entrada q_{ij} da matriz Q^k é igual ao número de semi-caminhos de comprimento k , começando pelo vértice i e terminando no vértice j .*

Demonstração. A demonstração é análoga ao caso da matriz de adjacência, que pode ser vista em [10], pg.44. $\square$

Definimos $\mathbb{T}_k = \sum_{i=1}^n q_i^k$ como sendo o k -ésimo **momento espectral** do espectro de Q .

Uma vez que $\mathbb{T}_k = \text{tr}(Q^k)$, (devido a simetria de Q) obtemos o seguinte corolário:

Corolário 2.2.2. *Sejam G um grafo com n vértices, m arestas, t triângulos e graus dos vértices $d_1, d_2, \dots, d_n$. Então:*

$$\begin{aligned} (i) \quad \mathbb{T}_0 &= n; & (iii) \quad \mathbb{T}_2 &= 2m + \sum_{i=1}^n d_i^2; \\ (ii) \quad \mathbb{T}_1 &= \sum_{i=1}^n d_i = 2m; & (iv) \quad \mathbb{T}_3 &= 6t + 3 \sum_{i=1}^n d_i^2 + \sum_{i=1}^n d_i^3. \end{aligned}$$

Demonstração.

(i) Imediato.

(ii) Segue direto do fato de que $\mathbb{T}_1 = \text{tr}(Q) = 2m$.

$$\begin{aligned} (iii) \quad \mathbb{T}_2 &= \text{tr}(Q^2) = \text{tr}(A + D)^2 = \text{tr}(A^2 + 2AD + D^2) = \text{tr}(A^2) + 2 \overbrace{\text{tr}(AD)}^{=0} + \text{tr}(D^2) = \\ &= \text{tr}(A^2) + \text{tr}(D^2) = 2m + \sum_{i=1}^n d_i^2. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (iv) \quad \mathbb{T}_3 &= \text{tr}(Q^3) = \text{tr}(A + D)^3 = \text{tr}(A^3 + 3A^2D + 3 \overbrace{AD^2}^{=0} + D^3) = \\ &= 6t + 3 \sum_{i=1}^n d_i^2 + \sum_{i=1}^n d_i^3. \end{aligned}$$

□

Definição 2.2.3. *TU-subgrafo.*

Seja G um grafo conexo com n vértices e m arestas, onde $m \geq n$ e

$$Q_G(x) = \sum_{i=0}^n p_i x^{n-i} = p_0 x^n + p_1 x^{n-1} + \dots + p_{n-1} x + p_n$$

o Q -polinômio de G . Os subgrafos gerados por G cujas componentes são **árvores** ou **grafos unícíclicos ímpares** (isto é, um grafo com um único ciclo e de comprimento ímpar) são chamados de **TU-subgrafos**.

Definição 2.2.4. *Peso de um TU-subgrafo.*

Suponha que H seja um TU -subgrafo de G que contém c uniciclos e s árvores $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots, \mathcal{T}_s$. Então, o **peso** $W(H)$ de H é definido como:

$$W(H) = 4^c \prod_{i=1}^s (1 + |E(\mathcal{T}_i)|),$$

onde $|E(\mathcal{T}_i)|$ é o número de arestas da árvore $\mathcal{T}_i$.

Um resultado importante na Teoria Espectral de Grafos é que podemos expressar os coeficientes de $Q_G(x)$ em termos dos pesos dos TU -subgrafos de G , conforme mostra o Teorema abaixo:

Teorema 2.2.24 ([9]). *Dado o Q -polinômio de G , $Q_G(x) = p_0x^n + p_1x^{n-1} + \dots + p_{n-1}x + p_n$:*

$$p_0 = 1 \quad e \quad p_j = \sum_{H_j} (-1)^j W(H_j),$$

onde a somatória é realizada sobre todos os TU -subgrafos H_j de G com j arestas.

Observe que os coeficientes dependem exclusivamente da contagem de subgrafos que sejam uniciclicos ímpares ou árvores.

Exemplo 1.

Neste exemplo mostramos uma aplicação direta para a determinação dos coeficientes do polinômio característico $Q_G(x)$ através dos TU -subgrafos. Assim, seja o grafo exibido na Figura 2.19:

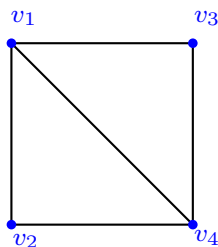


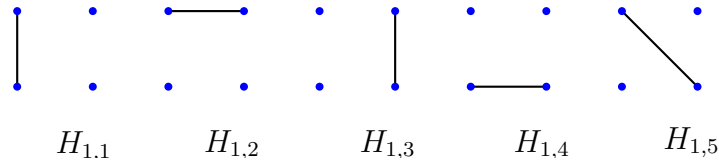
Figura 2.19. Grafo G usado como base do Exemplo 1

O Q -polinômio desse grafo é igual a:

$$Q_G(x) = \underbrace{16}_{p_4} - \underbrace{40}_{p_3}x + \underbrace{32}_{p_2}x^2 - \underbrace{10}_{p_1}x^3 + x^4.$$

Assim, em concordância com Teorema 2.2.24, sejam $H_{i,j}$ todos os j subgrafos do grafo da Figura 2.19 com exatamente i arestas.

• $H_{1,j}$



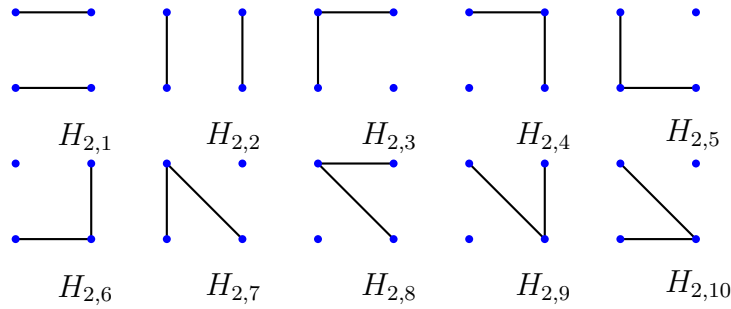
Temos, para $j = 1, 2, \dots, 5$, cada $H_{1,j}$ é um TU -subgrafo composto por uma árvore, donde:

$$W(H_{1,1}) = W(H_{1,2}) = W(H_{1,3}) = W(H_{1,4}) = W(H_{1,5}) = 2$$

e, portanto,

$$p_1 = \sum_{j=1}^5 (-1)^1 W(H_{1,j}) = -(2 + 2 + 2 + 2 + 2) = -10.$$

• $H_{2,j}$



Temos, para $j = 3, 4, \dots, 10$, cada $H_{2,j}$ é um TU -subgrafo composto por uma única

árvore, donde

$$W(H_{2,3}) = W(H_{2,4}) = \cdots = W(H_{2,10}) = 1 + 2 = 3.$$

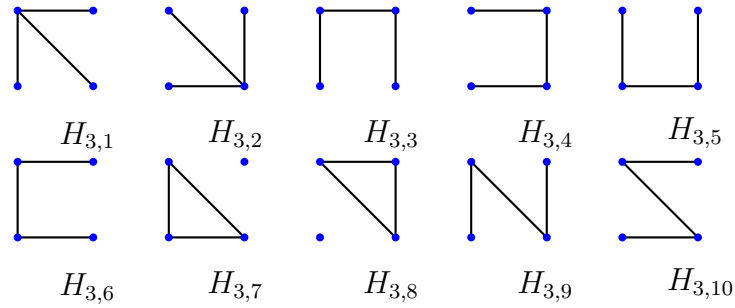
Nos casos de $H_{2,1}$ e $H_{2,2}$, cada um deles é um TU -subgrafo composto por duas árvores, cada uma com uma aresta, donde

$$W(H_{2,1}) = W(H_{2,2}) = 4^0 \prod_{i=1}^2 (1 + |E(T_i)|) = (1 + 1)(1 + 1) = 4.$$

Logo,

$$p_2 = \sum_{j=1}^{10} (-1)^2 W(H_{2,j}) = 4 + 4 + 3 \cdot 8 = 32.$$

• $H_{3,3}$



Temos, para $j = 1, 2, \dots, 10, j \neq \{7, 8\}$, cada $H_{3,j}$ é um TU -subgrafo composto por uma única árvore, cada uma com três arestas, donde:

$$W(H_{3,j}) = 1 + 3 = 4, \quad 1 \leq j \leq 10 \text{ e } j \neq 7, 8.$$

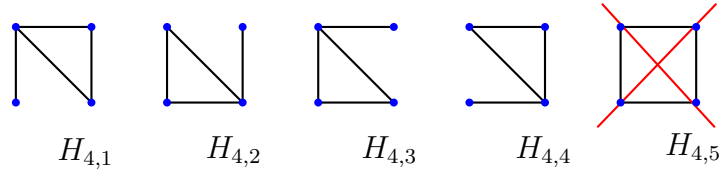
Nos casos de $H_{3,7}$ e $H_{3,8}$, cada um deles é um TU -subgrafo composto por um único ciclo ímpar C_3 , donde,

$$W(H_{3,7}) = W(H_{3,8}) = 4^1 = 4.$$

Logo,

$$p_3 = \sum_{j=1}^{10} (-1)^3 W(H_{3,j}) = -4 \cdot 10 = -40.$$

• $H_{4,j}$



Temos, para $j = 1, 2, 3, 4$, cada $H_{4,j}$ é um TU -subgrafo composto por um único ciclo. Entretanto, o subgrafo $H_{4,5}$ não é um TU -subgrafo, pois não é nem uma árvore (pois contém um ciclo), nem um ciclo ímpar. Assim, para determinar o coeficiente p_4 do Q -polinômio de G ele não é levado em consideração. Assim, teremos:

$$W(H_{4,1}) = W(H_{4,2}) = W(H_{4,3}) = W(H_{4,4}) = 4^1 = 4,$$

e, portanto,

$$p_4 = \sum_{j=1}^4 (-1)^4 W(H_{4,j}) = 4 \cdot 4 = 16.$$

Corolário 2.2.3 ([9]). $p_1 = -2m$ e $p_2 = a + \frac{3}{2}m(m-1)$ onde a é o número de pares de arestas não adjacentes em G .

Teorema 2.2.25 ([9]). Seja G um grafo com n vértices com graus dos vértices $d_1, d_2, \dots, d_n$ e q_1 o Q -índice de G . Então:

$$2 \min d_i \leq q_1(G) \leq 2 \max d_i.$$

Para um grafo conexo a igualdade ocorre em ambas as desigualdades se, e somente se, G é regular.

O Teorema 2.2.25 acima é uma reformulação direta do Teorema de Perron-Frobenius (veja [16], p.83, [10], vol.II, p.64 e [9]) acerca do maior autovalor de uma matriz M . Entre-

tanto, desigualdades mais fortes para $q_1(G)$, $q_2(G)$ e $q_3(G)$ podem ser obtidas, conforme veremos a seguir.

Teorema 2.2.26 ([9]). *Sejam G um grafo com n vértices e $\mathfrak{e}$ uma aresta de G . Então:*

$$0 \leq q_n(G - \mathfrak{e}) \leq q_n(G) \leq q_{n-1}(G - \mathfrak{e}) \leq q_{n-1}(G) \leq \dots \leq q_2(G) \leq q_1(G - \mathfrak{e}) \leq q_1(G).$$

Suponhamos que o grafo G' é obtido a partir de G “dividindo” um vértice v : isto é, se vw são as arestas incidentes a v ($w \in W \subset V$), então G' é obtido de $G - v$ adicionando dois novos vértices v_1 e v_2 e arestas v_1w_1 ($w_1 \in W_1$), v_2w_2 ($w_2 \in W_2$), onde $W_1 \cup W_2$ é uma bipartição não-trivial de W . Assim, temos o seguinte teorema:

Teorema 2.2.27 ([9]). *Se G' é obtido de um grafo conexo G dividindo qualquer um dos vértices em outros dois vértices, então $q_1(G') < q_1(G)$.*

Teorema 2.2.28 ([9]). *Seja G um grafo com n vértices com graus dos vértices $d_1, d_2, \dots, d_n$ e q_1 o Q -índice de G . Então:*

$$\min(d_i + d_j) \leq q_1(G) \leq \max(d_i + d_j),$$

onde (i, j) são todos os pares de vértices adjacentes de G . Para um grafo conexo G , a igualdade acontece em ambas as desigualdades se, e somente se, G é regular ou semi-regular bipartido.

Teorema 2.2.29 ([9]). *Seja G um grafo conexo com n vértices e m arestas. Então:*

$$q_1(G) \leq \sqrt{4m + 2(n-1)(n-2)}.$$

A igualdade acontece se, e somente se, G é um grafo completo.

Teorema 2.2.30 ([9]). *Seja G um grafo conexo com n vértices e m arestas. Então:*

$$q_1(G) \leq \frac{2m}{n-1} + n - 2.$$

A igualdade é satisfeita se, e somente se, G é K_n ou S_n .

Teorema 2.2.31 ([9]). *Sejam G um grafo com n vértices e q_1 o Q -índice de G . Então:*

(i) $q_1(G) = 0$ se, e somente se, G não possui arestas;

- (ii) $0 < q_1(G) < 4$ se, e somente se, todas as componentes de G são caminhos;
- (iii) Para um grafo G conexo temos $q_1(G) = 4$ se, e somente se, G é um ciclo ou um S_4 .

Teorema 2.2.32 ([12]). *Seja G um grafo conexo com n vértices. Então:*

$$q_n(G) < d_n.$$

Teorema 2.2.33 ([12]). *Seja G um grafo conexo com n vértices. Se $d_2 = n - 1$, então:*

$$q_2(G) = n - 2.$$

Teorema 2.2.34 ([33]). *Seja G um grafo com n vértices e $v \in V(G)$. Então, para todo $i = 1, 2, \dots, n - 1$,*

$$q_{i+1}(G) - 1 \leq q_i(G - v) \leq q_i(G),$$

onde as igualdades acontecem se, e somente se, v é um vértice isolado.

Teorema 2.2.35 ([8], [9]). *Seja G um grafo conexo com n vértices. Então:*

$$2 + 2 \cos\left(\frac{\pi}{n}\right) \leq q_1(G) \leq 2n - 2,$$

onde as igualdades acontecem se $G = P_n$ (para o limitante inferior) e $G = K_n$ (para o limitante superior).

Teorema 2.2.36 ([33]). *Seja G um grafo com n vértices, v_1, v_2 e v_3 vértices de G com graus $d_1 \geq d_2 \geq d_3$, respectivamente. Então:*

- (i) *Se v_1, v_2 e v_3 induzem a $3K_1$, então $q_3(G) \geq d_3$;*
- (ii) *Se v_1, v_2 e v_3 induzem a K_3 ou $P_2 \cup K_1$, então $q_3(G) \geq d_3 - 1$;*
- (iii) *Se v_1, v_2 e v_3 induzem a P_3 , então $q_3(G) \geq d_3 - \sqrt{2}$.*

Capítulo 3

Estado da Arte

Considere $G(V, E)$ um grafo com n vértices e $e(G)$ arestas. Relembremos que $Q(G)$ é sua matriz laplaciana sem sinal e $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ seus autovalores, e que a matriz laplaciana de G , $L(G)$, e seus autovalores $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n = 0$. Uma questão em aberto e interessante na literatura é: Quão grande pode ser a soma dos k maiores autovalores das matrizes $L(G)$ e $Q(G)$?

Neste capítulo apresentamos alguns resultados já conhecidos e relacionados com a questão acima mencionada, a qual foi conjecturada por Brouwer e Haemers (veja [3]) para a matriz laplaciana $L(G)$ e depois estendida por Ashraf et al. ([1]) para a matriz laplaciana sem sinal $Q(G)$. Para tanto, exploraremos em primeiro lugar os resultados conhecidos para a matriz laplaciana $L(G)$, seguidos dos resultados obtidos para a matriz laplaciana sem sinal $Q(G)$.

3.1 Resultados sobre a matriz laplaciana

Seja $S_k(G)$ a soma dos k maiores autovalores das matrizes laplaciana de G . Deste modo,

$$S_k(G) = \sum_{i=1}^k \mu_i.$$

Relembrando que $e(G)$ é o número de arestas de um grafo G , introduzimos a seguir a conjectura proposta por Brouwer e Haemers em [3] relacionando $S_k(G)$ e $e(G)$.

Conjectura 3.1.1. *Seja G um grafo com n vértices e $e(G)$ arestas. Então*

$$S_k(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2},$$

para $1 \leq k \leq n$.

Brouwer e Haemers em [3] verificaram a validade da conjectura através de testes computacionais para a matriz laplaciana em todos os grafos com até 10 vértices e provaram a conjectura para árvores e grafos *threshold*. Em 2012, Du e Zhou [13] mostraram que a Conjectura 3.1.1 é verdadeira para grafos unicíclicos e bicíclicos e Wang et al. mostraram em [32] que a conjectura é verdadeira para grafos tricíclicos (com $k \neq 3$) e florestas. Observemos que para $k = 1$ a prova é simples se usarmos o Teorema 2.2.14, pois

$$\mu_1(G) \leq |V(H)| \leq e(G) + 1,$$

onde H é uma componente conexa de G com o maior número de vértices e $|V(H)|$ a quantidade de vértices da componente conexa H de G .

Teorema 3.1.1 ([3]). *A Conjectura 3.1.1 é válida para $k = n$ e $k = n - 1$, isto é,*

$$S_{n-1}(G) = S_n(G) \leq e(G) + \binom{n}{2} < e(G) + \binom{n+1}{2}.$$

Demonstração. Por propriedades de matrizes tem-se que

$$tr(L) = \sum_{i=1}^n \mu_i(G).$$

Por outro lado, $tr(L) = \sum_{i=1}^n d_i = 2e(G)$ e, como $S_{n-1}(G) = S_n(G)$ (uma vez que $\mu_n(G) = 0$) segue que $S_{n-1}(G) = S_n(G) = 2e(G)$. Portanto,

$$\begin{aligned}
S_{n-1}(G) &= \sum_{i=1}^{n-1} \mu_i(G) = 2e(G) = e(G) + e(G) \leq e(G) + e(K_n) = \\
&= e(G) + \frac{n(n-1)}{2} = e(G) + \binom{n}{2} < e(G) + \binom{n+1}{2}.
\end{aligned}$$

□

Para o caso $k = 2$, Haemers et al. (2010) mostraram em [20] que a Conjectura 3.1.1 é válida para qualquer grafo G com n vértices, ou seja,

$$\mu_1(G) + \mu_2(G) \leq e(G) + 3.$$

3.2 Resultados sobre a matriz laplaciana sem sinal.

Seja o invariante $T_k(G)$ dado pela soma dos k maiores autovalores das matrizes laplaciana sem sinal de G . Deste modo,

$$T_k(G) = \sum_{i=1}^k q_i.$$

Todos os resultados da seção anterior estão relacionados ao espectro da matriz laplaciana L . Assim, baseado na mesma ideia adotada por Brouwer e Haemers ([3]), Ashraf et al. (2013) estenderam a Conjectura 3.1.1 para a matriz laplaciana sem sinal $Q(G)$ e propuseram a seguinte conjectura:

Conjectura 3.2.1. *Seja G um grafo com n vértices e $e(G)$ arestas. Então*

$$T_k(G) \leq e(G) + \binom{k+1}{2},$$

para $1 \leq k \leq n$.

Ashraf et al. (2013) mostraram em [1] que a Conjectura 3.2.1 é válida para os casos $k = 1$, $k = 2$, $k = n$ e $k = n - 1$. Os autores provaram ainda que se G é regular, então

a Conjectura 3.2.1 é válida para todo $1 \leq k \leq n$. Além disso, usando o banco de dados McKay (veja [27]), provaram computacionalmente que a Conjectura 3.2.1 é válida para todos os grafos com no máximo 10 vértices. Em 2014, Yang e You [35] provaram que a Conjectura 3.2.1 é válida para grafos unicíclicos, bicíclicos, tricíclicos (com $k \neq 3$) e para grafos conexos com k suficientemente grande.

Assim, com base nas ideias utilizadas em [1], [13], [20] e [35], bem como nos testes computacionais realizados em [1] para a matriz laplaciana sem sinal e os resultados obtidos, nossa primeira proposta de trabalho foi investigar a Conjectura 3.2.1 para outros valores de k , como descreveremos em detalhes no próximo capítulo deste trabalho.

3.3 Desigualdade de Schur.

Finalizamos este capítulo apresentando mais um importante resultado: a Desigualdade de Schur. Essa será utilizada mais adiante para a obtenção de uma desigualdade que consiste na primeira contribuição desta tese.

Teorema 3.3.1 (Desigualdade de Schur [22]). *Seja M uma matriz real simétrica com autovalores $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \dots \geq \rho_n$ e elementos na diagonal principal $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$. Então, $\sum_{i=1}^k d_i \leq \sum_{i=1}^k \rho_i$ para $1 \leq k \leq n$.*

Podemos perceber que as matrizes $L(G)$ e $Q(G)$ se enquadram às hipóteses do Teorema 3.3.1, isto é, nesses dois casos particulares, a soma de seus k maiores autovalores é limitada inferiormente pela soma dos k maiores graus dos vértices de G .

Assim, baseado no Teorema 3.3.1, conseguimos obter uma relação para a soma dos k menores autovalores das matrizes $L(G)$ e $Q(G)$ com os seus respectivos k menores graus e também provar que a igualdade é satisfeita somente quando $k = n$. As demonstrações de tais resultados são apresentadas em detalhes no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Novos Resultados em TEG

Neste capítulo apresentamos alguns novos resultados em Teoria Espectral de Grafos. Na primeira seção apresentamos limites superiores de nossa autoria para dois invariantes que são definidos em função de $S_n(G)$ e $T_n(G)$. Nas seções seguintes apresentamos duas famílias de grafos que satisfazem a Conjectura 3.2.1: uma família para $k = 3$ e a família de grafos *split* completo mais uma aresta para todo $1 \leq k \leq n$. Os resultados aqui obtidos representam a principal contribuição desta Tese.

4.1 Limitantes superiores de $S_n - S_{n-k}$ e $T_n - T_{n-k}$.

Considerando $S_n(G)$ e $T_n(G)$, definamos os seguintes invariantes:

$$\widehat{S}_k(G) = S_n(G) - S_{n-k}(G) = \sum_{i=1}^n \mu_i - \sum_{i=1}^{n-k} \mu_i = \sum_{i=1}^k \mu_{n-i+1}$$

e

$$\widehat{T}_k(G) = T_n(G) - T_{n-k}(G) = \sum_{i=1}^n q_i - \sum_{i=1}^{n-k} q_i = \sum_{i=1}^k q_{n-i+1},$$

isto é, $\widehat{S}_k(G)$ e $\widehat{T}_k(G)$ são a soma dos k menores autovalores das matrizes $L(G)$ e $Q(G)$, respectivamente. O Teorema 4.1.1 [29] é utilizado para a obtenção de um limite superior

para $\widehat{S}_k(G)$ e $\widehat{T}_k(G)$.

Teorema 4.1.1 ([29]). *Sejam A e B duas matrizes reais e simétricas de ordem n com autovalores $\lambda_i(A) \geq \lambda_{i+1}(A)$ e $\lambda_i(B) \geq \lambda_{i+1}(B)$, para $1 \leq i \leq n-1$. Então,*

$$\text{tr}(AB) \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i(A) \lambda_i(B).$$

A igualdade é válida se, e somente se, ambas matrizes possuem uma base de autovetores em comum tal que um dado autovetor está associado aos autovalores de A e B ordenadamente.

Pode-se observar que a igualdade do Teorema 4.1.1 ocorre quando o autovetor associado ao autovalor $\lambda_i(A)$ é também o autovetor associado ao autovalor $\lambda_i(B)$, $\forall 1 \leq i \leq n-1$.

Como consequência do Teorema 4.1.1 obtemos o seguinte resultado.

Proposição 4.1.1. *Sejam A e B duas matrizes reais e simétricas de ordem n com autovalores $\lambda_i(A) \geq \lambda_{i+1}(A)$ e $\lambda_i(B) \geq \lambda_{i+1}(B)$, $\forall 1 \leq i \leq n-1$. Então,*

$$\text{tr}(AB) \geq \sum_{i=1}^n \lambda_i(A) \lambda_{n-i+1}(B).$$

Demonstração. De acordo com o Teorema 4.1.1, temos que

$$\begin{aligned} \text{tr}(A(-B)) &\leq \sum_{i=1}^n \lambda_i(A) \lambda_i(-B) = \sum_{i=1}^n -\lambda_i(A) \lambda_{n-i+1}(B) \Leftrightarrow \\ -\text{tr}(AB) &\leq -\sum_{i=1}^n \lambda_i(A) \lambda_{n-i+1}(B). \end{aligned}$$

Logo,

$$\text{tr}(AB) \geq \sum_{i=1}^n \lambda_i(A) \lambda_{n-i+1}(B).$$

□

O Teorema 4.1.2 a seguir é a primeira contribuição desta Tese e estabelece um limite superior para $\widehat{S}_k(G)$ e $\widehat{T}_k(G)$.

Teorema 4.1.2. *Sejam $d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_n$ os graus dos v rtices de G (G conexo). Ent o:*

$$(i) \sum_{i=1}^k d_i \leq S_k(G) \quad e \quad \sum_{i=1}^k d_i \leq T_k(G);$$

$$(ii) \widehat{S}_k(G) \leq \sum_{i=1}^k d_{n-i+1} \quad e \quad \widehat{T}_k(G) \leq \sum_{i=1}^k d_{n-i+1};$$

(iii) *As igualdades em (i) e (ii) s o v lidas se, e somente se, $k = n$.*

Demonstra o.

(i) Segue imediatamente da Desigualdade de Schur (vide Teorema 3.3.1).

(ii) Do item (i) anterior, temos $\sum_{i=1}^{n-k} d_i \leq S_{n-k}(G)$. Como $\sum_{i=1}^n d_i = S_n(G)$, segue que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n-k} d_i &\leq S_{n-k}(G) \Leftrightarrow \\ -\sum_{i=1}^{n-k} d_i &\geq -S_{n-k}(G) \Leftrightarrow \\ \sum_{i=1}^n d_i - \sum_{i=1}^{n-k} d_i &\geq \sum_{i=1}^n d_i - S_{n-k}(G) \Leftrightarrow \\ \sum_{i=1}^k d_{n-i+1} &\geq S_n(G) - S_{n-k}(G) \Leftrightarrow \\ \sum_{i=1}^k d_{n-i+1} &\geq \widehat{S}_k(G). \end{aligned}$$

Analogamente obtemos tamb m $\sum_{i=1}^k d_{n-i+1} \geq \widehat{T}_k(G)$.

(iii) Sejam as matrizes $I_{k,n}^+$ e $I_{k,n}^-$, ambas quadradas de ordem n , tais que

$$I_{k,n}^+ = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad I_{k,n}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_k \end{pmatrix},$$

onde I_k é a matriz identidade de ordem k e os “zeros” das matrizes $I_{k,n}^+$ e $I_{k,n}^-$ representam matrizes nulas em blocos nas apropriadas dimensões.

Do Teorema 4.1.1 e da Proposição 4.1.1, tomando a matriz A como as matrizes $L(G)$ e $Q(G)$ e a matriz B como as matrizes $I_{k,n}^+$ e $I_{k,n}^-$, os itens (i) e (ii) anteriores podem ser reescritos, respectivamente, como

$$\sum_{i=1}^k d_i = \text{tr}(LI_{k,n}^+) \leq \sum_{i=1}^k \mu_i(G) = S_k(G), \quad (4.1)$$

$$\sum_{i=1}^k d_i = \text{tr}(QI_{k,n}^+) \leq \sum_{i=1}^k q_i(G) = T_k(G), \quad (4.2)$$

$$\sum_{i=1}^k d_{n-i+1} = \text{tr}(LI_{k,n}^-) \geq \sum_{i=1}^k \mu_{n-i+1}(L) = \widehat{S}_k(G), \quad (4.3)$$

$$\sum_{i=1}^k d_{n-i+1} = \text{tr}(QI_{k,n}^-) \geq \sum_{i=1}^k q_{n-i+1}(Q) = \widehat{T}_k(G). \quad (4.4)$$

Se $k = n$ a igualdade é trivial nas equações (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4), pois, ao tomarmos $I_{k,n}^+ = I_{k,n}^- = I_n$, teremos

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n d_i &= \text{tr}(LI) = \text{tr}(L) = \sum_{i=1}^n \mu_i(G) = S_n(G) \\ \sum_{i=1}^n d_i &= \text{tr}(QI) = \text{tr}(Q) = \sum_{i=1}^n q_i(G) = T_n(G). \end{aligned}$$

Suponhamos então $k < n$. De acordo com o Teorema 4.1.1, temos desigualdades estritas em (4.2) e (4.4) pois, de acordo com o Teorema de Perron-Frobenius, o vetor de Perron da matriz $Q(G)$ tem todas as entradas estritamente positivas enquanto que os autovetores associados aos respectivos maiores autovalores das matrizes $I_{k,n}^+$ e $I_{k,n}^-$ têm entradas nulas, contrariando a condição de igualdade. Para o caso da matriz $L(G)$, de acordo com o Teorema 2.2.7, temos que $\mathbb{1}_{n \times 1}$ é um autovetor de $L(G)$ associado ao autovalor 0, mas $\mathbb{1}_{n \times 1}$ não é autovetor de $I_{k,n}^+$ e $I_{k,n}^-$, contrariando também a condição de igualdade do Teorema 4.1.1. Logo as desigualdades (4.1) e (4.3) são desigualdades estritas. $\square$

Pode-se observar que o item (iii) do Teorema 4.1.2 nos diz que, nos casos das matrizes L e Q , a igualdade dada no Teorema 3.3.1 é atingida apenas quando $k = n$.

4.2 Família de grafos $G_{n,t}$.

O objetivo desta seção é provar que existe uma família infinita de grafos *split* $G_{n,t}$ que satisfaz a Conjectura 3.2.1 quando $k = 3$. Ou seja, provamos aqui que

$$q_1(G_{n,t}) + q_2(G_{n,t}) + q_3(G_{n,t}) \leq e(G_{n,t}) + 6. \quad (4.5)$$

Não encontramos na literatura nenhum trabalho abordando a soma dos três maiores autovalores da matriz laplaciana sem sinal.

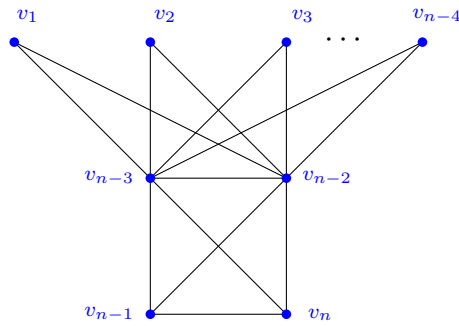
A pesquisa iniciou-se com o uso do AutoGraphiX (AGX), ferramenta baseada na metaheurística *Variable Neighborhood Search* para geração e descrição de classes de grafos e ainda determinação de grafos extremais (detalhes podem ser encontrados em [6]). A partir do AGX fomos em busca de uma solução para o seguinte problema de otimização:

$$\begin{aligned} \min \quad & e(G) + 6 - (q_1(G) + q_2(G) + q_3(G)) \\ \text{sujeito a: } & G \text{ é conexo com } n \text{ vértices} \end{aligned}$$

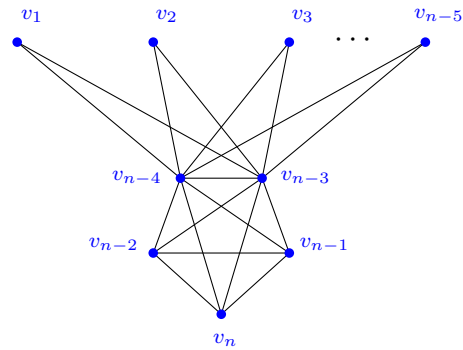
Os grafos extremais obtidos são todos grafos *splits* e podem ser descritos pela família

$$G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t), \quad 2 \leq t \leq n-4,$$

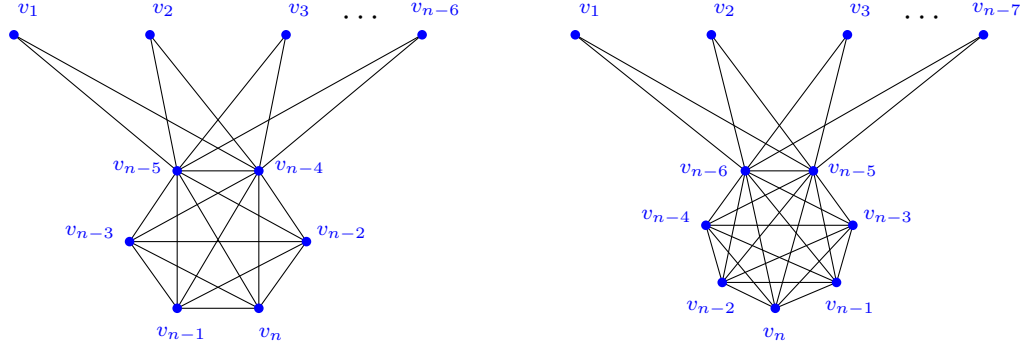
quando $t = 2$. A Figura 4.1 mostra alguns modelos da família de grafos $G_{n,t}$:



(a) Grafo $G_{n,2} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-4} \cup K_2)$



(b) Grafo $G_{n,3} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-5} \cup K_3)$



(c) Grafo $G_{n,4} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-6} \cup K_4)$

(d) Grafo $G_{n,5} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-7} \cup K_5)$

Figura 4.1. Exemplos de grafos da família $G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t)$, $2 \leq t \leq n-4$.

Observe que o grafo $G_{n,t}$ é composto por $n-t-2$ vértices independentes que estão ligados sempre a dois mesmos vértices de uma clique de tamanho $t+2$. Para tanto, para os próximos resultados e, apenas por uma questão de organização, identificaremos $v_1, v_2, \dots, v_{n-t-2}$ como os $n-t-2$ vértices independentes, v_{n-t-1} e v_{n-t} como os vértices da clique ligados aos $n-t-2$ vértices independentes e $v_{n-t+1}, v_{n-t+2}, \dots, v_{n-2}, v_{n-1}, v_n$ como os demais vértices da clique.

Nesta seção mostramos algebricamente que a família de grafos $G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t)$, $2 \leq t \leq n-4$ satisfaz a Conjectura 3.2.1 para o caso $k=3$. Para isto, provamos inicialmente três lemas técnicos que nos ajudarão a provar os resultados principais.

Lema 4.2.1. *Sejam $\alpha, \beta, n, t \in \mathbb{N}$. Se:*

- a) $n = 6 + \alpha + \beta$ e $t = 2 + \alpha$, então $2 \leq t \leq n-4$, com $n \geq 6$;
- b) $n = 8 + \alpha + \beta$ e $t = 4 + \alpha$, então $4 \leq t \leq n-4$, com $n \geq 8$;
- c) $n = 9 + \alpha + \beta$ e $t = 5 + \alpha$, então $5 \leq t \leq n-4$, com $n \geq 9$.

Demonstração.

$$a) \ n = 6 + \alpha + \beta = 4 + (2 + \alpha) + \beta \Leftrightarrow n = 4 + t + \beta \Leftrightarrow n \geq 4 + t \Leftrightarrow t \leq n - 4.$$

Do mesmo modo, $t = 2 + \alpha \Leftrightarrow t \geq 2$, e portanto $2 \leq t \leq n-4$.

$$b) \ n = 8 + \alpha + \beta = 4 + (4 + \alpha) + \beta \Leftrightarrow n = 4 + t + \beta \Leftrightarrow n \geq 4 + t \Leftrightarrow t \leq n - 4.$$

Do mesmo modo, $t = 4 + \alpha \Leftrightarrow t \geq 4$, portanto $4 \leq t \leq n-4$.

c) $n = 9 + \alpha + \beta = 4 + (5 + \alpha) + \beta \Leftrightarrow n = 4 + t + \beta \Leftrightarrow n \geq 4 + t \Leftrightarrow t \leq n - 4$.
Do mesmo modo, $t = 5 + \alpha \Leftrightarrow t \geq 5$, portanto $5 \leq t \leq n - 4$.

□

Vale ressaltar aqui que os cálculos apresentados adiante foram realizados com o apoio do Software Wolfram Mathematica[®] - For Students.

Lema 4.2.2. *Sejam $n \geq 13$, $2 \leq t \leq n - 4$ e a função $p : \mathbb{R} \times \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $p(x, n, t) = -x^3 + (n + 2t + 2)x^2 - (2nt + 4t + 4)x + 4(t^2 + t)$. Então,*

- a) $p(0, n, t) > 0$ e $p(2, n, t) < 0$;
- b) $p(t + 1, n, t) < 0$ e $p(2t, n, t) > 0$;
- c) $p(2t + 1, n, t) > 0$ e $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, n, t\right) < 0$;
- d) $p(n - 2, n, t) > 0$ e $p(t, n, t) < 0$.

Demonstração.

a) Observe que $p(0, n, t) = 4(t + t^2) > 0$ para todo $t > 0$ e $p(2, n, t) = 4t^2 + 4t + 4n - 4tn - 8$. Definamos então a função $\sigma(n, t) = p(2, n, t)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\sigma(6 + \alpha + \beta, 2 + \alpha) = -8 - 8\alpha - 4\beta - 4\alpha\beta < 0.$$

Logo, do Lema 4.2.1 a), concluímos que $\sigma(n, t) = p(2, n, t) < 0$, para todo $2 \leq t \leq n - 4$.

b) Observe que $p(2t, n, t) = 4t(t - 1) > 0$, para todo $t \geq 2$ e $p(t + 1, n, t) = -3 + n - t + 3t^2 - nt^2 + t^3$. Definamos então a função $\psi(n, t) = p(t + 1, n, t)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\psi(6 + \alpha + \beta, 2 + \alpha) = -3 - 4\alpha - \alpha^2 - 3\beta - 4\alpha\beta - \alpha^2\beta < 0.$$

Logo, do Lema 4.2.1 a), concluímos que $\psi(n, t) = p(t + 1, n, t) < 0$, para todo $2 \leq t \leq n - 4$.

c) $p(2t+1, n, t) = -3 + n - 4t + 2nt$. Definamos então a função $\xi(n, t) = p(2t+1, n, t)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\xi(6 + \alpha + \beta, 2 + \alpha) = 19 + 13\alpha + 2\alpha^2 + 5\beta + 2\alpha\beta > 0,$$

ou seja, $\xi(n, t) = p(2t+1, n, t) > 0$ para todo $2 \leq t \leq n-4$ (conforme Lema 4.2.1a)). Por outro lado:

$$\begin{aligned} p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t-2}{n}, n, t\right) = & -127 - \frac{8}{n^3} - \frac{52}{n^2} - \frac{126}{n} - 36n - 3n^2 + \frac{443t}{2} + \frac{12t}{n^3} + \frac{90t}{n^2} + \\ & \frac{229t}{n} + 47nt + \frac{5n^2t}{2} - \frac{651t^2}{4} - \frac{6t^2}{n^3} - \frac{57t^2}{n^2} - \frac{333t^2}{2n} - \frac{51nt^2}{2} - \frac{n^2t^2}{2} + \frac{565t^3}{8} + \frac{t^3}{n^3} + \frac{31t^3}{2n^2} + \\ & \frac{243t^3}{4n} + 6nt^3 - \frac{141t^4}{8} - \frac{3t^4}{2n^2} - \frac{11t^4}{n} - \frac{nt^4}{2} + \frac{19t^5}{8} + \frac{3t^5}{4n} - \frac{t^6}{8}, \end{aligned}$$

que pode ser reagrupado como

$$p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t-2}{n}, n, t\right) = a(t) + \frac{b(t)}{n^3} + \frac{c(t)}{n^2} + \frac{d(t)}{n} + e(t)n + f(t)n^2,$$

onde

$$a(t) = -127 + \frac{443t}{2} - \frac{651t^2}{4} + \frac{565t^3}{8} - \frac{141t^4}{8} + \frac{19t^5}{8} - \frac{t^6}{8},$$

$$b(t) = -8 + 12t - 6t^2 + t^3,$$

$$c(t) = -52 + 90t - 57t^2 + \frac{31t^3}{2} - \frac{3t^4}{2},$$

$$d(t) = -126 + 229t - \frac{333t^2}{2} + \frac{243t^3}{4} - 11t^4 + \frac{3t^5}{4},$$

$$e(t) = -36 + 47t - \frac{51t^2}{2} + 6t^3 - \frac{t^4}{2} \text{ e}$$

$$f(t) = -3 + \frac{5t}{2} - \frac{t^2}{2}.$$

Para estudarmos o sinal de $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t-2}{n}, n, t\right)$, reescrevemos o polinô-

mio como $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, n, t\right) = \frac{\xi_1(n, t)}{n^3}$, onde

$$\xi_1(n, t) = a(t)n^3 + b(t) + c(t)n + d(t)n^2 + e(t)n^4 + f(t)n^5.$$

Portanto, para analisarmos o sinal de $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, n, t\right)$, basta que analisemos o sinal de $\xi_1(n, t)$ (já que o denominador n^3 é sempre positivo).

Considerando α e β naturais, temos que:

$$\begin{aligned} \xi_1(9 + \alpha + \beta, 5 + \alpha) = & -49788 - \frac{290871\alpha}{2} - 145224\alpha^2 - \frac{633101\alpha^3}{8} - \frac{109557\alpha^4}{4} - \frac{50371\alpha^5}{8} - \\ & \frac{1931\alpha^6}{2} - \frac{755\alpha^7}{8} - \frac{21\alpha^8}{4} - \frac{\alpha^9}{8} - 55917\beta - \frac{204957\alpha\beta}{2} - \frac{308265\alpha^2\beta}{4} - \frac{264643\alpha^3\beta}{8} - \frac{73019\alpha^4\beta}{8} - \\ & \frac{6585\alpha^5\beta}{4} - 191\alpha^6\beta - \frac{103\alpha^7\beta}{8} - \frac{3\alpha^8\beta}{8} - 17226\beta^2 - \frac{49485\alpha\beta^2}{2} - 14658\alpha^2\beta^2 - \frac{39083\alpha^3\beta^2}{8} - \\ & \frac{2061\alpha^4\beta^2}{2} - \frac{539\alpha^5\beta^2}{4} - \frac{21\alpha^6\beta^2}{2} - \frac{3\alpha^7\beta^2}{8} - 2273\beta^3 - \frac{5401\alpha\beta^3}{2} - \frac{4981\alpha^2\beta^3}{4} - \frac{2413\alpha^3\beta^3}{8} - \\ & \frac{353\alpha^4\beta^3}{8} - \frac{27\alpha^5\beta^3}{8} - \frac{\alpha^6\beta^3}{8} - 136\beta^4 - \frac{271\alpha\beta^4}{2} - \frac{91\alpha^2\beta^4}{2} - \frac{13\alpha^3\beta^4}{2} - \frac{\alpha^4\beta^4}{2} - 3\beta^5 - \frac{5\alpha\beta^5}{2} - \frac{\alpha^2\beta^5}{2}, \end{aligned}$$

ou seja, $\xi_1(9 + \alpha + \beta, 5 + \alpha) < 0$.

Dessa forma, provamos que $\xi_1(n, t) < 0$ para $5 \leq t \leq n - 4$, o equivalente a dizer, conforme o Lema 4.2.1c), que $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, n, t\right) < 0$ para $5 \leq t \leq n - 4$.

Para os casos em que $2 \leq t \leq 4$, temos:

- $p(n + 2, n, 2) = 16 - 4n < 0$, para todo $n \geq 5$.

- $p\left(n + 2 - \frac{1}{n}, n, 3\right) = 38 + \frac{1}{n^3} + \frac{2}{n^2} - \frac{6}{n} - 3n = \frac{38n^3 + 1 + 2n - 6n^2 - 3n^4}{n^3} = \frac{f_3(n)}{n^3}$,

onde $f_3(n) = 38n^3 + 1 + 2n - 6n^2 - 3n^4$. Assim, como fora feito anteriormente, para analisarmos o sinal de $p\left(n + 2 - \frac{1}{n}, n, 3\right)$, basta que analisemos o sinal de $f_3(n)$. Como

$$f_3(13 + \alpha) = -3184 - 7252\alpha - 1566\alpha^2 - 118\alpha^3 - 3\alpha^4 < 0,$$

segue que $f_3(n) < 0$, para $n \geq 13$, ou seja, $p\left(n + 2 - \frac{1}{n}, n, 3\right) < 0$, para $n \geq 13$.

$$\bullet p\left(n+3-\frac{2}{n}, n, 4\right) = 83 + \frac{8}{n^3} + \frac{4}{n^2} - \frac{34}{n} - n^2 = \frac{83n^3 + 8 + 4n - 34n^2 - n^5}{n^3} = \frac{f_4(n)}{n^3},$$

onde $f_4(n) = 83n^3 + 8 + 4n - 34n^2 - n^5$. Como

$$f_4(9 + \alpha) = -1252 - 13244\alpha - 5083\alpha^2 - 727\alpha^3 - 45\alpha^4 - \alpha^5,$$

segue que $f_4(n) < 0$, para $n \geq 9$, ou seja, $p\left(n+3-\frac{2}{n}, n, 4\right) < 0$, para $n \geq 9$.

Assim, temos que $p\left(n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, n, t\right) < 0$, para $2 \leq t \leq n - 4$ e $n \geq 13$.

d) $p(n - 2, n, t) = 4t^2 + 4n^2 + 20t - 20n - 8tn + 24$ e $p(t, n, t) = t^3 + 2t^2 - t^2n$. Definamos então a função $\sigma_1(n, t) = p(n - 2, n, t)$ e $\sigma_2(n, t) = p(t, n, t)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\sigma_1(6 + \alpha + \beta, 2 + \alpha) = 8 + 12\beta + 4\beta^2 > 0 \text{ e}$$

$$\sigma_2(6 + \alpha + \beta, 2 + \alpha) = -8 - 8\alpha - 2\alpha^2 - 4\beta - 4\alpha\beta - \alpha^2\beta < 0.$$

Logo, do Lema 4.2.1a), concluimos que $\sigma_1(n, t) = p(n - 2, n, t) > 0$ e $\sigma_2(n, t) = p(t, n, t) < 0$ para todo $2 \leq t \leq n - 4$. $\square$

Lema 4.2.3. *Sejam $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$. Então,*

$$[0, 2] \cap [t + 1, 2t] \cap \left[2t + 1, n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}\right] = \emptyset.$$

Demonstração. Para provarmos tal afirmação é suficiente provarmos que

$$0 < 2 < t + 1 < 2t < 2t + 1 < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n},$$

para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$. Como é imediato que $2 < t + 1$, para todo $t \geq 2$ e $2t < 2t + 1$, para todo t , basta mostrarmos que $t + 1 < 2t$ e $2t + 1 < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}$, para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$.

Temos que $t + 1 < 2t$, para todo $t > 1$ (em particular para $2 \leq t \leq n - 4$). Por fim, mostremos que $2t + 1 < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}$, para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$.

Provar essa desigualdade equivale a provar

$$\begin{aligned}
2t + 1 &< n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} \\
\Leftrightarrow n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} - 2t - 1 &> 0 \\
\Leftrightarrow \frac{t^2n + 2n^2 - 9nt + 8n - 2t + 4}{2n} &> 0.
\end{aligned}$$

Como o denominador nessa última desigualdade é sempre positivo, para provarmos que $2t + 1 < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}$, basta que provemos que $t^2n + 2n^2 - 9nt + 8n - 2t + 4 > 0$, para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$. Para isto, definamos a função $\phi(n, t) = t^2n + 2n^2 - 9nt + 8n - 2t + 4$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\phi(8 + \alpha + \beta, 4 + \alpha) = 28 + 10\alpha + 9\alpha^2 + \alpha^3 + 20\beta + 3\alpha\beta + \alpha^2\beta + 2\beta^2 > 0.$$

Logo, do Lema 4.2.1b), concluímos que $\phi(n, t) > 0$ para todo $4 \leq t \leq n - 4$.

Para os casos em que $t = 2$ e $t = 3$, temos:

- $\phi(n, 2) = 2n^2 - 6n > 0$, para todo $n \geq 4$;
- $\phi(n, 3) = 2n^2 - 10n - 2 > 0$, para todo $n \geq 6$.

Assim, temos que $\phi(n, t) > 0$ para $2 \leq t \leq n - 4$ e $n \geq 13$ e, portanto,

$$\frac{t^2n + 2n^2 - 9nt + 8n - 2t + 4}{2n} = \frac{\phi(n, t)}{2n} > 0.$$

□

Assim, os Lemas 4.2.2 e 4.2.3 nos diz que o polinômio $p(x, n, t)$ na variável x possui, para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$, exatamente uma raiz em cada um dos intervalos $[0, 2]$, $[t + 1, 2t]$ e $\left[2t + 1, n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}\right]$. A Figura 4.2 exhibe graficamente o comportamento de $p(x, n, t)$.

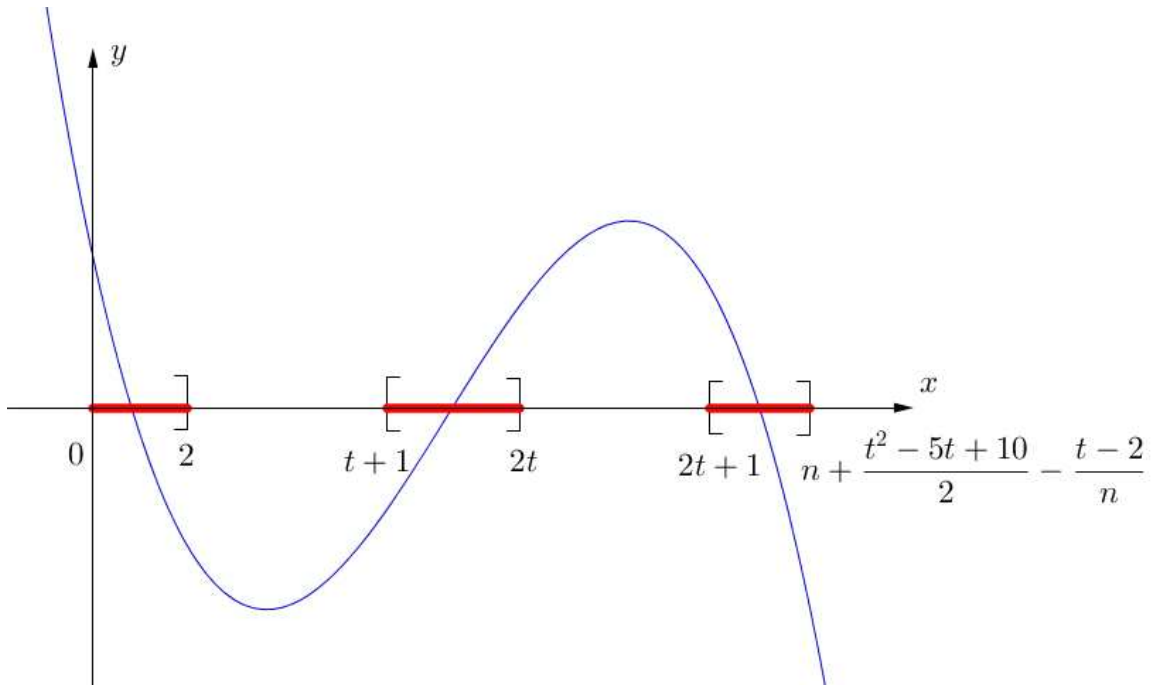


Figura 4.2. Gráfico do polinômio $p(x, n, t)$ em x , para todo $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$.

Teorema 4.2.1. *Seja G um grafo com $n \geq 13$ vértices e isomorfo ao grafo $G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t)$, tal que $2 \leq t \leq n - 4$. Então:*

- (i) 2 é autovalor de $Q(G)$ com multiplicidade $n - t - 3$;
- (ii) $n - 2$ é autovalor de $Q(G)$ com multiplicidade 1 ;
- (iii) t é autovalor de $Q(G)$ com multiplicidade $t - 1$;
- (iv) A matriz reduzida $RQ(G)$ é dada por

$$RQ(G) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ n - t - 2 & n & t \\ 0 & 2 & 2t \end{pmatrix}.$$

e seus 3 autovalores equivalem aos autovalores q_1 , q_3 e q_n de $Q(G)$.

Demonstração. Seja o conjunto de vértices ordenados $V = \{v_1, v_2, \dots, v_{n-t-2}, v_{n-t-1}, v_{n-t},$

$v_{n-t+1}, v_{n-t+2}, \dots, v_{n-1}, v_n\}$. Temos que a matriz $Q(G)$ é dada por

$$\begin{matrix} & v_1 & v_2 & \cdots & v_{n-t-2} & v_{n-t-1} & v_{n-t} & v_{n-t+1} & v_{n-t+2} & \cdots & v_{n-1} & v_n \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-t-2} \\ v_{n-t-1} \\ v_{n-t} \\ v_{n-t+1} \\ v_{n-t+2} \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccc|cc|cc|cc|cc} 2 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 2 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & n-1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & t+1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & t+1 & \cdots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & t+1 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & t+1 \end{array} \right), \end{matrix}$$

a qual pode ser reescrita como uma matriz em blocos da forma

$$\left(\begin{array}{c|c|c} 2I_{(n-t-2) \times (n-t-2)} & \mathbb{J}_{(n-t-2) \times 2} & 0_{(n-t-2) \times t} \\ \hline \mathbb{J}_{2 \times (n-t-2)} & (n-2)I_{2 \times 2} + \mathbb{J}_{2 \times 2} & \mathbb{J}_{2 \times t} \\ \hline 0_{t \times (n-t-2)} & \mathbb{J}_{t \times 2} & tI_{t \times t} + \mathbb{J}_{t \times t} \end{array} \right),$$

onde I é a matriz identidade e $\mathbb{J}$ é uma matriz cujas entradas são todas iguais a 1. Assim:

(i) Defina os vetores $x_i = e_1 - e_i, \forall i = 2, \dots, n-t-2$. Observe que $Q(G)x_i = 2x_i$. Logo, 2 é autovalor com multiplicidade, no mínimo, $n-t-3$.

(ii) O vetor $z = e_{n-t-1} - e_{n-t}$ é um autovetor associado ao autovalor $n-2$.

(iii) Defina os vetores $y_i = e_{n-t+1} - e_{n-t+i}, \forall i = 2, \dots, t$. Observe que $Q(G)y_i = ty_i$. Logo, t é autovalor com multiplicidade, no mínimo, $t-1$.

(iv) Aplicando o Teorema 2.2.6 à matriz $Q(G)$ obtemos $RQ(G)$ e todos os autovalores dessa última também são autovalores de $Q(G)$. Resta então mostrar que os três autovalores equivalem aos autovalores $q_1(G)$, $q_3(G)$ e $q_n(G)$ de $Q(G)$.

O polinômio característico de $RQ(G)$ é dado por

$$RQ_G(x) = p(x, n, t) = -x^3 + (n + 2t + 2)x^2 - (2nt + 4t + 4)x + 4(t^2 + t).$$

Dos itens (i), (ii) e (iii) acima temos $1 + n - t - 3 + t - 1 = n - 3$ autovalores conhecidos. Agora, do Lema 4.2.2a) e d) segue que

$$p(2, n, t) \neq 0, \quad p(n - 2, n, t) \neq 0 \quad \text{e} \quad p(t, n, t) \neq 0.$$

Portanto, 2, $n - 2$ e t não são autovalores de $RQ(G)$, isto é, os demais 3 autovalores de $Q(G)$ são exclusivamente determinados pela matriz $RQ(G)$ e são distintos de 2, $n - 2$ e t .

Do Lema 4.2.2a), b) e c), o polinômio característico $p(x, n, t)$ possui exatamente uma raiz em cada um dos intervalos $[0, 2]$, $[t + 1, 2t]$ e $\left[2t + 1, n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}\right]$, uma vez que $p(x, n, t)$ é de grau 3 e tais intervalos são disjuntos (conforme Lema 4.2.3).

Por [12] (Teorema 2.2.32) temos $q_n(G) < d_n(G) = 2$, então $q_n(G) \in [0, 2]$. Como $d_1(G) = d_2(G) = n - 1$ segue de [12] (Teorema 2.2.33) que $q_2(G) = n - 2$. Portanto, uma vez que $q_1(G) \geq q_2(G) \geq \dots \geq q_n(G)$, e munidos dos resultados obtidos em (i), (ii) e (iii) acima, concluímos que $q_1(G) \in \left[2t + 1, n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}\right]$, $q_3(G) \in [t + 1, 2t]$, $q_4(G) = q_5(G) = \dots = q_{t+2}(G) = t$ e $q_{t+3}(G) = q_{t+4}(G) = \dots = q_{n-1}(G) = 2$, seguindo o resultado.

□

A partir do Teorema 4.2.1 é fácil provar que $q_1(G_{n,t}) + q_2(G_{n,t}) + q_3(G_{n,t})$ é limitado superiormente por $e(G_{n,t}) + 6$, isto é, satisfaz a Conjectura 3.2.1 para $k = 3$. O Teorema 4.2.2 e suas três proposições apresentam as provas e são mais uma contribuição desta Tese.

Teorema 4.2.2. *Para $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$,*

$$T_3(G_{n,t}) < e(G_{n,t}) + 6.$$

Demonstração. Seja G isomorfo a $G_{n,t}$ para $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n - 4$. Note que o número de arestas de G pode ser dado por

$$\begin{aligned}
e(G) &= 2(n - (t + 2)) + e(K_{t+2}) \\
&= 2n - 2t - 4 + \frac{(t + 2)(t + 1)}{2} \\
&= 2n - 2t - 4 + \frac{t^2 + 3t + 2}{2} \\
&= 2n + \frac{t^2 + 3t + 2 - 4t - 8}{2} \\
&= 2n + \frac{t^2 - t - 6}{2}.
\end{aligned}$$

Pelo Teorema 4.2.1(iv), temos:

$$\begin{aligned}
2t + 1 &< q_1(G) < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n}, \\
q_2(G) &= n - 2, \\
t + 1 &< q_3(G) < 2t.
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
2t + 1 + n - 2 + t + 1 &< q_1(G) + q_2(G) + q_3(G) < n + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} + n - 2 + 2t \\
3t + n &< T_3(G) < 2n + 2t - 2 + \frac{t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} \\
3t + n &< T_3(G) < 2n + \frac{4t - 4 + t^2 - 5t + 10}{2} - \frac{t - 2}{n} \\
3t + n &< T_3(G) < 2n + \frac{t^2 - t + 6}{2} - \frac{t - 2}{n}. \tag{4.6}
\end{aligned}$$

$$\text{Porém, } e(G) = 2n + \frac{t^2 - t - 6}{2} \quad \Leftrightarrow \quad e(G) + 6 = 2n + \frac{t^2 - t - 6}{2} + 6,$$

ou seja,

$$e(G) + 6 = 2n + \frac{t^2 - t + 6}{2}. \tag{4.7}$$

Assim, substituindo (4.7) em (4.6), obtemos:

$$3t + n < T_3(G) < e(G) + 6 - \frac{t-2}{n} < e(G) + 6,$$

ou seja,

$$T_3(G) < e(G) + 6.$$

□

Proposição 4.2.1. *A Conjectura 3.2.1 é verdadeira para $G_{n,1} = CS_n^2 = K_2 \vee \overline{K}_{n-2}$, com $n \geq 13$, isto é,*

$$T_3(G_{n,1}) < e(G_{n,1}) + 6.$$

Demonstração. Para $t = 1$ temos, do Lema 4.2.2a), $p(2, n, 1) = 0$. Isso quer dizer que 2 é também autovalor da matriz reduzida $RQ(G)$ do Teorema 4.2.1(iv). Logo, a partir do Teorema 4.2.1, temos $q_2(G) = n - 2$, $q_3(G) = q_4(G) = \dots = q_{n-1}(G) = 2$, $q_1(G) = \frac{2 + n + \sqrt{-12 + 4n + n^2}}{2}$ e $q_n(G) = \frac{2 + n - \sqrt{-12 + 4n + n^2}}{2}$ ($q_1(G)$ e $q_n(G)$ obtidos através da matriz reduzida $RQ(G)$). Não é difícil ver que $\frac{2 + n + \sqrt{-12 + 4n + n^2}}{2} < n + 3$ para todo n . Assim:

$$q_1(G) < n + 3,$$

$$q_2(G) = n - 2,$$

$$q_3(G) = 2.$$

Por outro lado,

$$e(G) + 6 = (2n - 3) + 6 = 2n + 3,$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} q_1(G) + q_2(G) + q_3(G) &< (n + 3) + (n - 2) + 2 \\ &= 2n + 3 = e(G) + 6. \end{aligned}$$

□

Proposição 4.2.2. *A Conjectura 3.2.1 é verdadeira para $G_{n,n-3} = K_2 \vee (K_1 \cup K_{n-3})$, com $n \geq 13$, isto é,*

$$T_3(G_{n,n-3}) < e(G_{n,n-3}) + 6.$$

Demonstração. Para $t = n - 3$ temos, do Lema 4.2.2d), $p(n - 2, n, n - 3) = 0$. Isso quer dizer que $n - 2$ é também autovalor da matriz reduzida $RQ(G)$ do Teorema 4.2.1(iv) e como $q_2(G) = n - 2$, segue que, para $t = n - 3$, $q_2(G) = q_3(G) = n - 2$. Ainda, para esse caso, $q_4(G) = q_5(G) = \dots = q_{n-1}(G) = n - 3$ (Teorema 4.2.1(iii)), $q_1(G) = n - 1 + \sqrt{n^2 - 6n + 13}$ e $q_n(G) = n - 1 - \sqrt{n^2 - 6n + 13}$ ($q_1(G)$ e $q_n(G)$ obtidos através da matriz reduzida $RQ(G)$). Não é difícil ver que $n - 1 + \sqrt{n^2 - 6n + 13} < n + \frac{(n - 3)^2 - 5(n - 3) + 10}{2}$. Assim:

$$\begin{aligned} q_1(G) &< n + \frac{(n - 3)^2 - 5(n - 3) + 10}{2} - \frac{n - 5}{n} = n + \frac{n^2 - 11n + 34}{2} - \frac{n - 5}{n}, \\ q_2(G) &= q_3(G) = n - 2 < 2(n - 3) = 2n - 6. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} e(G) &= 2 + e(K_{n-1}) \\ &= 2 + \frac{(n - 1)(n - 2)}{2} \\ &= 2 + \frac{n^2 - 3n + 2}{2} \\ &= \frac{n^2 - 3n + 6}{2}, \end{aligned}$$

donde

$$e(G) + 6 = \frac{n^2 - 3n + 6}{2} + 6 = \frac{n^2 - 3n + 18}{2}.$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
q_1(G) + q_2(G) + q_3(G) &< n + \frac{n^2 - 11n + 34}{2} - \frac{n - 5}{n} + n - 2 + n - 2 \\
&< n + \frac{n^2 - 11n + 34}{2} - \frac{n - 5}{n} + n - 2 + (2n - 6) \\
&= 4n - 8 + \frac{n^2 - 11n + 34}{2} - \frac{n - 5}{n} \\
&= \frac{8n - 16 + n^2 - 11n + 34}{2} - \frac{n - 5}{n} \\
&= \frac{n^2 - 3n + 18}{2} - \frac{n - 5}{n} \\
&= e(G) + 6 - \frac{n - 5}{n} < e(G) + 6.
\end{aligned}$$

□

Corolário 4.2.1.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} q_1(G) + q_2(G) + q_3(G) \leq e(G) + 5$$

Proposição 4.2.3. *A Conjectura 3.2.1 é verdadeira para $G_{n,n-2} = K_2 \vee K_{n-2} = K_n$, com $n \geq 13$, isto é,*

$$T_3(G_{n,n-2}) < e(G_{n,n-2}) + 6.$$

Demonstração. De acordo com [1], K_n satisfaz a Conjectura 3.2.1 para todo $1 \leq k \leq n$. □

Assim, com base nessas informações e nas operações acima, podemos enunciar o seguinte teorema:

Teorema 4.2.3. *Seja G um grafo isomorfo ao grafo $G_{n,t} = K_2 \vee (\overline{K}_{n-t-2} \cup K_t)$, com $n \geq 13$ e $1 \leq t \leq n - 2$. Então*

$$T_3(G) < e(G) + 6.$$

Demonstração. Consequência dos resultados do Teorema 4.2.2 e das Proposições 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3. □

Observação: Dos Teoremas 2.2.33, 2.2.34 e 2.2.35, para todo grafo conexo G com $d_2(G) = n - 1$, temos

$$q_1(G) \leq 2n - 2,$$

$$q_2(G) = n - 2,$$

$$q_3(G) \leq q_2(G) + 1 = n - 1,$$

isto é, $q_1(G) + q_2(G) + q_3(G) \leq 4n - 5$. Por outro lado, da equação (4.7) temos

$$e(G_{n,t}) + 6 = 2n + \frac{t^2 - t + 6}{2}.$$

Porém, $e(G_{n,t}) + 6 = 2n + \frac{t^2 - t + 6}{2} \leq 4n - 5$ para todo $2 \leq t \leq \left\lfloor \frac{1 + \sqrt{16n - 63}}{2} \right\rfloor$, onde $\lfloor x \rfloor$ representa o maior inteiro menor ou igual a x .

Logo, a família de grafos $G_{n,t}$, com $2 \leq t \leq \left\lfloor \frac{1 + \sqrt{16n - 63}}{2} \right\rfloor$ traz novos limitantes inferiores para $q_1(G)$, $q_2(G)$ e $q_3(G)$ que são melhores que os limitantes já conhecidos e abordados nos Teoremas 2.2.33, 2.2.34 e 2.2.35 e que satisfazem a Conjectura 3.2.1. A Tabela 4.1 exibe alguns exemplos de grafos da família $G_{n,t}$ e compara os valores dos novos limitantes com os limitantes já conhecidos.

n	$\left\lfloor \frac{1 + \sqrt{16n - 63}}{2} \right\rfloor$	limitante conhecido	novos limitantes para $t = 2, 3, \dots, \left\lfloor \frac{1 + \sqrt{16n - 63}}{2} \right\rfloor$
13	6	47	30, 32, 35, 39, 44
14	6	51	32, 34, 37, 41, 46
15	7	55	34, 36, 39, 43, 48, 54
16	7	59	36, 38, 41, 45, 50, 56
17	7	63	38, 40, 43, 47, 52, 58
18	8	67	40, 42, 45, 49, 54, 60, 67
19	8	71	42, 44, 47, 51, 56, 62, 69
20	8	75	44, 46, 49, 53, 58, 64, 71
30	10	115	64, 66, 69, 73, 78, 84, 91, 99, 108
40	12	155	84, 86, 89, 93, 98, 104, 111, 119, 128, 138, 149
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Tabela 4.1. Tabela comparativa dos novos limitantes obtidos para a família de grafos $G_{n,t}$.

Exemplo 2.

Utilizando os resultados obtidos nessa seção fazemos um exemplo para o caso $t = 2$. Temos que $G_{n,2} = K_2 \vee (\overline{K_{n-4}} \cup K_2)$, $n \geq 13$. A Figura 4.3 ilustra o grafo $G_{n,2}$.

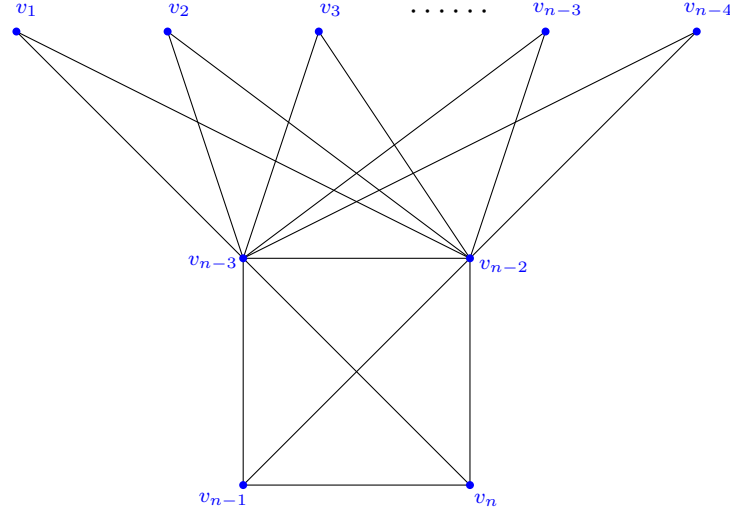


Figura 4.3. Grafo $G_{n,2} = \overline{(K_{n-4} \vee \overline{K_2})} \cup 2K_1 = ((n-4)K_1 \cup K_2) \vee K_2$, $n \geq 4$.

Rotulando o grafo $G_{n,2}$ da forma conveniente (como exibido na Figura 4.3, isto é, $v_1, v_2, \dots, v_{n-4}$ os $n-4$ vértices independentes e $v_{n-3}, v_{n-2}, v_{n-1}$ e v_n os vértices da clique K_4), obtemos a matriz $Q(G_{n,2})$ dada por

$$\begin{matrix} & v_1 & v_2 & \cdots & v_{n-4} & v_{n-3} & v_{n-2} & v_{n-1} & v_n \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-4} \\ v_{n-3} \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \\ v_n \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccc|cc|cc} 2 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & n-1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 1 & 3 \end{array} \right), \end{matrix}$$

a qual podemos escrever como uma matriz em blocos da forma

$$\left(\begin{array}{c|c|c} 2I_{(n-4) \times (n-4)} & \mathbb{J}_{(n-4) \times 2} & 0_{(n-4) \times 2} \\ \hline \mathbb{J}_{2 \times (n-4)} & (n-2)I_{2 \times 2} + \mathbb{J}_{2 \times 2} & \mathbb{J}_{2 \times 2} \\ \hline 0_{2 \times (n-4)} & \mathbb{J}_{2 \times 2} & 2I_{2 \times 2} + \mathbb{J}_{2 \times 2} \end{array} \right).$$

Observe que o conjunto de vetores $X_i = \{e_1 - e_i, \text{ para cada } i = 2, \dots, n-4\}$ e o vetor $Y = e_{n-1} - e_n$ satisfazem $Q(G_{n,2})X_i = 2X_i$ e $Q(G_{n,2})Y = 2Y$. Logo, 2 é autovalor com multiplicidade, no mínimo, $n-4$ (conforme Teorema 4.2.1(i) e (iii)). Ainda, o vetor $z = e_{n-3} - e_{n-2}$ é um autovetor de $Q(G_{n,2})$ associado ao autovalor $n-2$ (conforme Teorema 4.2.1(iii)).

A matriz reduzida $RQ(G_{n,2})$ é dada por

$$RQ(G_{n,2}) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ n-4 & n & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix},$$

e seu polinômio característico é

$$p(x, n, 2) = -x^3 + (n+6)x^2 - (4n+12)x + 24.$$

Temos então $n-4+1 = n-3$ autovalores conhecidos, e como

$$p(2, n, 2) = -4n + 16 \neq 0, \forall n > 4 \text{ e}$$

$$p(n-2, n, 2) = 4n^2 - 36n + 80 = 4(n-5)(n-4)$$

de tal forma que $p(n-2, n, 2) = 0 \Leftrightarrow n = 4 \text{ e } n = 5$, segue que $p(n-2, n, 2) \neq 0, \forall n > 5$.

Assim, 2 e $n-2$ não são autovalores de $RQ(G_{n,2})$, isto é, os demais 3 autovalores de $Q(G_{n,2})$ são exclusivamente determinados pela matriz $RQ(G_{n,2})$ e são distintos de 2 e $n-2$.

Do Lema 4.2.2a), b) e c), o polinômio caracterísitico $p(x, n, 2)$ possui exatamente uma raiz em cada um dos intervalos $[0, 2]$, $[3, 4]$ e $[5, n+2]$, uma vez que $p(x, n, 2)$ é de grau 3 e tais intervalos são disjuntos (conforme Lema 4.2.3). Assim, do Teorema 4.2.1(iv), segue que $q_1(G_{n,2}) \in [5, n+2]$, $q_2(G_{n,2}) = n-2$ e $q_3(G_{n,2}) \in [3, 4]$.

Como

$$5 < q_1(G_{n,2}) < n + 2,$$

$$q_2(G_{n,2}) = n - 2,$$

$$3 < q_3(G_{n,2}) < 4,$$

segue que,

$$n + 6 < q_1(G_{n,2}) + q_2(G_{n,2}) + q_3(G_{n,2}) < 2n + 4$$

$$n + 6 < T_3(G_{n,2}) < 2n + 4.$$

Porém, $e(G_{n,2}) = 2(n - 4) + 6 = 2n - 2 \Leftrightarrow e(G_{n,2}) + 6 = 2n + 4$, donde

$$n + 6 < T_3(G) < e(G_{n,2}) + 6,$$

e, portanto,

$$T_3(G_{n,2}) < e(G_{n,2}) + 6.$$

4.3 A família de grafos $H_{n,k}$.

Lembremos que um grafo *split* é um grafo cujos vértices podem ser particionados em uma clique e um conjunto independentes de vértices. Quando todos os vértices do conjunto independente de um grafo *split* estão conectados a todos os vértices da clique dizemos que ele é um grafo *split* completo, e denotamos por CS_n^k , onde k é o tamanho da clique e $n - k$ é o tamanho do conjunto independente de vértices. Além disso, um grafo *split* completo pode ser escrito como o *join* $CS_n^k = K_k \vee \overline{K_{n-k}}$. Seja então $H_{n,k}$ o grafo *split* completo CS_n^{k-1} mais uma aresta $e_{ij} = \{v_i, v_j\}$ para $1 \leq i, j \leq n - k - 1$ e $i \neq j$ (isto é, essa nova aresta necessariamente ligando dois vértices distintos no conjunto independente). Temos que $H_{n,k}$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}, \quad 2 \leq k \leq n - 2,$$

para $1 \leq i, j \leq n - k - 1$ e $i \neq j$. Se $k = 2$, temos $H_{n,2} = S_n^+$, isto é, $H_{n,2}$ é o grafo estrela de n vértices mais uma aresta. A Figura 4.4 mostra alguns modelos da família de grafos $H_{n,k}$ quando $k = 3, 4, 5$ e 6 . Observe que, quando $k = 3$, temos $H_{n,3} = G_{n,2}$.

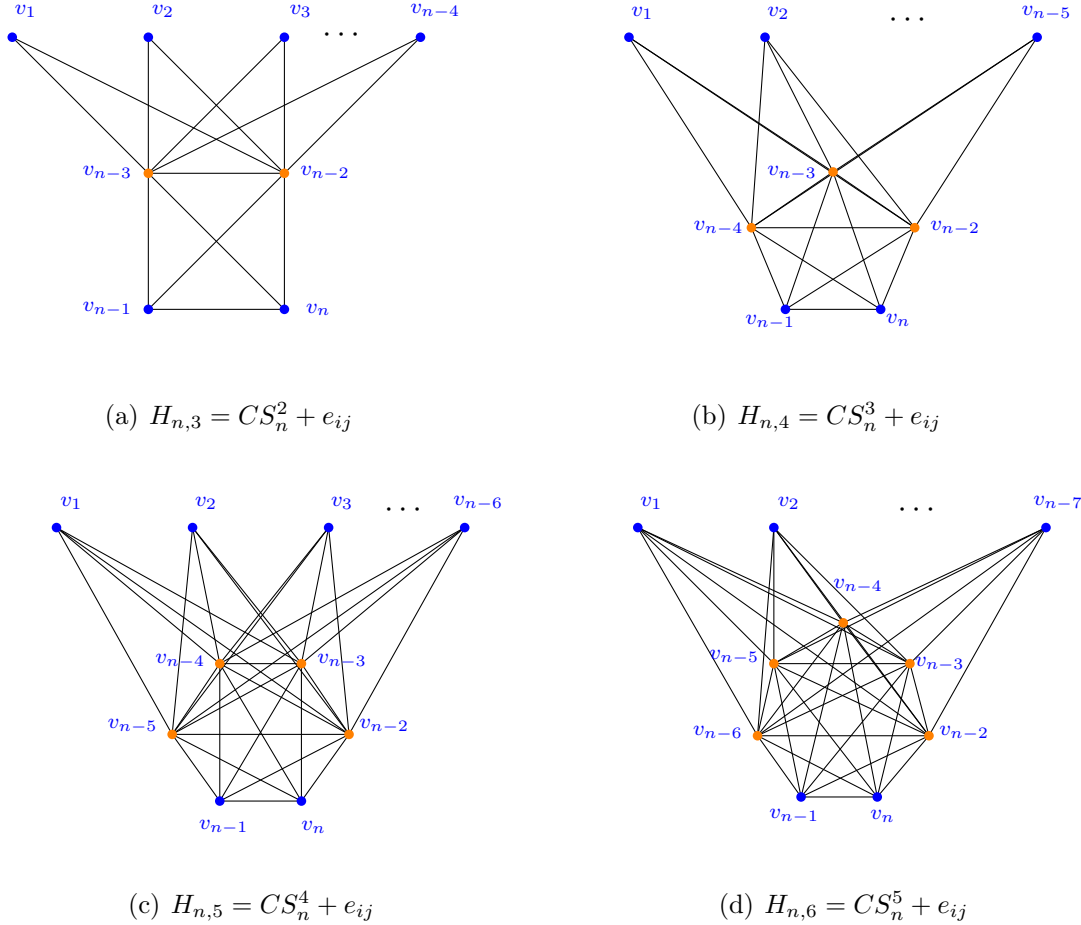


Figura 4.4. Exemplos de grafos da família $H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}$.

Mais uma vez, dependendo de qual for a escolha do parâmetro k , o grafo $H_{n,k}$ será composto por $n - k - 1$ vértices independentes que estão ligados sempre a $k - 1$ vértices de uma clique de tamanho $k + 1$. Por uma questão de organização, rotulamos os vértices de $H_{n,k}$ da seguinte forma: $v_1, v_2, \dots, v_{n-k-1}$ como os $n - k - 1$ vértices independentes; $v_{n-k}, v_{n-k+1}, \dots, v_{n-3}, v_{n-2}$ como os $k - 1$ vértices da clique ligados aos $n - k - 1$ vértices independentes e v_{n-1} e v_n como os dois outros vértices da clique.

Nesta seção, provamos que a família $H_{n,k}$ satisfaz a Conjectura 3.2.1 proposta por Ashraf et al. ([1]) para a soma dos k maiores autovalores da matriz laplaciana sem sinal,

ou seja,

$$T_k(H_{n,k}) \leq e(H_{n,k}) + \binom{k+1}{2}, \quad \text{para } 1 \leq k \leq n.$$

Para isto, provamos inicialmente quatro lemas técnicos que nos ajudarão a provar os resultados principais.

Lema 4.3.1. *Sejam $\alpha, \beta, n, k \in \mathbb{N}$. Se $n = 5 + \alpha + \beta$ e $k = 3 + \alpha$, então $3 \leq k \leq n - 2$, com $n \geq 5$.*

Demonstração.

$n = 5 + \alpha + \beta = 2 + (3 + \alpha) + \beta \Leftrightarrow n = 2 + k + \beta \Leftrightarrow n \geq 2 + k \Leftrightarrow k \leq n - 2$. Do mesmo modo, $k = 3 + \alpha \Leftrightarrow k \geq 3$, e portanto $3 \leq k \leq n - 2$.

□

Lema 4.3.2. *Sejam $n \geq 13$, $3 \leq k \leq n - 2$ e a função $p : \mathbb{R} \times \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $p(x, n, k) = x^3 - (3k + n - 3)x^2 + (nk + n + 4k^2 - 8k)x - (2k^3 - 4k^2 + 2k)$. Então,*

- a) $p(0, n, k) < 0$ e $p(k - 1, n, k) > 0$;
- b) $p(k, n, k) > 0$ e $p(k + 1, n, k) < 0$;
- c) $p(k + 2, n, k) < 0$ e $p(n + 2k - 4, n, k) > 0$;
- d) $p(n - 2, n, k) < 0$.

Demonstração. a) Observe que

$$p(0, n, k) = -2k^3 + 4k^2 + 2k \quad \text{e} \quad p(k - 1, n, k) = 2 - 2k^2 - 2n + 2kn.$$

Definamos então as funções $\delta_1(n, k) = p(0, n, k)$ e $\delta_2(n, k) = p(k - 1, n, k)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\delta_1(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = -24 - 32\alpha - 14\alpha^2 - 2\alpha^3 < 0 \text{ e}$$

$$\delta_2(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = 4 + 2\alpha + 4\beta + 2\alpha\beta > 0.$$

Logo, do Lema 4.3.1, concluímos que $\delta_1(n, k) = p(0, n, k) < 0$ e $\delta_2(n, k) = p(k - 1, n, k) > 0$, para todo $3 \leq k \leq n - 2$.

b) Observe que $p(k + 1, n, k) = 4 - 4k < 0$ para todo $3 \leq k \leq n - 2$ e

$$p(k, n, k) = -2k - k^2 + kn.$$

Definamos então a função $\delta_3(n, k) = p(k, n, k)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\delta_3(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = 3\beta + \alpha\beta > 0.$$

Logo, do Lema 4.3.1, concluímos que $\delta_3(n, k) = p(k, n, k) > 0$, para todo $3 \leq k \leq n - 2$.

c) Observe que

$$p(k + 2, n, k) = 20 - 6k + k^2 - 2n - kn$$

e

$$p(n + 2k - 4, n, k) = -16 + 30k - 16k^2 + 2k^3 + 4n - 6kn + 2k^2n.$$

Definamos então as funções $\delta_4(n, k) = p(k + 2, n, k)$ e $\delta_5(n, k) = p(n + 2k - 4, n, k)$. Considerando α e β naturais, temos que:

$$\delta_4(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = -14 - 10\alpha - 5\beta - \alpha\beta < 0 \text{ e}$$

$$\delta_5(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = 4 + 22\alpha + 18\alpha^2 + 4\alpha^3 + 4\beta + 6\alpha\beta + 2\alpha^2\beta > 0.$$

Logo, do Lema 4.3.1, concluímos que $\delta_4(n, k) = p(k + 2, n, k) < 0$ e $\delta_5(n, k) = p(n + 2k - 4, n, k) > 0$, para todo $3 \leq k \leq n - 2$.

d) Observe que

$$p(n - 2, n, k) = 4 - 6n + 2n^2 + 2k + 2nk - 2n^2k - 4k^2 + 4nk^2 - 2k^3.$$

Definamos então a função $\delta_6(n, k) = p(n - 2, n, k)$. Considerando α e β naturais, temos

que:

$$\delta_6(5 + \alpha + \beta, 3 + \alpha) = -4\beta - 2\alpha\beta - 4\beta^2 - 2\alpha\beta^2 < 0.$$

Logo, do Lema 4.3.1, concluimos que $\delta_6(n, k) = p(n-2, n, k) < 0$, para todo $3 \leq k \leq n-2$.

□

Lema 4.3.3. *Sejam $n \geq 13$ e $2 \leq t \leq n-4$, $n, t \in \mathbb{N}$. Então,*

$$[0, k-1] \cap [k, k+1] \cap [k+2, n+2k-4] = \emptyset.$$

Demonstração. Para provarmos tal afirmação, é suficiente provar que

$$0 < k-1 < k < k+1 < k+2 < n+2k-4,$$

para todo $3 \leq k \leq n-2$ e $n \geq 3$. Trivialmente temos que $0 < k-1 < k < k+1 < k+2$, para todo k . Com isso, basta mostramos que $k+2 < n+2k-4$, para todo $3 \leq k \leq n-2$ e $n \geq 3$. Logo,

$$\begin{aligned} & n+2k-4-(k+2) \\ \Leftrightarrow & n+k-2 > 0, \end{aligned}$$

uma vez que $k-2 > 0$, para todo $k \geq 3$ e $n \in \mathbb{N}$. Portanto $n+2k-4-(k+2) > 0 \Leftrightarrow n+2k-4 > k+2$. □

Assim, os Lemas 4.3.2 e 4.3.3 nos diz que o polinômio $p(x, n, t)$ na variável x possui, para todo $n \geq 13$ e $3 \leq k \leq n-2$, exatamente uma raiz em cada um dos intervalos $[0, k-1]$, $[k, k+1]$ e $[k+2, n+2k-4]$. A Figura 4.5 exhibe graficamente o comportamento de $p(x, n, t)$.

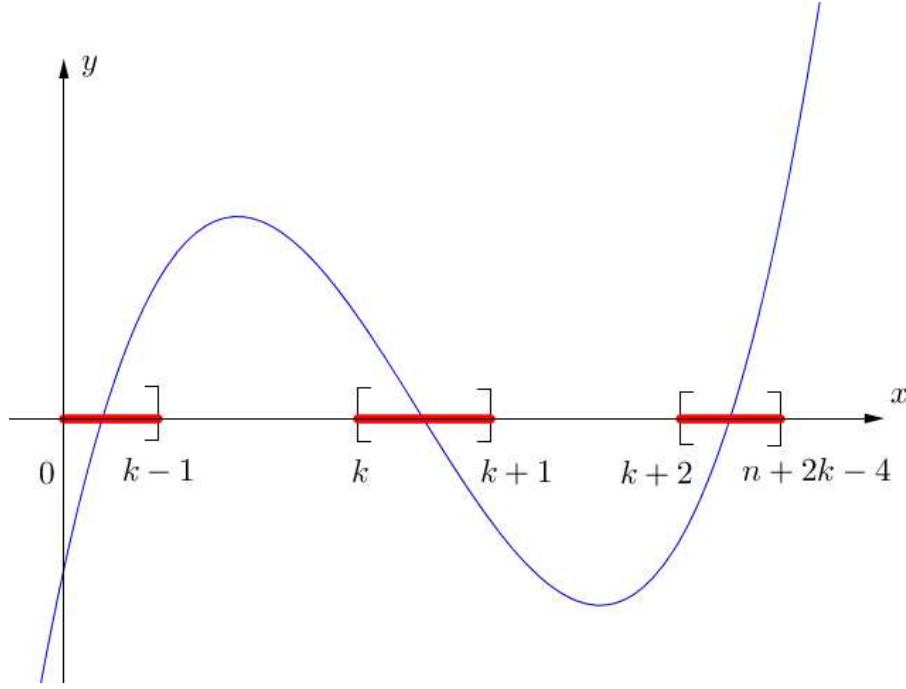


Figura 4.5. Gráfico do polinômio $p(x, n, t)$ em x , para todo $n \geq 13$ e $3 \leq k \leq n - 2$.

Lema 4.3.4. *Sejam $n, j, k, s \in \mathbb{N}$ tais que $3 \leq k \leq n - 2$ e $n \geq 13$. Então, uma vez fixados n, k , para todo $1 \leq j \leq k - 4$ e para todo $1 \leq s \leq n - k - 2$:*

$$a) \ j(n - 2) > \sum_{i=1}^j (k - i);$$

$$b) \ s(k - 1) > \sum_{i=1}^s (k + i).$$

Demonstração. a) Primeiro, observe que $k - 1 > k - 1 - j, \forall j > 0$. Para o caso $j = 1$ temos:

$$n - 2 > k - 1,$$

que é verdadeiro para todo $3 \leq k \leq n - 2$. Suponhamos então que a desigualdade a) seja válida para j e provemos que também é válida para $j + 1$. Daí temos

$$\begin{aligned}
(j+1)(n-2) = j(n-2) + n-2 &> \sum_{i=1}^j (k-i) + (n-2) \\
&> \sum_{i=1}^j (k-i) + k-1 \\
&> \sum_{i=1}^j (k-i) + (k-1-j) \\
&= \sum_{i=1}^j (k-i) + (k-(j+1)) \\
&= \sum_{i=1}^{j+1} (k-i),
\end{aligned}$$

Portanto, a desigualdade é válida para todo j natural, em particular para $1 \leq j \leq k-4$.

b)

Primeiro, observe que $k-1 < k+(s+1)$ para todo $s \geq 1$. Para o caso $s=1$ temos:

$$k-1 < k+1,$$

que é verdadeiro para todo k , em particular para $k \geq 3$. Suponhamos então que a desigualdade *b)* seja válida para s e provemos que também é válida para $s+1$. Daí temos

$$\begin{aligned}
(s+1)(k-1) = s(k-1) + k-1 &< \sum_{i=1}^s (k+i) + (k-1) \\
&< \sum_{i=1}^s (k+i) + (k+(s+1)) \\
&= \sum_{i=1}^{s+1} (k+i),
\end{aligned}$$

Portanto, a desigualdade é válida para todo s natural, em particular para $1 \leq s \leq n-k-2$.

□

Teorema 4.3.1. *Seja H um grafo com $n \geq 13$ vértices e isomorfo ao grafo $H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}$ tal que $3 \leq k \leq n-2$. Então:*

(i) $k - 1$ é autovalor de $Q(H)$ com multiplicidade $n - k - 1$;

(ii) $n - 2$ é autovalor de $Q(H)$ com multiplicidade $k - 2$;

(iii) A matriz reduzida $RQ(H)$ é dada por

$$RQ(H) = \begin{pmatrix} k-1 & k-1 & 0 \\ n-k-1 & n+k-3 & 2 \\ 0 & k-1 & k+1 \end{pmatrix},$$

e seus 3 autovalores equivalem aos autovalores q_1 , q_k e q_n de $Q(H)$.

Demonstração. Seja o conjunto de vértices ordenados $V = \{v_1, v_2, \dots, v_{n-k-1}, v_{n-k}, v_{n-k+1}, \dots, v_{n-2}, v_{n-1}, v_n\}$. Temos que a matriz $Q(H)$ é dada por

$$\begin{matrix} & v_1 & v_2 & \cdots & v_{n-k-1} & v_{n-k} & v_{n-k+1} & \cdots & v_{n-2} & v_{n-1} & v_n \\ \begin{matrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-k-1} \\ v_{n-k} \\ v_{n-k+1} \\ \vdots \\ v_{n-2} \\ v_{n-1} \\ v_n \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccc|cccc|cc} k-1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & k-1 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & k-1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & n-1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & n-1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & k & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & k \end{array} \right) \end{matrix},$$

a qual pode ser reescrita como uma matriz em blocos dada da forma

$$\left(\begin{array}{c|c|c} (k-1)I_{(n-k-1) \times (n-k-1)} & \mathbb{J}_{(n-k-1) \times (k-1)} & 0_{(n-k-1) \times 2} \\ \hline \mathbb{J}_{(k-1) \times (n-k-1)} & (n-2)I_{k-1} + \mathbb{J}_{(k-1) \times (k-1)} & \mathbb{J}_{(k-1) \times 2} \\ \hline 0_{2 \times (n-k-1)} & \mathbb{J}_{2 \times (k-1)} & (k-1)I_{2 \times 2} + \mathbb{J}_{2 \times 2} \end{array} \right),$$

onde I é a matriz identidade e $\mathbb{J}$ é uma matriz cujas entradas são todas iguais a 1. Assim:

(i) Defina os vetores $x_i = e_1 - e_i, \forall i = 2, \dots, n-k-1$ e o vetor $z = e_{n-1} - e_n$. Observe que $Q(H)x_i = (k-1)x_i$ e $Q(H)z = (k-1)z$. Logo, $k-1$ é autovalor com multiplicidade,

no mínimo, $n - k - 1$.

(ii) Defina os vetores $y_i = e_{n-k} - e_{n-k+i}, \forall i = 1, \dots, k - 2$. Observe que $Q(H)y_i = (n - 2)y_i$. Logo, $n - 2$ é autovalor com multiplicidade, no mínimo, $k - 2$.

(iii) Aplicando o Teorema 2.2.6 à matriz $Q(H)$ obtemos $RQ(H)$ e todos os autovalores dessa última também são autovalores de $Q(H)$. Resta então mostrar que os três autovalores equivalem aos autovalores $q_1(H)$, $q_k(H)$ e $q_n(H)$ de $Q(H)$.

O polinômio característico de $RQ(H)$ é dado por

$$RQ_H(x) = p(x, n, k) = x^3 - (3k + n - 3)x^2 + (nk + n + 4k^2 - 8k)x - (2k^3 - 4k^2 + 2k).$$

Dos itens (i) e (ii) acima temos $n - k - 1 + k - 2 = n - 3$ autovalores conhecidos. Agora, do Lema 4.3.2d), segue que

$$p(n - 2, n, k) \neq 0 \quad \text{e} \quad p(k - 1, n, k) \neq 0.$$

Portanto, $n - 2$ e $k - 1$ não são autovalores de $RQ(H)$, isto é, os demais 3 autovalores de $Q(H)$ são exclusivamente determinados pela matriz $RQ(H)$ e são distintos de $n - 2$ e $k - 1$.

Ora, do Lema 4.3.2a), b) e c), o polinômio característico $p(x, n, k)$ possui exatamente uma raiz em cada um dos intervalos $[0, k - 1]$, $[k, k + 1]$ e $[k + 2, n + 2k - 4]$, uma vez que $p(x, n, k)$ é de grau 3 e tais intervalos são disjuntos (conforme Lema 4.3.3).

Por [12] (Teorema 2.2.32) temos $q_n(H) < d_n(H) = k - 1$, então $q_n(H) \in [0, k - 1]$. Como $d_1(H) = d_2(H) = n - 1$ segue de [12] (Teorema 2.2.33) que $q_2(H) = n - 2$. Portanto, uma vez que $q_1(H) \geq q_2(H) \geq \dots \geq q_n(H)$, e munidos dos resultados obtidos em (i) e (ii) acima, concluímos que $q_1(H) \in [k + 2, n + 2k - 4]$, $q_2(H) = q_3(H) = \dots = q_{k-1}(H) = n - 2$, $q_k(H) \in [k, k + 1]$ e $q_{k+1}(H) = \dots = q_{n-1}(H) = k - 1$, seguindo o resultado. $\square$

A partir do Teorema 4.3.1 podemos provar que os grafos $H_{n,k}$ satisfazem a Conjectura 3.2.1, para todo $1 \leq k \leq n$. O Teorema 4.3.2 apresenta a prova e é mais uma contribuição desta Tese.

Teorema 4.3.2. *Para $n \geq 13$ e um k fixo satisfazendo $3 \leq k \leq n - 2$, defina $\mathcal{H}_k$ um grafo com n vértices isomorfo ao grafo $H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}$. Então,*

- i) $T_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2}$, isto é, a Conjectura 3.2.1 é válida para a soma de **exatamente** k autovalores;
- ii) $T_{k-1}(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2}$, isto é, a Conjectura 3.2.1 é válida para a soma de **exatamente** $k-1$ autovalores.;
- iii) $T_w(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{w+1}{2}$, para $3 \leq w \leq k-2$;
- iv) $T_w(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{w+1}{2}$, para $k+1 \leq w \leq n-2$.

Demonstração.

i) Seja $\mathcal{H}_k$ isomorfo a $H_{n,k}$ para $n \geq 13$ e $3 \leq k \leq n-2$ e k fixo. Note que o número de arestas de $\mathcal{H}_k$ é dado por

$$\begin{aligned}
e(\mathcal{H}_k) &= (n - (k+1))(k-1) + e(K_{k+1}) \\
&= nk - n - k^2 - k + k + 1 + \frac{(k+1)(k)}{2} \\
&= nk - n - k^2 + 1 + \frac{(k+1)(k)}{2}.
\end{aligned}$$

Pelo Teorema 4.3.1, temos:

$$\begin{aligned}
k+2 &< q_1(\mathcal{H}_k) < n+2k-4 \\
q_2(\mathcal{H}_k) &= q_3(\mathcal{H}_k) = \dots = q_{k-1}(\mathcal{H}_k) = n-2 \\
k &< q_k(\mathcal{H}_k) < k+1.
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
k+2 + (k-2)(n-2) + k &< q_1(\mathcal{H}_k) + q_2(\mathcal{H}_k) + \dots + q_k(\mathcal{H}_k) < \\
&< n+2k-4 + (k-2)(n-2) + k+1,
\end{aligned}$$

isto é,

$$nk - 2n + 6 < T_k(\mathcal{H}_k) < nk + k - n + 1.$$

Porém,

$$\begin{aligned}
e(\mathcal{H}_k) &= nk - n - k^2 + 1 + \frac{(k+1)(k)}{2} \Leftrightarrow \\
e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2} &= nk - n - k^2 + 1 + \frac{(k+1)(k)}{2} + \frac{(k+1)(k)}{2} \\
&= nk - n - k^2 + 1 + (k+1)k \\
&= nk + k - n + 1,
\end{aligned}$$

isto é,

$$e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2} = nk + k - n + 1$$

donde

$$nk - 2n + 6 < T_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2},$$

e, portanto,

$$T_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2}.$$

ii) Pelo item *i)* anterior temos que

$$T_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2}. \quad (4.8)$$

Por outro lado, pelo Teorema 4.3.1 *iii)* temos que

$$k < q_k(\mathcal{H}_k) < k + 1,$$

donde podemos concluir que

$$q_k(\mathcal{H}_k) > k \Leftrightarrow -q_k(\mathcal{H}_k) < -k \quad (4.9)$$

Somando membro a membro das inequações (4.8) e (4.9) obtemos

$$T_k(\mathcal{H}_k) - q_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2} - k. \quad (4.10)$$

Mas,

$$\begin{aligned} \binom{k+1}{2} - \binom{k}{2} = \binom{k}{1} &\Leftrightarrow \binom{k+1}{2} - \binom{k}{1} = \binom{k}{2} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \binom{k+1}{2} - k = \binom{k}{2}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

e, substituindo a equação (4.11) no segundo membro da desigualdade (4.10) obtemos

$$T_k(\mathcal{H}_k) - q_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2},$$

isto é,

$$T_{k-1}(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2}.$$

iii) Provemos agora que a Conjectura 3.2.1 também é satisfeita para $T_3(\mathcal{H}_k)$, $T_4(\mathcal{H}_k)$, $T_5(\mathcal{H}_k)$, $\dots$, $T_{k-2}(\mathcal{H}_k)$.

Do Teorema 4.3.1 temos

$$q_3(\mathcal{H}_k) = q_4(\mathcal{H}_k) = \dots = q_{k-2}(\mathcal{H}_k) = n - 2.$$

e portanto

$$q_3(\mathcal{H}_k) + \dots + q_{2+j}(\mathcal{H}_k) = j(n - 2),$$

com $1 \leq j \leq k - 4$. A partir da soma dos $k - 1$ maiores autovalores de $\mathcal{H}_k$ (item *ii)* acima), pra cada autovalor subtraído um a um do membro esquerdo (iniciando do autovalor $q_{k-2}(\mathcal{H}_k)$), obtemos a relação abaixo:

$$\begin{aligned}
T_{k-1}(\mathcal{H}_k) &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2} && \Leftrightarrow \\
T_{k-1}(\mathcal{H}_k) - q_{k-2} &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{k-1}{2} && \Leftrightarrow \\
T_{k-1}(\mathcal{H}_k) - q_{k-2} - q_{k-3} &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{k-2}{2} && \Leftrightarrow \\
&\vdots \quad \vdots \quad \vdots && \\
T_{k-1}(\mathcal{H}_k) - q_{k-2} - \cdots - q_3 &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{4}{2}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Observando o termo combinatório que aparece no segundo membro de cada umas das desigualdades dadas em (4.12) e, usando a relação de Stifel

$$\binom{a}{b} - \binom{a-1}{b} = \binom{a-1}{b-1} \Leftrightarrow \binom{a-1}{b} = \binom{a}{b} - \binom{a-1}{b-1},$$

com $a, b \in \mathbb{N}$ e $a \geq 2$, temos:

$$\begin{aligned}
\bullet \binom{k-1}{2} &= \binom{k}{2} - \binom{k-1}{1} \\
&= \binom{k}{2} - (k-1). \\
\bullet \binom{k-2}{2} &= \binom{k-1}{2} - \binom{k-2}{1} \\
&= \binom{k}{2} - \binom{k-1}{1} - \binom{k-2}{1} \\
&= \binom{k}{2} - (k-1) - (k-2). \\
\bullet \binom{k-3}{2} &= \binom{k-2}{2} - \binom{k-3}{1} \\
&= \binom{k}{2} - \binom{k-1}{1} - \binom{k-2}{1} - \binom{k-3}{1} \\
&= \binom{k}{2} - (k-1) - (k-2) - (k-3). \\
&\vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
\bullet \binom{4}{2} &= \binom{k}{2} - \sum_{i=1}^{k-4} (k-i).
\end{aligned}$$

Assim, para mostramos que a Conjectura 3.2.1 é válida para $T_3(\mathcal{H}_k)$, $T_4(\mathcal{H}_k)$, $T_5(\mathcal{H}_k)$, $\dots$,

$T_{k-2}(\mathcal{H}_k)$, precisamos provar então que, para todo $1 \leq j \leq k-4$,

$$T_{k-1}(\mathcal{H}_k) - j(n-2) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2} - \sum_{i=1}^j (k-i), \quad (4.13)$$

e como, do item *ii*) acima,

$$T_{k-1}(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k}{2},$$

é suficiente provarmos que

$$-j(n-2) \leq -\sum_{i=1}^j (k-i). \quad (4.14)$$

Ora, provar a desigualdade (4.14) equivale a provar

$$j(n-2) \geq \sum_{i=1}^j (k-i)$$

que é verdadeira, de acordo com o Lema 4.3.4a), para todo $1 \leq j \leq k-4$, donde a equação (4.14) é válida, seguindo o resultado.

iv) Provemos agora, a partir do item *i*) acima, que $T_{k+1}(\mathcal{H}_k), T_{k+2}(\mathcal{H}_k), \dots, T_{n-3}(\mathcal{H}_k), T_{n-2}(\mathcal{H}_k)$ satisfazem a Conjectura 3.2.1.

Do Teorema 4.3.1 (*ii*) e (*iii*) segue que

$$q_{k+1}(\mathcal{H}_k) = q_{k+2}(\mathcal{H}_k) = \dots = q_{n-2}(\mathcal{H}_k) = k-1,$$

e portanto

$$q_{k+1}(\mathcal{H}_k) + q_{k+2}(\mathcal{H}_k) + \dots + q_{w+s}(\mathcal{H}_k) = s(k-1),$$

para $1 \leq s \leq n-k-2$. A partir da soma dos k maiores autovalores de $\mathcal{H}_k$ (item *i*) acima), pra cada autovalor somado um a um ao membro esquerdo (iniciando do autovalor $q_{k+1}(\mathcal{H}_k)$), obtemos a relação abaixo:

$$\begin{aligned}
T_k(\mathcal{H}_k) &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2} \Leftrightarrow \\
T_k(\mathcal{H}_k) + q_{w+1} &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{w+2}{2} \Leftrightarrow \\
T_k(\mathcal{H}_k) + q_{k+1} + q_{k+2} &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+3}{2} \Leftrightarrow \\
&\vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
T_k(\mathcal{H}_k) + q_{k+1} + \cdots + q_{n-2} &< e(\mathcal{H}_k) + \binom{n-1}{2},
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Observando o termo combinatório que aparece no segundo membro de cada umas das desigualdades dadas em (4.15) e, usando a relação de Stifel

$$\binom{a}{b} - \binom{a-1}{b} = \binom{a-1}{b-1} \Leftrightarrow \binom{a}{b} = \binom{a-1}{b} + \binom{a-1}{b-1},$$

com $a, b \in \mathbb{N}$ e $a \geq 2$, temos:

$$\begin{aligned}
\bullet \binom{k+2}{2} &= \binom{k+1}{2} + \binom{k+1}{1} \\
&= \binom{k+1}{2} + (k+1) \\
\bullet \binom{k+3}{2} &= \binom{k+2}{2} + \binom{k+2}{1} \\
&= \binom{k+1}{2} + \binom{k+1}{1} + \binom{k+2}{1} \\
&= \binom{k+1}{2} + (k+1) + (k+2) \\
\bullet \binom{k+4}{2} &= \binom{k+3}{2} + \binom{k+3}{1} \\
&= \binom{k+1}{2} + \binom{k+1}{1} + \binom{k+2}{1} + \binom{k+3}{1} \\
&= \binom{k+1}{2} + (k+1) + (k+2) + (k+3) \\
&\vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
\bullet \binom{n-2}{2} &= \binom{k+1}{2} + \sum_{i=1}^{n-k-2} (k+i)
\end{aligned}$$

Assim, para mostramos que a Conjectura 3.2.1 é válida para $T_{k+1}(\mathcal{H}_k)$, $T_{k+2}(\mathcal{H}_k)$, $\dots$, $T_{n-3}(\mathcal{H}_k)$, $T_{n-2}(\mathcal{H}_k)$, precisamos provar então que, para todo $1 \leq s \leq n - k - 2$,

$$T_k(\mathcal{H}_k) + s(k - 1) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2} + \sum_{i=1}^s (k + i), \quad (4.16)$$

e como, do item $i)$ acima,

$$T_k(\mathcal{H}_k) < e(\mathcal{H}_k) + \binom{k+1}{2},$$

é suficiente provarmos que

$$s(k - 1) < \sum_{i=1}^s (k + i), \quad (4.17)$$

para todo $1 \leq s \leq n - k - 2$. Porém, de acordo com o Lema 4.3.4b), a equação (4.17) é verdadeira para todo $1 \leq s \leq n - k - 2$, seguindo o resultado.

□

Munidos do Teorema 4.3.2 e do fato de que a Conjectura 3.2.1 é válida para $k = 1$, $k = 2$, $k = n - 1$ e $k = n$. (conforme [1]), temos como consequência imediata o resultado abaixo.

Teorema 4.3.3. *Para H isomorfo ao grafo $H_{n,k} = CS_n^{k-1} + e_{ij}$, temos*

$$T_k(H) < e(H) + \binom{k+1}{2},$$

para todo $1 \leq k \leq n$.

Considerações Finais e Perspectivas

Apresentamos duas famílias de grafos que satisfazem a conjectura proposta em [1] por Ashraf et al.: uma delas, uma subfamília $G_{n,t}$ da família de grafos *split* que satisfaz a Conjectura 3.2.1 para a soma dos 3 maiores autovalores de Q , e a família de grafos *split* completo mais uma aresta $H_{n,k}$, que satisfaz a Conjectura 3.2.1 para todo $1 \leq k \leq n$. Ainda, promovemos um limitante superior (dado pela soma dos k menores graus de um grafo G) para a soma dos k menores autovalores da matriz laplaciana L e laplaciana sem sinal Q . Experimentos computacionais usando o AutoGraphiX (AGX) nos ajudaram tanto na busca dessas famílias de grafos quanto nas ideias dos resultados algébricos dessa Tese.

Os experimentos usando o AGX, quando aplicado ao problema de otimização

$$\begin{aligned} \min \quad & e(G) + 6 - (q_1(G) + q_2(G) + q_3(G)) \\ \text{sujeito a: } & G \text{ é conexo com } n \text{ vértices,} \end{aligned}$$

nos deu como solução o grafo *split* $G_{n,2}$, composto por $n - 4$ vértices independentes e uma clique de tamanho 4. Pelo fato do AGX ser uma ferramenta heurística para geração e descrição de classes de grafos (e ainda determinação de grafos extremos), é de se suspeitar que entre todos os grafos com n vértices, o grafo $G_{n,2}$ é o grafo que melhor se aproxima da conjectura proposta por Ashraf et al. em [1], ao somarmos os 3 maiores autovalores de Q , isto é, $G_{n,2}$ é o grafo que otimiza o problema de minimização descrito acima.

Baseado nessa heurística, conseguimos provar algebricamente que

$$e(G_{n,2}) + 6 - \frac{7.5}{n} < T_3(G_{n,2}) < e(G_{n,2}) + 6$$

onde

$$n + 2 - \frac{4}{n} < q_1(G_{n,2}) < n + 2,$$

$$q_2(G_{n,2}) = n - 2,$$

$$4 - \frac{3.5}{n} < q_4(G_{n,2}) < 4,$$

e $T_3(G_{n,2})$ tende à $e(G_{n,2}) + 6$ a medida que n tende ao infinito.

Com raciocínio análogo, usamos o AGX para obter os possíveis grafos extremais para o problema de otimização

$$\begin{aligned} \min \quad & e(G) + \binom{k+1}{2} - (q_1(G) + q_2(G) + \dots + q_k(G)) \\ \text{sujeito a: } & G \text{ é conexo com } n \text{ vértices e } 1 \leq k \leq n. \end{aligned}$$

A tabela abaixo mostra os resultados obtidos ao fixarmos $k = 3, 4, 5, \dots, 8$.

k	Grafo exibido pelo AGX
3	$H_{n,3} = G_{n,2}$
4	$H_{n,4}$
5	$H_{n,5}$
6	$H_{n,6}$
7	$H_{n,7}$
8	$H_{n,8}$

Assim, baseado nos experimentos realizados pelo AGX, suspeitamos que o grafo que melhor se aproxima do problema de minimização para a soma dos k maiores autovalores de Q é o grafo da família $H_{n,k}$, quando somamos **exatamente** seus k maiores autovalores. Computacionalmente (mas que carece ainda de algumas demonstrações algébricas), pudemos mostrar que, uma vez escolhido o valor de k (com $3 \leq k \leq n - 2$),

$$e(H_{n,k}) + \binom{k+1}{2} - \frac{k(\sqrt{k}+2)}{n} < T_k(H_{n,k}) < e(H_{n,k}) + \binom{k+1}{2}, \quad (4.18)$$

onde

$$n + 2k - 4 - \frac{k\sqrt{k}}{n} < q_1 < n + 2k - 4,$$

$$q_2 = q_3 = \cdots = q_{k-1} = n - 2,$$

$$k + 1 - \frac{2k}{n} < q_k < k + 1.$$

Entretanto, uma vez que $3 \leq k \leq n - 2$, nada podemos garantir sobre seu comportamento assintótico, já que o numerador da fração que aparece no membro mais à esquerda da equação (4.18) também é variável.

Por fim estamos à procura de algum tipo de aplicação para os resultados obtidos nessa Tese, bem como nos resultados já conhecidos na literatura, (como já fora feito, por exemplo, considerando as ideias de aplicação utilizadas em [11], [15], [18], [19], [23], [24], [25] e [26]).

Referências Bibliográficas

- [1] Ashraf, F., Omid, G.R. and Tayfeh-Rezaie, B., *On the sum of signless Laplacian eigenvalues of a graph*: Linear Algebra and its Applications, 438, 4539-4546, 2013.
- [2] Biggs, N., *Algebraic Graph Theory*: Second Edition, Cambridge Mathematical Library, 1994.
- [3] Brouwer, A. E. and Haemers W.H., *Spectra of graphs*: Disponível em: <http://homepages.cwi.nl/~aeb/math/ipm.pdf>.
- [4] Boaventura Netto, P.O., *Grafos - Teoria, Modelos, Algoritmos*: 4a. edição revista e ampliada, Editora Edgard Bluncher, 2006.
- [5] Bollobás, B., *Graph Theory: An Introductory Course*: Graduate Texts in Mathematics, Springer-Verlag, 1979.
- [6] Caporossi, G. and Hansen, P., *Variable neighborhood search for extremal graphs: 1 The AutoGraphiX system*: Discrete Mathematics, 212, 29-44, 2000.
- [7] Mansour, T., *Adjoint polynomials of bridge-path and bridge-cycle graphs and Chebyshev polynomials*: Discrete Mathematics, 311, 1778-1785, 2011
- [8] Yan, C., *Properties of spectra of graphs and line graphs*: Appl. Math. J. Chinese Univ. Ser. B., 17(3), 371-376, 2002.
- [9] Cvetković, D., *Spectral theory of Graphs Based on the Signless Laplacian - A quick Outline*: Research Report, Mathematical Institute SANU, 2010.
- [10] Cvetković, D., Doob M., Sachs H. *Spectra of Graphs - Theory and Application*. Academic Press Inc., New York, 1980.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [11] Daoud, S. N., *On the complexity of a Class of Pyramid Graphs and Chebyshev Polynomials*. Mathematical Problems in Engineering, 2013.
- [12] Das, K.C., *On conjectures involving second largest signless Laplacian eigenvalue of graphs*: Linear Algebra and its Applications, 432, 3018-3029, 2010
- [13] Du, Z., B. Zhou, *Upper bounds for the sum of Laplacian eigenvalues of graphs*. Linear Algebra and its Applications, 436, 3672-3683, 2012.
- [14] Freitas, M.A.A. "Grafos Integrais, Laplacianos Integrais e Q -integrais", Tese de Doutorado, Engenharia de Produção, COPPE, UFRJ, 2009.
- [15] Galina, H., *Eigenvalue spectra for Gaussian semilinear polymer graphs*: Journal de Physique Lettres, 45, L1077-L1082, 1984.
- [16] Gantmacher F.R., *Theory of Matrices I, II*: Chelsea, New York, 1960.
- [17] Godsil, C., Royle, G.: *Algebraic Graph Theory*, Graduate Texts in Mathematics; 207, Springer, 2000.
- [18] Ghorbani, E., *Spanning trees and even integer eigenvalues of graphs*: Discrete Mathematics, 324, 62-67, 2014.
- [19] Gutman, I., S. Lee, G. C. Chu and Y. Luo: *Chemical applications of the Laplacian spectrum of molecular graphs: Studies of the Wiener number*, 33A, 603-608, 1994.
- [20] Haemers, W.H., A. Mohammadian and B. Tayfeh-Rezaie, *On the sum of Laplacian Eigenvalues of Graphs*: Linear Algebra and its Applications, 432, 2214-2221, 2010.
- [21] Haemers, W.H. and E. Spence, *Enumeration of cospectral graphs*: European Journal of Combinatorics, 25, 199-211, 2004.
- [22] Brouwer, A.E., Haemers, W.H.: *Spectra of Graphs - Monograph*, Springer, 2011.
- [23] Kalman, D., *A Matrix Proof of Newton's Identities*: Mathematics Magazine, 73, 313-315, 2000.
- [24] Mohar, B., *On the sum of k largest eigenvalues of graphs and symmetric matrices*: Journal of Combinatorial Theory, Series B, 99, 306-313, 2009.
- [25] Mohar, B., *The Laplacian Spectrum of Graphs*: Graph Theory, Combinatorics and Applications, 2, 871-898, 1991.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [26] Mansour, T., *Adjoint polynomials of bridge-path and bridge-cycle graphs and Chebyshev polynomials*: Discrete Mathematics, 311, 1778-1785, 2011.
- [27] B. McKay, Combinatorial Data. Disponível em:
<http://cs.anu.edu.au/~bdm/data/>.
- [28] Abreu, N.M.M., Renata R.D., Cybele T.M.V., Dragan C.: *Introdução à Teoria Espectral de Grafos com Aplicações*, Notas em Matemática Aplicada SBMAC, 2007.
- [29] Theobald, C.M., *An inequality for the trace of the product of two symmetric matrices*: Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 77, 265-267, 1975.
- [30] van Dam, E.R. and W.H. Haemers, *Which graphs are determined by their spectrum*: Linear Algebra and its Applications, 373, 241-272, 2003.
- [31] Vishveshwara, S., K.V. Brinda and N.Kannan, *Protein Structure: Insights from Graph Theory*: Journal of Theoretical and Computational Chemistry, 1, 187-211, 2002.
- [32] Wang, S., Huang, Y. and Liu, B., *On a conjecture for the sum of Laplacian eigenvalues*: Mathematical and Computer Modelling, 56, 60-68, 2012.
- [33] Wang, J. and B. Franceso, *A note on the signless Laplacian eigenvalues of graphs*: Linear Algebra and its Applications, 435, 2585-2590, 2011.
- [34] Wilf, H.S., *The eigenvalues of a graph and its chromatic number*, J. London Math. Soc., 42, 330 - 332, 1967.
- [35] Yang, J. and L. You, *On a conjecture for the signless Laplacian eigenvalues*: Linear Algebra and its Applications, 446, 115-132, 2014.

Apêndice A

Programas

A.1 Cálculos Realizados no Lema 2

Exit

Definição da função $p(x,n,t)$, que determina, no Teorema 42(iv), o polinômio característico $p(x,n,t)$ da matriz reduzida de $G_{n,t}$.

$p[x_, n_, t_] := 4 (t^2 + t) + (-2 n t - 4 t - 4) x + (n + 2 t + 2) x^2 - x^3$

item a).

p[0, n, t] // Expand
p[2, n, t] // Expand
 $4 t + 4 t^2$
 $- 8 + 4 n + 4 t - 4 n t + 4 t^2$
sigma[n_, t_] := p[2, n, t]
sigma[6 + a + b, 2 + a] // Expand
 $- 8 - 8 a - 4 b - 4 a b$

item b).

p[2 t, n, t] // FullSimplify
p[t + 1, n, t] // Expand

$$4(-1+t)t$$

$$-3+n-t+3t^2-nt^2+t^3$$

$$\text{psi}[n_, t_] := p[t+1, n, t]$$

$$\text{psi}[6+a+b, 2+a] // \text{Expand}$$

$$-3-4a-a^2-3b-4ab-a^2b$$

item c).

$$\text{limsupq1} := n + (t^2 - 5t + 10) / 2 - (t-2) / n$$

$$p[2t+1, n, t] // \text{Expand}$$

$$p[\text{limsupq1}, n, t] // \text{Expand}$$

$$-3+n-4t+2nt$$

$$\begin{aligned} & -127 - \frac{8}{n^3} - \frac{52}{n^2} - \frac{126}{n} - 36n - 3n^2 + \frac{443t}{2} + \frac{12t}{n^3} + \frac{90t}{n^2} + \frac{229t}{n} + \\ & 47nt + \frac{5n^2t}{2} - \frac{651t^2}{4} - \frac{6t^2}{n^3} - \frac{57t^2}{n^2} - \frac{333t^2}{2n} - \frac{51nt^2}{2} - \frac{n^2t^2}{2} + \frac{565t^3}{8} + \\ & \frac{t^3}{n^3} + \frac{31t^3}{2n^2} + \frac{243t^3}{4n} + 6nt^3 - \frac{141t^4}{8} - \frac{3t^4}{2n^2} - \frac{11t^4}{n} - \frac{nt^4}{2} + \frac{19t^5}{8} + \frac{3t^5}{4n} - \frac{t^6}{8} \end{aligned}$$

$$\text{eps}[n_, t_] := p[2t+1, n, t]$$

$$\text{eps}[6+a+b, 2+a] // \text{Expand}$$

$$19+13a+2a^2+5b+2ab$$

$$\begin{aligned} \text{aux}[n_, t_] := & -127 - \frac{8}{n^3} - \frac{52}{n^2} - \frac{126}{n} - 36n - 3n^2 + \frac{443t}{2} + \frac{12t}{n^3} + \frac{90t}{n^2} + \\ & \frac{229t}{n} + 47nt + \frac{5n^2t}{2} - \frac{651t^2}{4} - \frac{6t^2}{n^3} - \frac{57t^2}{n^2} - \frac{333t^2}{2n} - \frac{51nt^2}{2} - \frac{n^2t^2}{2} + \frac{565t^3}{8} + \\ & \frac{t^3}{n^3} + \frac{31t^3}{2n^2} + \frac{243t^3}{4n} + 6nt^3 - \frac{141t^4}{8} - \frac{3t^4}{2n^2} - \frac{11t^4}{n} - \frac{nt^4}{2} + \frac{19t^5}{8} + \frac{3t^5}{4n} - \frac{t^6}{8} \end{aligned}$$

$$\text{Collect}[\text{aux}[n, t], n]$$

$$\begin{aligned} & -127 + \frac{443t}{2} - \frac{651t^2}{4} + \frac{565t^3}{8} - \frac{141t^4}{8} + \frac{19t^5}{8} - \frac{t^6}{8} + \\ & n^2 \left(-3 + \frac{5t}{2} - \frac{t^2}{2} \right) + \frac{-8+12t-6t^2+t^3}{n^3} + \frac{-52+90t-57t^2+\frac{31t^3}{2}-\frac{3t^4}{2}}{n^2} + \\ & n \left(-36+47t-\frac{51t^2}{2}+6t^3-\frac{t^4}{2} \right) + \frac{-126+229t-\frac{333t^2}{2}+\frac{243t^3}{4}-11t^4+\frac{3t^5}{4}}{n} \end{aligned}$$

```

a[t_] := -127 +  $\frac{443 t}{2}$  -  $\frac{651 t^2}{4}$  +  $\frac{565 t^3}{8}$  -  $\frac{141 t^4}{8}$  +  $\frac{19 t^5}{8}$  -  $\frac{t^6}{8}$ 
b[t_] := -8 + 12 t - 6 t^2 + t^3
c[t_] := -52 + 90 t - 57 t^2 +  $\frac{31 t^3}{2}$  -  $\frac{3 t^4}{2}$ 
d[t_] := -126 + 229 t -  $\frac{333 t^2}{2}$  +  $\frac{243 t^3}{4}$  - 11 t^4 +  $\frac{3 t^5}{4}$ 
e[t_] := -36 + 47 t -  $\frac{51 t^2}{2}$  + 6 t^3 -  $\frac{t^4}{2}$ 
f[t_] := -3 +  $\frac{5 t}{2}$  -  $\frac{t^2}{2}$ 
eps1[n_, t_] := a[t] n^3 + b[t] + c[t] n + d[t] n^2 + e[t] n^4 + f[t] n^5
eps1[9 + a + b, 5 + a] // Expand

-49788 -  $\frac{290871 a}{2}$  - 145224 a^2 -  $\frac{633101 a^3}{8}$  -  $\frac{109557 a^4}{4}$  -  $\frac{50371 a^5}{8}$  -  $\frac{1931 a^6}{2}$  -  $\frac{755 a^7}{8}$  -
 $\frac{21 a^8}{4}$  -  $\frac{a^9}{8}$  - 55917 b -  $\frac{204957 a b}{2}$  -  $\frac{308265 a^2 b}{4}$  -  $\frac{264643 a^3 b}{8}$  -  $\frac{73019 a^4 b}{8}$  -  $\frac{6585 a^5 b}{4}$  -
191 a^6 b -  $\frac{103 a^7 b}{8}$  -  $\frac{3 a^8 b}{8}$  - 17226 b^2 -  $\frac{49485 a b^2}{2}$  - 14658 a^2 b^2 -  $\frac{39083 a^3 b^2}{8}$  -  $\frac{2061 a^4 b^2}{2}$  -
 $\frac{539 a^5 b^2}{4}$  -  $\frac{21 a^6 b^2}{2}$  -  $\frac{3 a^7 b^2}{8}$  - 2273 b^3 -  $\frac{5401 a b^3}{2}$  -  $\frac{4981 a^2 b^3}{4}$  -  $\frac{2413 a^3 b^3}{8}$  -  $\frac{353 a^4 b^3}{8}$  -
 $\frac{27 a^5 b^3}{8}$  -  $\frac{a^6 b^3}{8}$  - 136 b^4 -  $\frac{271 a b^4}{2}$  -  $\frac{91 a^2 b^4}{2}$  -  $\frac{13 a^3 b^4}{2}$  -  $\frac{a^4 b^4}{2}$  - 3 b^5 -  $\frac{5 a b^5}{2}$  -  $\frac{a^2 b^5}{2}$ 
p[n + 2, n, 2] // Expand

16 - 4 n

p[n + 2 -  $\frac{1}{n}$ , n, 3] // Expand

38 +  $\frac{1}{n^3}$  +  $\frac{2}{n^2}$  -  $\frac{6}{n}$  - 3 n
f3[n_] := 38 n^3 + 1 + 2 n - 6 n^2 - 3 n^4
f3[13 + a] // Expand

-3184 - 7252 a - 1566 a^2 - 118 a^3 - 3 a^4

p[n + 2 -  $\frac{2}{n}$ , n, 4] // Expand

64 +  $\frac{8}{n^3}$  +  $\frac{16}{n^2}$  -  $\frac{24}{n}$  - 2 n
f4[n_] := 83 n^3 + 8 + 4 n - 34 n^2 - n^5
f4[9 + a] // Expand

-1252 - 13244 a - 5083 a^2 - 727 a^3 - 45 a^4 - a^5

```

item d).

```
p[n - 2, n, t] // Expand
p[t, n, t] // Expand

24 - 20 n + 4 n2 + 20 t - 8 n t + 4 t2
2 t2 - n t2 + t3

sigma1[n_, t_] := p[n - 2, n, t]
sigma2[n_, t_] := p[t, n, t]

sigma1[6 + a + b, 2 + a] // Expand
sigma2[6 + a + b, 2 + a] // Expand

8 + 12 b + 4 b2
-8 - 8 a - 2 a2 - 4 b - 4 a b - a2 b
```

A.2 Cálculos Realizados no Lema 3

Exit

phi[n_, t_] := t² n + 2 n² - 9 n t + 8 n - 2 t + 4

phi[8 + a + b, 4 + a] // Expand

28 + 10 a + 9 a² + a³ + 20 b + 3 a b + a² b + 2 b²

phi[n, 2] // Expand

phi[n, 3]

- 6 n + 2 n²

- 2 - 10 n + 2 n²

A.3 Cálculos Realizados no Lema 5

Exit

Definição da função $p(x,n,k)$, que determina, no Teorema 44(iii), o polinômio característico $p(x,n,k)$ da matriz reduzida de $H_{n,k}$.

$p[x_, n_, k_] := -(2 k^3 - 4 k^2 + 2 k) + (n k + n + 4 k^2 - 8 k) x - (3 k + n - 3) x^2 + x^3$

item a).

$p[0, n, k]$ // Expand
 $p[k-1, n, k]$ // Expand
 $-2 k + 4 k^2 - 2 k^3$
 $2 - 2 k^2 - 2 n + 2 k n$
 $\text{delta1}[n_, k_] := p[0, n, k]$
 $\text{delta2}[n_, k_] := p[k-1, n, k]$
 $\text{delta1}[5+a+b, 3+a]$ // Expand
 $\text{delta2}[5+a+b, 3+a]$ // Expand
 $-24 - 32 a - 14 a^2 - 2 a^3$
 $4 + 2 a + 4 b + 2 a b$

item b).

$p[k+1, n, k]$ // Expand
 $p[k, n, k]$ // Expand
 $4 - 4 k$
 $-2 k - k^2 + k n$
 $\text{delta3}[n_, k_] := p[k, n, k]$
 $\text{delta3}[5+a+b, 3+a]$ // Expand
 $3 b + a b$

item c).

$p[k+2, n, k]$ // Expand
 $p[n+2k-4, n, k]$ // Expand
 $20 - 6 k + k^2 - 2 n - k n$
 $-16 + 30 k - 16 k^2 + 2 k^3 + 4 n - 6 k n + 2 k^2 n$

```

delta4[n_, k_] := p[k + 2, n, k]
delta5[n_, k_] := p[n + 2 k - 4, n, k]
delta4[5 + a + b, 3 + a] // Expand
delta5[5 + a + b, 3 + a] // Expand
- 14 - 10 a - 5 b - a b
4 + 22 a + 18 a^2 + 4 a^3 + 4 b + 6 a b + 2 a^2 b

```

item d).

```

p[n - 2, n, k] // Expand
4 + 2 k - 4 k^2 - 2 k^3 - 6 n + 2 k n + 4 k^2 n + 2 n^2 - 2 k n^2
delta6[n_, k_] := p[n - 2, n, k]
delta6[5 + a + b, 3 + a] // Expand
- 4 b - 2 a b - 4 b^2 - 2 a b^2

```
