

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Energia laplaciana sem sinal de grafos

por

Lucélia Kowalski Pinheiro

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Doutora em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Orientador

Porto Alegre, fevereiro de 2018.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Pinheiro, Lucélia Kowalski

Energia laplaciana sem sinal de grafos / Lucélia Kowalski Pinheiro.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2018.

104 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2018.

Orientador: Trevisan, Vilmar

Tese: Matemática Aplicada

Teoria espectral de grafos, Energia laplaciana sem sinal de grafos, Energia laplaciana de grafos, Grafos extremais

Energia laplaciana sem sinal de grafos

por

Lucélia Kowalski Pinheiro

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Doutora em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Matemática Discreta

Orientador: Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Banca examinadora:

Prof. Dr. Carlos Hoppen
PPGMAp-UFRGS

Prof. Dr. Eliseu Fritscher
CCUR-UFSC

Profa. Dra. Nair M. M. de Abreu
COPPE-UFRJ

Tese apresentada e aprovada em
23 de fevereiro de 2018.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

AGRADECIMENTO

Aos meus pais, Geni e Gilberto, por todo apoio, amor e dedicação dispensados para que eu alcançasse esse objetivo. Sem vocês com toda certeza não teria alcançado nem metade das minhas realizações.

Ao meu orientador, Vilmar Trevisan, por toda dedicação, eficiência e competência com que conduziu esse trabalho. Obrigada pelo esforço dispensado para que esse trabalho fosse desenvolvido da melhor forma possível.

À todos os meus amigos, pela amizade, apoio e, principalmente, pelos momentos de descontração durante os momentos difíceis. Em especial, às amigas Bruna e Débora, pelo apoio, risadas e carinho. Obrigada por terem sido meu suporte, principalmente nos últimos meses.

Aos membros da banca examinadora, pelas dicas e sugestões que engrandeceram esse trabalho.

À todos os professores que, de alguma forma, contribuíram com a minha formação acadêmica.

À CAPES e CNPq pelo apoio financeiro.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	ix
LISTA DE SÍMBOLOS	x
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii
1 INTRODUÇÃO	1
2 CONCEITOS BÁSICOS	11
2.1 Definições iniciais	11
2.2 Propriedades matriciais	16
2.3 As “energias” associadas a um mesmo grafo	24
2.4 Adicionando uma aresta a um grafo qualquer	28
3 GRAFOS UNICÍCLICOS	36
3.1 Nova cota superior para as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de grafos unicíclicos	36
3.2 Grafos unicíclicos com energias laplaciana e laplaciana sem sinal máximas	44
4 GRAFOS THRESHOLD	69
4.1 Definição e propriedades iniciais	70
4.2 A energia laplaciana sem sinal do grafo split completo	73
4.3 Algumas classes de grafos que satisfazem a conjectura	84
4.3.1 Árvores	88
4.3.2 Grafos c -cíclicos	89

5 CONCLUSÃO	92
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	97

Lista de Figuras

Figura 1.1	Grafos $H(n)$, com $n = 3a + i + 3$ vértices, $i = 0, 1$ e 2 , respectivamente	5
Figura 1.2	Grafo split completo com 9 vértices	8
Figura 1.3	Caterpillar regular com caminho de tamanho 3 adicionada a aresta e	10
Figura 2.1	Grafo do Exemplo 2.1	12
Figura 2.2	Grafos P_5 e C_4	13
Figura 2.3	Grafo 3-regular	14
Figura 2.4	Grafo K_5	14
Figura 2.5	Floresta com 3 árvores	15
Figura 2.6	Grafos S_7 e S'_7	15
Figura 2.7	Grafo split com clique de 5 vértices e conjunto independente de 5 vértices	16
Figura 2.8	Grafo split completo com clique de 4 vértices e conjunto independente de 3 vértices	17
Figura 2.9	Grafos G e $G + e$	30
Figura 2.10	<i>Caterpillar</i> $C(d, r)$	31
Figura 2.11	Grafo $C(3, r) + e$	33
Figura 3.1	Possíveis árvores $T = G - e$, se $G \not\cong S'_n$	39
Figura 3.2	Grafos $H_i(a)$, com $n = 3a + i + 3$ vértices, $i=0, 1$ e 2	45
Figura 3.3	Grafo com 6 árvores pendentes	65
Figura 3.4	Grafo G com cintura $g = 7$ e 4 árvores pendentes	68
Figura 4.1	Grafo threshold com sequência $(a_i) = 110011$	71
Figura 4.2	Grafo $G(4)$	74
Figura 4.3	Gráfico da função $LE_1^+(k)$ com $n = 100$	78
Figura 4.4	Gráfico da função $LE_2^+(k)$ com $n = 100$	79

Figura 4.5	Comparando os valores $LE^+(G)$ e $LE^+(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$	84
Figura 4.6	Condições para verificar se $LE^+(G) \leq LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$	86

Lista de Tabelas

Tabela 3.1	Grafos unicíclicos com até 5 vértices e suas energias laplaciana e laplaciana sem sinal	37
Tabela 4.1	Parâmetros n , m e α^+ de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato	87
Tabela 4.2	Parâmetros n e m de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato	88
Tabela 4.3	Parâmetros n e c de grafos c -cíclicos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato	90
Tabela 4.4	Parâmetros c e n de grafos c -cíclicos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato	90

LISTA DE SÍMBOLOS

\overline{G}	grafo complementar de G
$d(v)$	grau do vértice v
\overline{d}	média dos graus dos vértices
P_n	caminho de n vértices
C_n	ciclo de n vértices
$d(G)$	diâmetro de G
$\mathbf{0}$	grafo nulo
K_n	grafo completo de n vértices
S_n	estrela de n vértices
S'_n	estrela de n vértices com mais uma aresta
g	cintura de um grafo
$A(G)$	matriz de adjacência de G
$D(G)$	matriz diagonal dos graus dos vértices de G
$L(G)$	matriz laplaciana de G
$L^+(G)$	matriz laplaciana sem sinal de G
I_n	matriz identidade de ordem n
$\lambda_i(G)$	i -ésimo maior autovalor de G
$\mu_i(G)$	i -ésimo maior autovalor laplaciano de G
$q_i(G)$	i -ésimo maior autovalor laplaciano sem sinal de G

$m_G(I)$	número de autovalores laplacianos de G no intervalo I
$m_{G_Q}(I)$	número de autovalores laplacianos sem sinal de G no intervalo I
$E(G)$	energia do grafo G
$LE(G)$	energia laplaciana do grafo G
$LE^+(G)$	energia laplaciana sem sinal do grafo G
$\sigma_i(B)$	valores singulares da matriz B
$\mathcal{E}(B)$	energia da matriz B
σ	número de autovalores laplacianos de G maiores ou iguais ao grau médio \bar{d}
σ^+	número de autovalores laplacianos sem sinal de G maiores ou iguais ao grau médio \bar{d}
α	número de autovalores laplacianos de G menores ou iguais ao grau médio \bar{d}
α^+	número de autovalores laplacianos sem sinal de G menores ou iguais ao grau médio \bar{d}

RESUMO

Neste trabalho, estudamos o problema de encontrar grafos extremais com relação à energia laplaciana sem sinal. Mais especificamente, procuramos grafos com a maior energia laplaciana sem sinal em determinadas classes. Nesse sentido, conjecturamos que o grafo unicíclico conexo com a maior energia laplaciana sem sinal é o grafo formado por um triângulo com vértices pendentes distribuídos balanceadamente e provamos parcialmente essa conjectura. Tal resultado foi provado também para a energia laplaciana.

Além disso, conjecturamos que o grafo com a maior energia laplaciana sem sinal dentre todos os grafos com n vértices é o grafo split completo com uma clique de $\lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ vértices e provamos tal conjectura para algumas classes de grafos, em particular, para árvores, grafos unicíclicos e bicíclicos.

Palavras-chave: *energia laplaciana sem sinal, grafos extremais, grafos unicíclicos, grafos split completos.*

ABSTRACT

In this work, we study the problem of finding extremal graphs with relation to the signless Laplacian energy. More specifically, we look for graphs with the largest signless Laplacian energy inside certain classes. In this sense, we conjecture that the connected unicyclic graph with the largest signless Laplacian energy is the graph consisting of a triangle with balanced distributed pendent vertices and we partially prove this conjecture. This result was also proved for the Laplacian energy.

Moreover we conjecture that the graph with the largest signless Laplacian energy among all graphs with n vertices is the complete split graph with a clique of $\lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ vertices and we prove this conjecture for some classes of graphs, in particular, for trees, for unicyclic and bicyclic graphs.

Keywords: *signless Laplacian energy, extremal graphs, unicyclic graphs, complete split graphs.*

1 INTRODUÇÃO

A Teoria Espectral de Grafos tem como principal objetivo determinar propriedades de um grafo através do espectro (conjunto de autovalores) de diferentes matrizes associadas a este grafo. A matriz mais utilizada para representar um grafo G cujo conjunto de vértices é $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ é a matriz de adjacência $A(G) = [a_{ij}]$. Esta é uma matriz quadrada de ordem n onde $a_{ij} = 1$, se existe um aresta ligando os vértices v_i e v_j e $a_{ij} = 0$, se não existe aresta ligando os vértices v_i e v_j .

O início da Teoria Espectral de Grafos se deu por volta de 1931, tendo origem na área da Química Quântica, quando foram utilizados grafos para representar moléculas de hidrocarbonetos a fim de se determinar os níveis de energia de alguns elétrons associados a essa molécula através dos autovalores da matriz de adjacência do grafo associado. Mas foi somente no ano de 1971, na tese de Cvetković [11], que a Teoria Espectral de Grafos teve sua fundamentação na área matemática e desde então é uma área que vem despertando o interesse de pesquisadores por todo o mundo, o que é ilustrado pelo grande número de publicações, principalmente nos últimos anos.

Por sua origem mais aplicada, a matriz de adjacência foi, e ainda é, a matriz associada ao grafo mais estudada. À medida que a Teoria Espectral de Grafos foi sendo mais explorada, surgiram outros conceitos de matrizes associadas a grafos. Dentre elas também destacaremos nesse trabalho as matrizes laplaciana e laplaciana sem sinal: a *matriz laplaciana* de um grafo G com conjunto de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, denotada por $L(G) = [l_{ij}]$, é a matriz quadrada de ordem n onde l_{ii} é igual ao grau do vértice v_i e $l_{ij} = -a_{ij}$, se $i \neq j$; e a *matriz laplaciana sem sinal* de um grafo G , denotada por $L^+(G) = [s_{ij}]$, com conjunto de vértices

$V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ é a matriz quadrada de ordem n onde s_{ii} é igual ao grau do vértice v_i e $s_{ij} = a_{ij}$, se $i \neq j$ (aqui a_{ij} é a entrada ij da matriz de adjacência de G).

Quando associamos diferentes matrizes quadradas ao mesmo grafo, obtemos diferentes espectros, em que cada matriz associada ao grafo motiva a obtenção de diferentes resultados. Uma dificuldade que encontramos quando estamos tentando determinar propriedades estruturais do grafo através do seu espectro é a ocorrência de pares de grafos que possuem o mesmo espectro, mas não as mesmas características (não são isomorfos). Quando isso ocorre, dizemos que esses dois grafos são coespectrais.

A matriz laplaciana sem sinal começou a ser mais explorada nos últimos anos, pois acreditava-se que essa matriz poderia representar melhor as propriedades de um grafo através do seu espectro, uma vez que Cvetković e Simić em [10] mostraram que, para grafos com até 11 vértices, a matriz laplaciana sem sinal é a matriz com menor quantidade de pares de grafos coespectrais. Esse foi um dos motivos para estudarmos tal matriz em maior detalhe. No entanto, a título de curiosidade, mencionamos aqui os trabalhos de Carvalho et al. [7] e de Souza [49], onde os autores encontraram uma quantidade infinita de pares de grafos coespectrais com relação à matriz laplaciana sem sinal, dando indícios de que tal teoria a respeito dessa matriz pode não ser verdadeira.

Um dos conceitos mais conhecidos relacionados às características químicas de uma molécula é a energia total de elétrons π (um tipo de elétron associado à molécula). Conforme já citamos anteriormente, é possível representar uma molécula através de um grafo G e a energia total de elétrons π pode ser aproximada pela soma dos valores absolutos dos autovalores da matriz de adjacência do grafo G . Baseado neste conceito químico, em 1977, Gutman [25] introduziu o conceito matemático de energia de um grafo. A *energia de um grafo* G com n vértices é definida como

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

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são os autovalores da matriz de adjacência de G . Mais propriedades a respeito desse parâmetro podem ser encontradas em [2, 27, 40] e nas referências ali contidas. Como também falaremos de outras energias posteriormente, quando nos referirmos à energia $E(G)$, a chamaremos de energia usual do grafo G .

O cálculo da energia de um grafo depende da determinação do espectro da matriz de adjacência, o que se sabe não ser uma tarefa fácil, já que é necessário encontrar as raízes de um polinômio de grau n . Por isso, em geral, os trabalhos que tratam desse parâmetro consistem na procura por cotas superiores ou inferiores para a energia. Isso motiva a procura por grafos extremais envolvendo tal conceito.

Nesse sentido, um dos problemas clássicos envolvendo a energia é encontrar grafos extremais, isto é, determinar grafos que possuem a maior (ou menor) energia dentre todos os grafos com determinado número de vértices. O primeiro resultado desse tipo foi provado em 1977 por Gutman [25]. Ele provou, que dentre todas as árvores com n vértices, a estrela S_n tem a menor energia e o caminho P_n tem a maior energia. Após isso, uma grande quantidade de artigos com relação a extremalidade de grafos com relação à energia foi publicado, citamos por exemplo [6, 29, 35, 38, 39].

No entanto, o problema extremal ainda está em aberto quando estamos trabalhando com grafos quaisquer de n vértices. Caporossi et al. [6] provaram que o grafo que possui a menor energia dentre todos os grafos sem vértices isolados com n vértices é a estrela S_n . Em particular, isso resolve o problema para grafos conexos com n vértices. O problema de determinar o grafo com a maior energia dentre todos os grafos com n vértices ainda continua sem solução.

Baseado no conceito de energia usual de um grafo, surgiram outros tipos de energias de grafos utilizando espectros de outras matrizes associadas a grafos. Dentre essas outras energias, destacamos aqui as que estudamos durante a realização desse trabalho: a energia laplaciana e a energia laplaciana sem sinal.

Foi somente no ano de 2006 que Gutman e Zhou [31] estabeleceram um conceito de energia envolvendo os autovalores laplacianos de um grafo, inspirados na definição de energia usual. A *energia laplaciana* de um grafo G de ordem n com m arestas é definida como

$$LE(G) = \sum_{i=1}^n \left| \mu_i - \frac{2m}{n} \right|, \quad (1.1)$$

onde $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ são os autovalores laplacianos de G . Maiores detalhes a respeito dessa energia podem ser encontrados em [15, 31, 47, 54] e nas referências ali contidas.

Também para essa energia o problema de encontrar grafos extremais tem recebido grande atenção. Em [22], Fritscher et al. provaram que a estrela com n vértices é a árvore de energia laplaciana máxima. Para se ter uma ideia da dificuldade do problema extremal, mesmo para as árvores ainda não se conseguiu provar a conjectura estabelecida por Radenković e Gutman, em [46], de que o caminho com n vértices é a árvore com menor energia laplaciana.

Para a energia laplaciana, ainda podemos destacar o estudo do problema extremal na classe de grafos threshold. Em [5], Brualdi et al. conjecturaram que um tipo especial de grafo abacaxi com n vértices tem energia laplaciana máxima dentre todos os grafos conexos de mesma ordem n . Essa conjectura continua em aberto, mas muito trabalho já foi desenvolvido nesse sentido, onde destacamos as referências [12, 32, 33, 52].

Em nosso trabalho, contribuimos no problema extremal da energia laplaciana para os grafos unicíclicos. Em um primeiro momento, por meio de experimentos realizados, formulamos a conjectura de que o grafo conexo unicíclico com n vértices, $n \geq 11$, com energia laplaciana máxima é o grafo $H(n)$, formado por um triângulo juntamente com $n - 3$ vértices pendentos distribuídos balanceadamente entre os três vértices do triângulo (Figura 1.1).

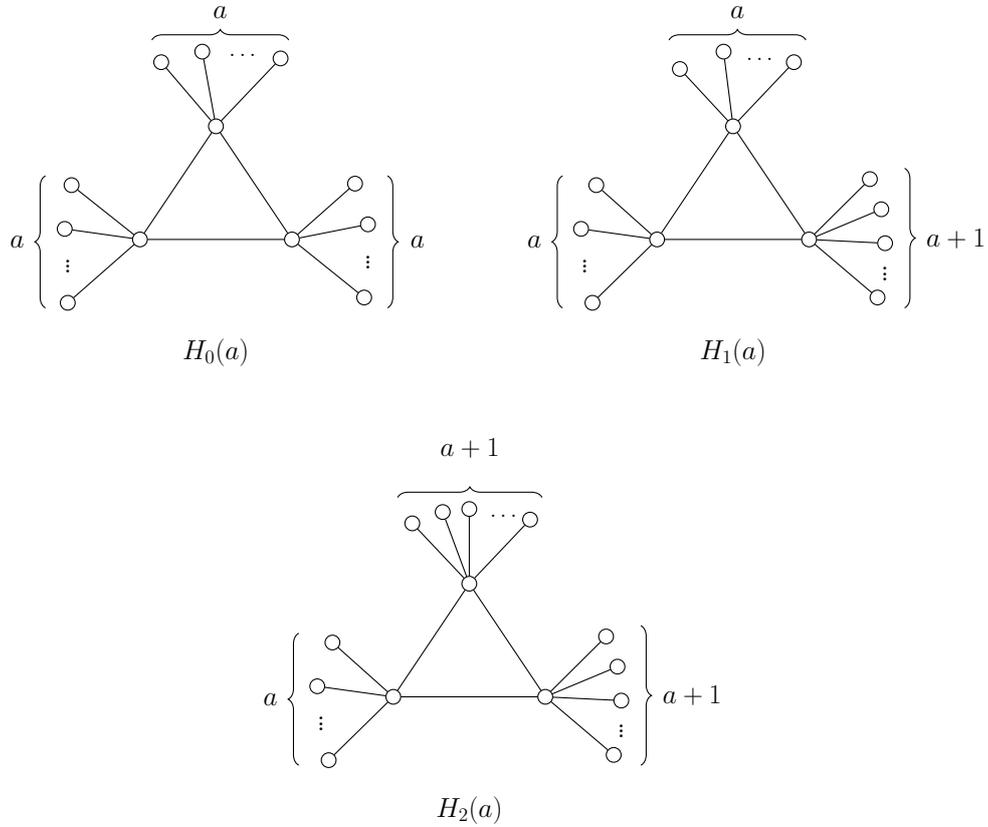


Figura 1.1: Grafos $H(n)$, com $n = 3a + i + 3$ vértices, $i = 0, 1$ e 2 , respectivamente

Neste trabalho provamos esta conjectura para uma grande quantidade de casos. De fato, denotando por σ o número de autovalores laplacianos maiores ou iguais ao grau médio, provamos o seguinte resultado.

Teorema 1.1. *Seja G um grafo conexo unicíclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana maior do que a energia laplaciana de G .*

No intuito de provar tal resultado estabelecemos a seguinte cota superior para a energia laplaciana de grafos unicíclicos.

Teorema 1.2. *Sejam G um grafo unicíclico de ordem $n \geq 4$ e σ o número de autovalores laplacianos de G maiores ou iguais a 2 . Então*

$$LE(G) \leq 2n - \frac{4\sigma}{n}, \quad (1.2)$$

com igualdade se, e somente se, G é o grafo obtido a partir da estrela de 4 vértices com uma aresta extra.

Esses dois últimos resultados que estabelecemos acerca da energia laplaciana de grafos foram consequência de resultados análogos que estabelecemos para a energia laplaciana sem sinal, que é a principal contribuição de nosso trabalho. A energia laplaciana sem sinal é um conceito de energia que envolve os autovalores da matriz laplaciana sem sinal e surgiu a partir da energia laplaciana. Se G é um grafo com n vértices e m arestas, a *energia laplaciana sem sinal* de G é definida como

$$LE^+(G) = \sum_{i=1}^n \left| q_i - \frac{2m}{n} \right|, \quad (1.3)$$

onde $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ são os autovalores da matriz laplaciana sem sinal de G .

A energia laplaciana sem sinal é um conceito relativamente recente, definido pela primeira vez por Gutman et al. [30], em 2010. Essa é uma das razões para que o número de referências neste assunto seja pequeno. De fato, pela nossa pesquisa bibliográfica, praticamente todo o trabalho existente nesse assunto pode ser encontrado em [1, 16, 17, 18, 30]. Abreu et al. [1] e Das e Mojallal [16] estabeleceram cotas envolvendo as três energias: usual, laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo G . Além disso, em [1] os autores também estabeleceram algumas cotas para $LE^+(G)$ envolvendo o número de vértices e de arestas de G . Já Das e Mojallal [17], Das et al. [18] e Gutman et al. [30] relacionam a energia laplaciana sem sinal de um grafo G com a energia usual do grafo linha de G .

Grande parte dos resultados estabelecidos nas referências citadas acima não exploram a fundo a energia laplaciana sem sinal, uma vez que são resultados análogos aos existentes para a energia laplaciana cujas demonstrações são obtidas por meras adaptações ou, no caso dos resultados envolvendo o grafo linha de G , são obtidos de maneira mais direta por existir uma conhecida relação envolvendo as matrizes de incidência e laplaciana sem sinal do grafo G . Além disso, para grafos

bipartidos, o espectro da matriz laplaciana sem sinal coincide com o espectro da matriz laplaciana, e portanto resultados já conhecidos para a energia laplaciana desses grafos também valem para a energia laplaciana sem sinal.

Por esses motivos, foi no presente trabalho que a energia laplaciana sem sinal começou a ser explorada de forma mais aprofundada. Especialmente com relação a extremalidade de grafos envolvendo tal parâmetro, problema já clássico quando falamos nas energias usual e laplaciana, pretendemos formular tal problema para a energia laplaciana sem sinal.

Para grafos unicíclicos, os resultados obtidos para a energia laplaciana também foram estabelecidos de modo análogo para a energia laplaciana sem sinal. Na verdade, a primeira conjectura que estabelecemos foi a de que o grafo conexo unicíclico com n vértices, $n \geq 10$, com energia laplaciana sem sinal máxima é o grafo $H(n)$, mesmo grafo da Figura 1.1 para o caso da energia laplaciana.

De modo completamente análogo ao caso da energia laplaciana provamos a conjectura para uma grande quantidade de casos. Denotando por σ^+ o número de autovalores da matriz laplaciana sem sinal maiores ou iguais ao grau médio, provamos o seguinte resultado.

Teorema 1.3. *Seja G um grafo conexo unicíclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma^+ \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que a energia laplaciana sem sinal de G .*

Também foi obtida uma cota superior para a energia laplaciana sem sinal de grafos unicíclicos, análoga a cota do Teorema 1.2.

Teorema 1.4. *Sejam G um grafo unicíclico conexo de ordem n e σ^+ o número de autovalores laplacianos sem sinal de G maiores ou iguais a 2. Então*

$$LE^+(G) \leq 2n - \frac{4\sigma^+}{n}. \quad (1.4)$$

Os Teoremas 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4 foram obtidos em parceria com os professores Eliseu Fritscher, Kinkar Das e com o orientador do presente trabalho e fazem parte da publicação [13].

No que diz respeito a grafos quaisquer com n vértices, estabelecemos a seguinte conjectura a respeito do grafo que tem a maior energia laplaciana sem sinal.

Conjectura 1.5. *O grafo com n vértices que tem a maior energia laplaciana sem sinal é um grafo split completo com conjunto independente de $\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ vértices e com clique de $\lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ vértices.*

Lembrando que um grafo é dito *split* se o seu conjunto de vértices pode ser particionado em dois conjuntos, um conjunto independente e uma clique. E é dito *split completo* se, além de ser split, qualquer vértice do conjunto independente é adjacente a todos os vértices da clique. A Figura 1.2 mostra um grafo split completo com 9 vértices e conjunto independente com 6 vértices.

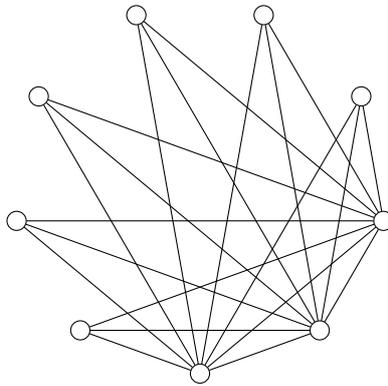


Figura 1.2: Grafo split completo com 9 vértices

Observamos que o grafo split completo está contido na classe de grafos threshold, que também é a classe que contém o grafo extremal no caso da energia laplaciana.

Confirmamos esta conjectura computacionalmente para grafos threshold até 31 vértices. Além disso, provamos que, dentre todos os grafos split completos com n vértices, aquele cujo conjunto independente possui $\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ vértices e cuja clique possui $\lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ vértices é o que possui a maior energia laplaciana sem sinal.

Também estabelecemos condições sobre o número de vértices, número de arestas, número de autovalores menores ou iguais ao grau médio e número de ciclos de um grafo de modo que ele tenha energia laplaciana sem sinal menor que a energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Em particular, provamos que as árvores, os grafos unicíclicos e bicíclicos com n vértices têm energia laplaciana sem sinal menor que a energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Todos esses resultados acerca da Conjectura 1.5 fazem parte de nosso trabalho [45].

Um outro problema clássico envolvendo parâmetros espectrais de grafos é avaliar as possíveis mudanças que ocorrem quando uma aresta é adicionada ou removida do grafo. Esse é um problema comum quando tratamos do espectro das diferentes matrizes associadas a um grafo, onde existem os tão conhecidos resultados de entrelaçamento de autovalores. Com relação às energias usuais e laplaciana normalizada, podemos destacar os trabalhos de Allem et al. [3] e Day et al. [19], respectivamente, onde os autores estudam a relação existente entre as energias do grafo G e dos grafos $G + e$ ou $G - e$. Para a energia laplaciana sem sinal obtemos em nosso trabalho o seguinte resultado.

Teorema 1.6. *Sejam $G = (V, E)$ um grafo com n vértices e m arestas, $G \neq K_n$, e e uma aresta que não pertence a E . Então:*

$$|LE^+(G + e) - LE^+(G)| \leq 4 - \frac{4}{n}. \quad (1.5)$$

Essa cota é justa uma vez que existe um grafo que a satisfaz: o grafo nulo com n vértices. Além disso, mesmo no caso em que considerarmos grafos conexos, a cota não pode ser melhorada, uma vez que existe pelo menos um grafo G que satisfaz a cota assintoticamente, isto é, dado qualquer $\epsilon > 0$ sempre existe um

valor de n (número de vértices do grafo G) para o qual $|LE^+(G + e) - LE^+(G)| > 4 - \epsilon$. O grafo caterpillar regular de n vértices com um caminho de tamanho 3, onde a aresta e é adicionada ligando os dois vértices terminais do caminho (veja Figura 1.3) é um grafo que possui essa propriedade.

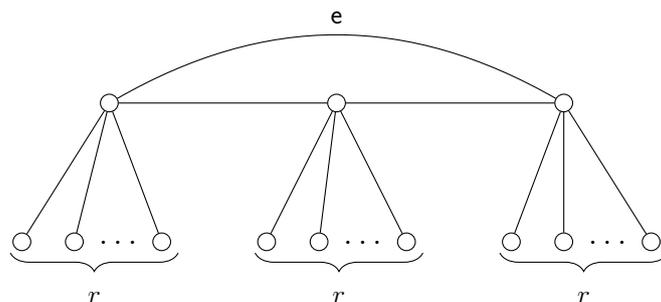


Figura 1.3: Caterpillar regular com caminho de tamanho 3 adicionada a aresta e

Este trabalho está estruturado da seguinte maneira. No Capítulo 2, apresentamos algumas definições e resultados gerais de grafos e de propriedades espectrais. Além disso, na última seção apresentamos a demonstração do Teorema 1.6. No Capítulo 3, apresentamos os resultados extremos acerca dos grafos unicyclicos, provando em particular, os Teoremas 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4.

O Capítulo 4 é dedicado ao estudo dos grafos threshold. Vemos inicialmente definições e resultados gerais envolvendo os grafos threshold e, posteriormente, provamos a Conjectura 1.5 para o caso particular em que somente os grafos split completos estão sendo levados em consideração. Ao final do capítulo apresentamos os resultados que provam a conjectura para outras classes de grafos, como as árvores, os grafos unicyclicos e bicyclicos.

2 CONCEITOS BÁSICOS

Neste capítulo, faremos um apanhado de definições e resultados iniciais da Teoria Espectral de Grafos que serão utilizados no decorrer deste trabalho. Posteriormente, introduzimos os conceitos de energia usual, energia laplaciana e energia laplaciana sem sinal de um grafo qualquer, bem como veremos propriedades gerais envolvendo tais energias. Na última seção, apresentamos o problema da adição de uma aresta a um grafo qualquer sob o ponto de vista da energia laplaciana sem sinal. Tais resultados e definições foram (salvo menção contrária) retirados de [2, 4, 34, 40].

2.1 Definições iniciais

Um *grafo* é um par ordenado $G = (V, E)$, onde V é um conjunto finito e E é um subconjunto de pares não ordenados de elementos de V . Os elementos de V são chamados de *vértices* e os elementos de E são chamados de *arestas*. Indicaremos por $|V|$ e $|E|$, respectivamente, o número de vértices e o número de arestas de G . Quando $|V| = n$, dizemos que o grafo G é de ordem n .

Se $u, v \in V$ e $e = \{u, v\} \in E$, dizemos que os vértices u e v são *adjacentes* ou *vizinhos* e a aresta e é *incidente* em u e v .

Neste trabalho trataremos somente de *grafos simples*, que são grafos que não contêm laços (arestas que ligam um vértice a ele mesmo), sem arestas múltiplas (mais de uma aresta incidindo no mesmo par de vértices) e sem orientação.

Exemplo 2.1. Na Figura 2.1, está representado um grafo com conjunto de vértices $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6\}$ e conjunto de arestas $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7\}$. As arestas deste grafo são $e_1 = \{v_1, v_4\}$, $e_2 = \{v_1, v_2\}$, $e_3 = \{v_4, v_2\}$, $e_4 = \{v_4, v_5\}$, $e_5 = \{v_2, v_5\}$, $e_6 = \{v_2, v_3\}$ e $e_7 = \{v_3, v_6\}$. Por exemplo, os vértices v_4 e v_5 são adjacentes, mas v_3 e v_4 não são adjacentes.

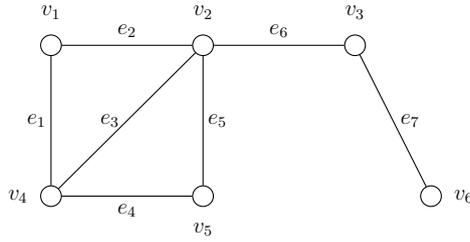


Figura 2.1: Grafo do Exemplo 2.1

Dado um grafo $G = (V, E)$, dizemos que $G' = (V', E')$ é um *subgrafo* de G se $V' \subseteq V$ e $E' \subseteq E$. Neste caso, escrevemos $G' \subset G$. Dizemos que G' é um *subgrafo induzido* de G se G' é subgrafo de G e é tal que dois vértices são adjacentes em G' se, e somente se, eles são adjacentes em G .

Definimos o *grafo complementar* de $G = (V, E)$ como o grafo $\bar{G} = (V, \bar{E})$, onde a aresta $\{u, v\}$ pertence a \bar{E} se, e somente se, $\{u, v\}$ não pertence a E .

Um vértice é dito *isolado* se ele não é adjacente a nenhum dos outros vértices de G e é dito *dominante* se ele é adjacente a todos os outros vértices de G . Dizemos que um conjunto de vértices é *independente* se quaisquer dois vértices do conjunto não são adjacentes entre si.

Um grafo formado por n vértices isolados é chamado de *grafo nulo* e é denotado por $\mathbf{0}$.

Definimos o *grau* de um vértice $v \in V$ como o número de arestas que incidem em v . Em geral, denotamos o grau de v por $d(v)$. No caso em que houver alguma ordenação nos vértices, escreveremos d_i para denotar o grau do i -ésimo vértice.

Os graus dos vértices de um grafo G estão relacionados com o número de arestas de G da seguinte forma.

Proposição 2.2. Dado um grafo $G = (V, E)$, vale a seguinte relação

$$\sum_{v \in V} d(v) = 2|E|. \quad (2.1)$$

Um vértice de grau 1 é chamado de *vértice pendente*. Um vértice adjacente a um vértice pendente é chamado de *vértice quase-pendente*. A aresta incidente a um vértice pendente é chamada de *aresta pendente*.

Definimos o *grau médio* \bar{d} do grafo G de ordem n como

$$\bar{d} = \frac{1}{n} \sum_{v \in V} d(v). \quad (2.2)$$

Pela proposição anterior, se $|E| = m$ temos que $\bar{d} = \frac{2m}{n}$.

Dado um grafo $G = (V, E)$, um *passeio* de comprimento k entre dois vértices u e v é uma sequência finita de vértices v_0, v_1, \dots, v_k em V , onde $v_0 = u$, $v_k = v$ e $\{v_{i-1}, v_i\} \in E$, para todo $i \in \{1, \dots, k\}$. Note que pode haver repetição de vértices na sequência. Um passeio entre u e v é dito *fechado* se $u = v$.

Um *caminho* entre u e v é um passeio entre u e v sem repetição de vértices. Denotaremos por P_n o caminho com n vértices. Um *ciclo* é um caminho fechado, ou seja, é um caminho para o qual $u = v$. Denotaremos por C_n o ciclo com n vértices. O *comprimento* de um passeio, de um caminho ou de um ciclo é o número de arestas que ocorrem em cada um deles. A Figura 2.2 mostra um caminho P_5 e um ciclo C_4 .

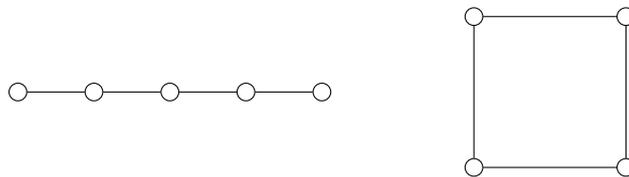


Figura 2.2: Grafos P_5 e C_4

Um grafo é dito *conexo* se existe um caminho ligando quaisquer dois vértices em G . Caso contrário, o grafo é dito *desconexo*. Em um grafo desconexo

G , dizemos que G' é uma *componente conexa* de G se G' é conexo e é um subgrafo maximal de G com essa propriedade, isto é, não existe um subgrafo conexo H de G tal que $G' \subset H$ e $G' \neq H$.

Se $G = (V, E)$ é um grafo conexo e $u, v \in V$, definimos a *distância de u a v* , denotada por $d(u, v)$, como o comprimento do menor caminho que liga u a v . A maior distância entre dois vértices quaisquer de G é chamada de *diâmetro* de G e é denotada por $d(G)$. Quando G é desconexo, definimos $d(G) = \infty$.

Dizemos que um grafo é *k -regular*, ou regular de grau k , se todos os seus vértices possuem o mesmo grau k . A Figura 2.3 mostra um grafo 3-regular.

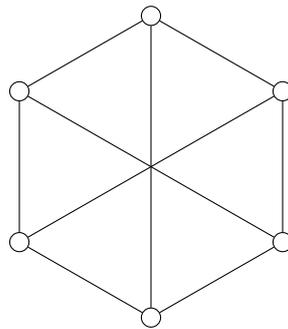


Figura 2.3: Grafo 3-regular

Um grafo é dito *completo* se quaisquer dois vértices distintos são adjacentes. O grafo completo com n vértices é $(n - 1)$ -regular e será denotado por K_n . Na Figura 2.4, temos o grafo K_5 .

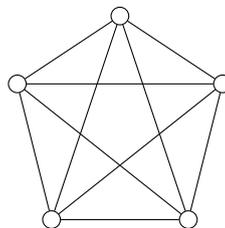


Figura 2.4: Grafo K_5

Uma *clique* de um grafo G é um subgrafo completo de G , ou seja, é um subgrafo de G no qual todos os vértices são dois a dois adjacentes.

Uma *árvore* é um grafo conexo e sem ciclos. Um grafo em que todas as componentes conexas são árvores é chamado de *floresta*. A Figura 2.5 mostra uma floresta com 3 árvores. Em uma árvore, um vértice pendente é chamado de *folha*. Note que o caminho P_n é também uma árvore.

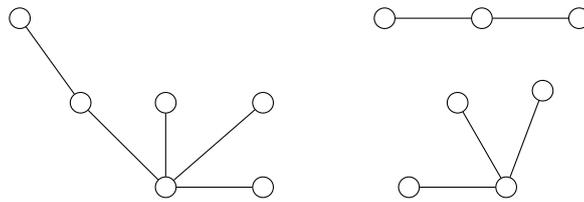


Figura 2.5: Floresta com 3 árvores

É possível determinar precisamente o número de arestas de uma árvore.

Proposição 2.3. *Um grafo conexo com n vértices é uma árvore se, e somente se, possui $n - 1$ arestas.*

Uma *estrela* S_n é uma árvore com n vértices, onde existe um vértice que é adjacente a todos os outros $n - 1$ vértices, estes últimos não sendo adjacentes entre si. Denotaremos por S'_n o grafo obtido pela adição de uma aresta à estrela S_n (Veja Figura 2.6).

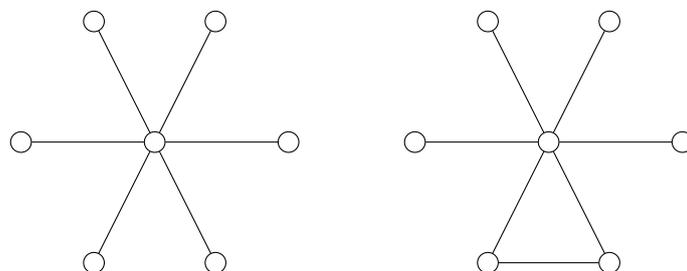


Figura 2.6: Grafos S_7 e S'_7

Um grafo com n vértices é chamado de *unicíclico* se é um grafo conexo que possui exatamente n arestas. Generalizando tal conceito, dizemos que um grafo conexo G com n vértices é *c-cíclico* se G possui exatamente $n + c - 1$ arestas, com $c > 0$.

A *cintura* g de um grafo G é o comprimento do menor ciclo contido em G . Se G não contém nenhum ciclo, definimos $g = \infty$.

Um grafo $G = (V, E)$ é chamado de *bipartido* se existe uma partição do conjunto dos vértices V em dois subconjuntos não-vazios e disjuntos V_1 e V_2 de modo que todas as arestas de G são da forma $\{u, v\}$ onde $u \in V_1$ e $v \in V_2$. Portanto, não existem vértices adjacentes em V_1 nem em V_2 . Por exemplo, as árvores são grafos bipartidos.

Um grafo G é chamado de *split* se o conjunto dos vértices de G pode ser particionado em uma clique e um conjunto independente.

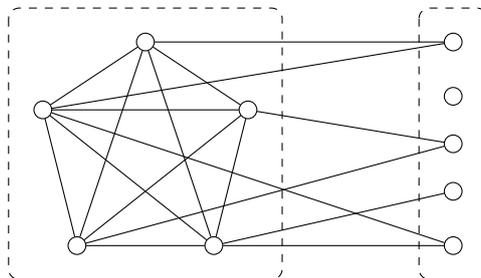


Figura 2.7: Grafo split com clique de 5 vértices e conjunto independente de 5 vértices

Um grafo G é dito *split completo* se, além de ser um grafo split, todos os vértices do conjunto independente são adjacentes a todos os vértices da clique.

2.2 Propriedades matriciais

Podemos associar diversas matrizes a um mesmo grafo. Vejamos agora algumas delas.

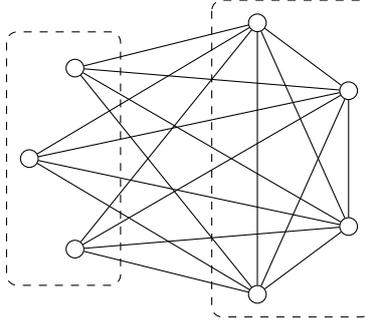


Figura 2.8: Grafo split completo com clique de 4 vértices e conjunto independente de 3 vértices

Seja $G = (V, E)$ um grafo com conjunto de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. A *matriz de adjacência* $A(G)$ de G é definida como a matriz quadrada de ordem n cujas entradas são

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Seja $D(G)$ a matriz diagonal que contém os graus dos vértices do grafo G , ou seja, cada entrada d_{ii} da matriz $D(G)$ é dada por $d_{ii} = d_i$ e $d_{ij} = 0$, se $i \neq j$. A *matriz laplaciana* $L(G)$ do grafo G é definida como

$$L(G) = D(G) - A(G). \quad (2.4)$$

Definimos a *matriz laplaciana sem sinal* $L^+(G)$ do grafo G como

$$L^+(G) = D(G) + A(G). \quad (2.5)$$

Para simplificar a notação, sempre que estiver claro no contexto o grafo que estamos trabalhando, omitiremos o símbolo (G) .

Seja I_n a matriz identidade de ordem n . Para cada matriz quadrada C associada a um grafo G , podemos calcular o seu polinômio característico bem como seus autovalores. Dado um grafo G , o polinômio

$$p_C(\lambda) = \det(\lambda I - C) \quad (2.6)$$

é chamado de *polinômio característico de G associado a C* . O espectro da matriz de adjacência $A(G)$ de G é chamado somente de espectro de G .

O espectro de uma matriz qualquer B de ordem n será representado através de um conjunto da forma $\{x_1^{(k_1)}, x_2^{(k_2)}, \dots, x_j^{(k_j)}\}$, onde $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, $\sum_{i=1}^j k_i = n$ e $k_i \in \{1, \dots, n\}$ denota a multiplicidade do autovalor x_i , para cada $1 \leq i \leq j$.

Note que as três matrizes definidas anteriormente são simétricas com entradas reais e, portanto, todos os seus autovalores são reais ([34]).

O polinômio característico de G associado a qualquer uma das matrizes A, L ou L^+ é unicamente determinado. Isso decorre do fato de que mesmo que as matrizes dependam da ordenação dos vértices, duas matrizes associadas ao mesmo grafo com numeração diferente dos vértices são semelhantes e, portanto, possuem o mesmo polinômio característico. Como consequência, o espectro de cada uma dessas matrizes também é único.

Dado um grafo G com n vértices, usaremos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ para denotar o espectro de G , $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ para denotar o espectro da matriz laplaciana $L(G)$ e q_1, q_2, \dots, q_n para denotar o espectro da matriz $L^+(G)$. Além disso, também chamaremos $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de autovalores laplacianos de G e q_1, q_2, \dots, q_n de autovalores laplacianos sem sinal de G . Veremos agora algumas propriedades associadas a esses espectros.

Uma vez que a soma das raízes de um polinômio característico é igual ao traço da matriz, como consequência da Proposição 2.2 obtemos o seguinte resultado.

Proposição 2.4. [2] *Seja G um grafo com n vértices e m arestas. Valem as seguintes igualdades*

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0 \tag{2.7}$$

e

$$\sum_{i=1}^n \mu_i = \sum_{i=1}^n q_i = 2m. \quad (2.8)$$

As matrizes L e L^+ são matrizes positivas semidefinidas e, portanto todos os seus autovalores são não negativos. Podemos, portanto, escrever $0 \leq \mu_n \leq \mu_{n-1} \leq \dots \leq \mu_1$ e $0 \leq q_n \leq q_{n-1} \leq \dots \leq q_1$.

Note que $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$ é autovetor de L com autovalor associado igual a 0, uma vez que a soma dos elementos de uma linha qualquer de L é zero. O próximo resultado, cuja demonstração pode ser encontrada em [2], apresenta essa propriedade, além de outras que são válidas para autovalores laplacianos de G .

Proposição 2.5. *Se G é um grafo com autovalores laplacianos $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$, então*

- (i) $\mu_n = 0$ com autovetor associado $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T$;
- (ii) G é conexo se, e somente se, $\mu_{n-1} > 0$;
- (iii) a multiplicidade do autovalor 0 é igual ao número de componentes conexas de G ;
- (iv) se G é regular de grau k , então $\mu_i = k - \lambda_{n-i+1}$, onde λ_i é autovalor da matriz de adjacência de G .

Para grafos bipartidos é possível associar o espectro laplaciano com o espectro laplaciano sem sinal.

Proposição 2.6. [2] *Se G é um grafo bipartido, o espectro laplaciano sem sinal é igual ao espectro laplaciano de G , ou seja, $q_i = \mu_i$, para $1 \leq i \leq n$.*

A demonstração da proposição a seguir pode ser encontrada em [9].

Proposição 2.7. *Se G é um grafo com autovalores laplacianos sem sinal $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$, então*

- (i) *se G é conexo, $q_n = 0$ se, e somente se, o grafo é bipartido;*
- (ii) *a multiplicidade do 0 como autovalor laplaciano sem sinal é igual ao número de componentes bipartidas de G .*
- (iii) *se G é um grafo k -regular, então $q_i = k + \lambda_i = 2k - \mu_{n-i+1}$, onde λ_i é autovalor da matriz de adjacência de G e μ_i é autovalor da matriz laplaciana de G .*

Uma propriedade que tanto o espectro laplaciano quanto o espectro laplaciano sem sinal possuem é a do entrelaçamento entre os autovalores de um grafo G e do grafo $G + e$, que é o grafo obtido de G pela adição de uma aresta e . Os resultados podem ser encontrados em [51].

Teorema 2.8. *Sejam G um grafo com n vértices, distinto de K_n , e $G + e$ o grafo obtido de G pela adição de uma aresta e . Então valem*

$$\mu_i(G) \geq \mu_{i+1}(G + e) \geq \mu_{i+1}(G), \quad i = 1, 2, \dots, n - 1$$

e

$$q_i(G) \geq q_{i+1}(G + e) \geq q_{i+1}(G), \quad i = 1, 2, \dots, n - 1.$$

Mais geralmente, se H é um subgrafo de G , então o i -ésimo autovalor laplaciano (sem sinal) de H não é maior do que o i -ésimo autovalor laplaciano (sem sinal) de G , conforme descrito no próximo resultado.

Teorema 2.9. [4] *Sejam G um grafo e H um subgrafo de G com r vértices. Então, para $1 \leq i \leq r$,*

$$\mu_i(H) \leq \mu_i(G)$$

e

$$q_i(H) \leq q_i(G).$$

Para os autovalores da matriz de adjacência, obtemos algo um pouco mais restrito, pois neste caso exigimos que H seja um subgrafo induzido de G , mas em compensação obtemos um outro tipo de entrelaçamento entre os autovalores.

Teorema 2.10. *Sejam G um grafo e H um subgrafo induzido de G com r vértices. Então, para $1 \leq i \leq r$,*

$$\lambda_{n-r+i}(G) \leq \lambda_i(H) \leq \lambda_i(G).$$

Especificamente para o raio espectral da matriz de adjacência, temos o seguinte resultado.

Teorema 2.11. [44] *Sejam G um grafo conexo e H um subgrafo próprio de G . Então $\lambda_1(H) < \lambda_1(G)$.*

Usaremos $m_G(I)$ e $m_{G_{L^+}}(I)$ para denotar o número de autovalores laplacianos de G e o número de autovalores laplacianos sem sinal de G , respectivamente, no intervalo I , contando as respectivas multiplicidades. Pelo Teorema 2.9, podemos concluir que, se H é um subgrafo qualquer de G e I é um intervalo da forma $[a, \infty)$ ou (a, ∞) , $a \in \mathbb{R}_+$, então $m_H(I) \leq m_G(I)$ e $m_{H_{L^+}}(I) \leq m_{G_{L^+}}(I)$. Merris [42] obteve uma cota inferior para o valor de $m_G(2, \infty)$ para um grafo qualquer G em termos do comprimento do maior caminho contido em G . Da mesma forma, é possível obter uma cota inferior para $m_G[2, \infty)$.

Proposição 2.12. *Seja G um grafo conexo com n vértices. Se ℓ é o número de vértices do maior caminho contido em G , então $m_G[2, \infty)$ satisfaz*

$$m_G[2, \infty) \geq \left\lfloor \frac{\ell}{2} \right\rfloor. \quad (2.9)$$

Demonstração. Denote o maior caminho contido em G por P_ℓ . Os autovalores laplacianos de P_ℓ são dados por ([4])

$$\mu_i(P_\ell) = 2 - 2 \cos \left(\frac{i\pi}{\ell} \right),$$

para $i = 0, 1, \dots, \ell - 1$, donde é possível verificar que $m_{P_\ell}[2, \infty) = \lfloor \frac{\ell}{2} \rfloor$. Como P_ℓ é subgrafo de G obtemos que

$$m_G[2, \infty) \geq m_{P_\ell}[2, \infty) = \left\lfloor \frac{\ell}{2} \right\rfloor.$$

□

Essa mesma cota se aplica para o número de autovalores laplacianos sem sinal de G que estão no intervalo I , uma vez que, para caminhos, o espectro laplaciano sem sinal coincide com o espectro laplaciano.

Veremos agora uma técnica que pode ser útil para calcular alguns autovalores de uma matriz através dos autovalores de uma matriz de ordem menor. Seja B uma matriz real e simétrica de ordem n e suponha que as linhas e colunas de B são indexadas por $X = \{1, \dots, n\}$. Seja $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ uma partição de X , onde cada $|X_i| = n_i > 0$. Podemos particionar B de acordo com $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$, isto é,

$$B = \begin{bmatrix} B_{1,1} & \cdots & B_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{m,1} & \cdots & B_{m,m} \end{bmatrix},$$

onde $B_{i,j}$ denota a submatriz (bloco) de B formada pelas linhas em X_i e pelas colunas em X_j .

Se a soma das linhas de cada bloco $B_{i,j}$ é constante, dizemos que a partição $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ é uma *partição equilibrada (ou regular)* de B . O próximo resultado pode ser encontrado em [4].

Proposição 2.13. *Seja $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ uma partição equilibrada de B , onde cada bloco $B_{i,j}$ da matriz B tem soma das linhas constante e igual à c_{ij} . Se $C = (c_{ij})_{m \times m}$ então o espectro da matriz C está contido no espectro da matriz B , levando em conta as multiplicidades.*

O próximo resultado refere-se à multiplicidade dos autovalores laplacianos e laplacianos sem sinal associados ao número de vértices pendentes de um grafo. Ele pode ser encontrado em [24].

Proposição 2.14. *Seja G um grafo com p vértices pendentes adjacentes a q vértices quase-pendentes. Então, 1 é autovalor laplaciano e laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $p - q$.*

Note que, combinando os dois últimos resultados, temos boas ferramentas para o cálculo dos autovalores laplacianos e laplacianos sem sinal de grafos que possuem uma grande quantidade de vértices pendentes.

O próximo resultado, devido a Ky Fan, estabelece uma relação para a soma dos autovalores da soma de duas matrizes reais e simétricas. Aqui, se M é qualquer matriz real e simétrica de ordem n , então $\lambda_i(M)$ denota o i -ésimo maior autovalor de M .

Lema 2.15. [53] *Sejam A e B duas matrizes reais e simétricas de ordem n . Para cada $1 \leq k \leq n$, vale*

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i(A + B) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i(A) + \sum_{i=1}^k \lambda_i(B).$$

Considerando T uma árvore de ordem $n \geq 6$, podemos estabelecer uma cota superior para a soma dos k maiores autovalores laplacianos (sem sinal) de T impondo uma condição sobre o diâmetro de T .

Lema 2.16. [23] *Seja T uma árvore de ordem $n \geq 6$. Se o diâmetro de T satisfaz $d(T) \geq 4$, então*

$$S_k(T) = \sum_{i=1}^k \mu_i(T) < n - 2 + 2k - \frac{2k}{n}.$$

2.3 As “energias” associadas a um mesmo grafo

O primeiro conceito de energia envolvendo grafos surgiu no ano de 1977, quando Gutman [25] introduziu o conceito de energia de um grafo molecular. Esse conceito surgiu baseado em um tipo de energia relacionada às características químicas de uma molécula, a qual pode ser representada por um grafo. Posteriormente, essa definição foi estendida para grafos quaisquer por Gutman em [26] e, desde então inúmeras propriedades envolvendo tal conceito já foram estabelecidas, e as principais podem ser encontradas, por exemplo, em [27, 28, 40] e nas referências ali contidas.

Definição 2.17. *A energia de um grafo G de ordem n é definida como*

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|, \quad (2.10)$$

onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ são os autovalores de G .

Somente anos mais tarde, em 2006, Gutman e Zhou [31] estabeleceram um conceito de energia envolvendo os autovalores laplacianos de um grafo inspirados na definição de energia acima.

Definição 2.18. *A energia laplaciana de um grafo G de ordem n é definida como*

$$LE(G) = \sum_{i=1}^n |\mu_i - \bar{d}|, \quad (2.11)$$

onde $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$ são os autovalores laplacianos de G .

Desde então, pesquisadores da Teoria Espectral de Grafos tem trabalhado para estabelecer propriedades para $LE(G)$ como, por exemplo, encontrar cotas superiores ou inferiores para $LE(G)$, procurar por grafos que maximizam ou minimizam $LE(G)$, comparar esse valor com a energia usual de G ou com outras energias envolvendo o espectro de outras matrizes associadas a G . Além de [31], recomendamos [15, 47, 54] e as referências ali contidas para maiores detalhes sobre a energia laplaciana de um grafo.

Em analogia à energia laplaciana, em 2010 Gutman et al. [30] estabeleceram o conceito de energia laplaciana sem sinal de um grafo, a qual envolve os autovalores laplacianos sem sinal de G .

Definição 2.19. *A energia laplaciana sem sinal de um grafo G de ordem n é definida como*

$$LE^+(G) = \sum_{i=1}^n |q_i - \bar{d}|, \quad (2.12)$$

onde $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ são os autovalores laplacianos sem sinal de G .

Por ser um conceito mais recente, existem poucas referências sobre a energia laplaciana sem sinal, mas destacamos as seguintes [1, 16, 17].

Vale destacar aqui que o cálculo de qualquer uma das energias definidas acima depende da determinação dos espectros usual, laplaciano ou laplaciano sem sinal do grafo em questão, o que não é uma tarefa fácil. Assim, o estudo dessas energias por muitas vezes se volta para o cálculo de cotas superiores ou inferiores para o valor da energia, envolvendo, por exemplo, o número de vértices, o número de arestas ou outros parâmetros usuais do grafo.

Um dos problemas clássicos estudados em Teoria Espectral de Grafos consiste na busca por grafos extremais, o que em termos de energias se resume na busca por grafos com maior ou menor energia.

Pela Proposição 2.6, se G é um grafo bipartido, as energias laplaciana e laplaciana sem sinal são iguais. Portanto, todo o estudo envolvendo energia laplaciana de grafos bipartidos já realizado até o momento se aplica à energia laplaciana sem sinal. Além disso, também para grafos k -regulares, é possível estender para a energia laplaciana sem sinal todo o estudo já realizado para a energia laplaciana. Mais geralmente, se G é um grafo k -regular, podemos relacionar as três energias: usual, laplaciana e laplaciana sem sinal, conforme o resultado abaixo.

Proposição 2.20. [1] *Se G é um grafo k -regular, então $E(G) = LE(G) = LE^+(G)$.*

Seja B uma matriz de ordem $m \times n$ e posto r . Os *valores singulares* de B são definidos como as raízes quadradas dos autovalores da matriz $B^T B$, os quais denotaremos por $\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots, \sigma_r(B)$. Note que, se B é uma matriz real e simétrica, então os valores singulares de B são os valores absolutos dos autovalores de B .

O conceito de energia matricial, definido primeiramente por Nikiforov [43], é uma generalização da energia de grafos. Definimos a *energia de uma matriz* B de ordem $m \times n$ como

$$\mathcal{E}(B) = \sum_{i=1}^r \sigma_i(B). \quad (2.13)$$

Portanto, se B é uma matriz real e simétrica, $\mathcal{E}(B)$ é a soma dos módulos dos autovalores de B .

As energias definidas anteriormente podem ser escritas como $E(G) = \mathcal{E}(A(G))$, $LE(G) = \mathcal{E}(L(G) - \frac{2m}{n} I_n)$ e $LE^+(G) = \mathcal{E}(L^+(G) - \frac{2m}{n} I_n)$, onde I_n denota a matriz identidade de ordem n .

Lema 2.21. [20] *Sejam A e B matrizes de ordem $n \times n$. Então:*

$$\mathcal{E}(A + B) \leq \mathcal{E}(A) + \mathcal{E}(B). \quad (2.14)$$

Além disso, a igualdade ocorre se, e somente se, existe uma matriz ortogonal P tal que PA e PB são matrizes positivas semidefinidas.

Note que, a partir deste lema, obtemos a seguinte relação

$$|\mathcal{E}(A) - \mathcal{E}(B)| \leq \mathcal{E}(A - B). \quad (2.15)$$

Dado um grafo G , no decorrer do texto usaremos σ para representar o número de autovalores laplacianos de G maiores ou iguais ao grau médio \bar{d} , mais precisamente, σ é o maior inteiro para o qual $\mu_\sigma \geq \bar{d}$. Para diferenciar a notação, no caso da laplaciana sem sinal usaremos σ^+ para representar o número de autovalores

laplacianos sem sinal de G maiores ou iguais ao grau médio \bar{d} , mais precisamente, σ^+ é o maior inteiro para o qual $q_{\sigma^+} \geq \bar{d}$.

O principal motivo de se introduzir tais parâmetros é que eles são úteis para reescrever as energias laplaciana e laplaciana sem sinal. Podemos reescrever a energia laplaciana (laplaciana sem sinal) de um grafo G em termos somente dos autovalores laplacianos (laplacianos sem sinal) que são maiores ou iguais ao grau médio \bar{d} , ou em termos somente dos que são menores que \bar{d} . Desta forma, o cálculo da energia laplaciana (laplaciana sem sinal) se torna mais simples pois não é necessário calcular todos os autovalores laplacianos (laplacianos sem sinal) de G . O próximo resultado pode ser encontrado em [14], por exemplo.

Proposição 2.22. *Dado um grafo G de ordem n , as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de G podem ser expressas, respectivamente, por*

$$LE(G) = 2 \sum_{\mu_i \geq \bar{d}} \mu_i - 2\sigma\bar{d} \quad (2.16)$$

e

$$LE^+(G) = 2 \sum_{q_i \geq \bar{d}} q_i - 2\sigma^+\bar{d}. \quad (2.17)$$

Demonstração. Vamos separar o módulo presente na fórmula da energia laplaciana em duas parcelas, ambas positivas.

$$\begin{aligned} LE(G) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i - \bar{d}| \\ &= \sum_{\mu_i \geq \bar{d}} (\mu_i - \bar{d}) + \sum_{\mu_i < \bar{d}} (\bar{d} - \mu_i) \\ &= 2 \sum_{\mu_i \geq \bar{d}} (\mu_i - \bar{d}) + \sum_{i=1}^n (\bar{d} - \mu_i) \\ &= 2 \sum_{\mu_i \geq \bar{d}} \mu_i - 2\sigma\bar{d} + n\bar{d} - \sum_{i=1}^n \mu_i. \end{aligned}$$

Utilizando o fato de que $\bar{d} = \frac{2m}{n}$ e $\sum_{i=1}^n \mu_i = 2m$, obtemos o resultado desejado. Para a energia laplaciana sem sinal, a demonstração é exatamente a mesma. \square

Além disso, se usarmos α para representar o número de autovalores laplacianos de G menores ou iguais ao grau médio \bar{d} e α^+ para representar o número de autovalores laplacianos sem sinal de G menores ou iguais ao grau médio \bar{d} , podemos reescrever o resultado acima da seguinte forma.

Proposição 2.23. *Dado um grafo G de ordem n , as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de G podem ser expressas, respectivamente, por*

$$LE(G) = 2\alpha\bar{d} - 2 \sum_{\mu_i \leq \bar{d}} \mu_i \quad (2.18)$$

e

$$LE^+(G) = 2\alpha^+\bar{d} - 2 \sum_{q_i \leq \bar{d}} q_i. \quad (2.19)$$

2.4 Adicionando uma aresta a um grafo qualquer

Neste seção, veremos qual é o efeito que a adição de uma aresta em um grafo qualquer $G \neq K_n$ pode causar na energia laplaciana sem sinal de um grafo. Além disso, encontramos dois exemplos de grafos para os quais a cota é atingida.

O resultado a seguir apresenta uma cota para a diferença entre as energias laplacianas sem sinal do grafo $G \neq K_n$ e do grafo $G + e$, obtido a partir de G pela adição de uma aresta e .

Teorema 2.24. *Sejam $G = (V, E)$ um grafo com n vértices e m arestas, $G \neq K_n$, e e uma aresta que não pertence a E . Então:*

$$|LE^+(G + e) - LE^+(G)| \leq 4 - \frac{4}{n}. \quad (2.20)$$

Demonstração. Usaremos o fato de que $LE^+(G) = \mathcal{E} \left(L^+(G) - \frac{2m}{n} I_n \right)$ e $LE^+(G + e) = \mathcal{E} \left(L^+(G + e) - \frac{2(m+1)}{n} I_n \right)$, para então aplicarmos a desigualdade (2.15), ou

seja,

$$\begin{aligned}
|LE^+(G + \mathbf{e}) - LE^+(G)| &= \left| \mathcal{E} \left(L^+(G + \mathbf{e}) - \frac{2(m+1)}{n} I_n \right) - \mathcal{E} \left(L^+(G) - \frac{2m}{n} I_n \right) \right| \\
&\leq \mathcal{E} \left(L^+(G + \mathbf{e}) - \frac{2(m+1)}{n} I_n - L^+(G) + \frac{2m}{n} I_n \right) \\
&= \mathcal{E} \left(L^+(G + \mathbf{e}) - L^+(G) - \frac{2}{n} I_n \right).
\end{aligned}$$

Para estimar esse valor, teremos que encontrar os autovalores da matriz $L^+(G + \mathbf{e}) - L^+(G) - \frac{2}{n} I_n$. Suponhamos, sem perda de generalidade, que a aresta \mathbf{e} liga os dois primeiros vértices de G (que anteriormente não eram adjacentes), ou seja,

$$L^+(G + \mathbf{e}) - L^+(G) - \frac{2}{n} I_n = \begin{bmatrix} 1 - \frac{2}{n} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 - \frac{2}{n} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{n} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{n} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{2}{n} \end{bmatrix},$$

donde, o espectro de $L^+(G + \mathbf{e}) - L^+(G) - \frac{2}{n} I_n$ é $\left\{ \left(-\frac{2}{n}\right)^{(n-1)}, 2 - \frac{2}{n} \right\}$. Por fim, basta tomar o valor absoluto desses números e somá-los para obter a energia solicitada

$$\mathcal{E} \left(L^+(G + \mathbf{e}) - L^+(G) - \frac{2}{n} I_n \right) = \frac{2}{n}(n-1) + 2 - \frac{2}{n} = 4 - \frac{4}{n},$$

ou seja, $|LE^+(G + \mathbf{e}) - LE^+(G)| \leq 4 - \frac{4}{n}$. \square

Apresentamos a seguir um exemplo de grafo desconexo para o qual a igualdade acima é atingida, e um exemplo de grafo conexo no qual a igualdade é assintoticamente satisfeita, ou seja, para valores grandes de n , temos que o grafo considerado satisfaz $|LE^+(G + \mathbf{e}) - LE^+(G)| > 4 - \epsilon$, onde $\epsilon > 0$. Isso significa que a cota não pode ser melhorada, mesmo no caso em que considerarmos grafos conexos.

Exemplo 2.25. A Figura 2.9 ilustra um grafo G com n vértices isolados, e o grafo $G + e$, obtido a partir de G pela adição de uma aresta e . Claramente, todos os autovalores laplacianos sem sinal de G são nulos, donde $LE^+(G) = 0$. Além disso, o espectro laplaciano sem sinal de $G + e$ é $\{0^{(n-1)}, 2\}$, uma vez que

$$L^+(G + e) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Assim, a energia laplaciana sem sinal de $G + e$ é $LE^+(G + e) = 4 - \frac{4}{n}$. Portanto

$$|LE^+(G + e) - LE^+(G)| = \left| 4 - \frac{4}{n} - 0 \right| = 4 - \frac{4}{n}.$$



Figura 2.9: Grafos G e $G + e$

Exemplo 2.26. Uma caterpillar é uma árvore na qual a remoção dos vértices de grau 1 resulta em um caminho, ou seja, uma caterpillar é formada por um caminho juntamente com qualquer número de folhas pendentes adicionadas a cada um dos vértices do caminho. Seja P_d este caminho central formado por d vértices. Os $n - d$ vértices restantes são os vértices pendentes, que são adjacentes a algum dos d vértices do caminho. Uma caterpillar regular é uma caterpillar na qual todos os vértices do caminho P_d possuem o mesmo número r de vértices pendentes (veja a Figura 2.10). Denotaremos tais caterpillars por $C(d, r)$ e, neste caso, o número de vértices é $n = d(r + 1)$.

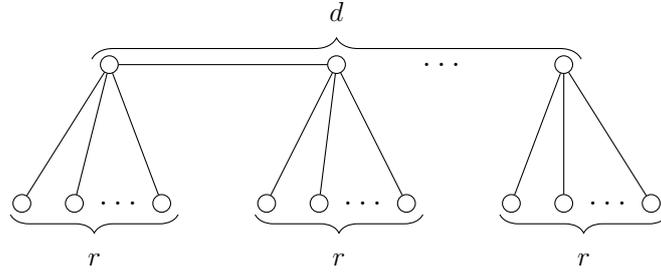


Figura 2.10: *Caterpillar* $C(d, r)$

Vamos considerar a *caterpillar* regular $C(3, r)$ com um caminho de tamanho 3. É possível calcular os autovalores laplacianos sem sinal de $C(3, r)$ utilizando as Proposições 2.13 e 2.14. De fato, pela Proposição 2.14, 1 é autovalor laplaciano sem sinal de $C(3, r)$ com multiplicidade $3r - 3$ e os outros autovalores laplacianos sem sinal de $C(3, r)$ podem ser obtidos pela Proposição 2.13 reduzindo a matriz

$$L^+(C(3, r)) = \begin{bmatrix} r+1 & 1 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & r+2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & r+1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

à seguinte matriz

$$B(C(3, r)) = \begin{bmatrix} r+1 & 1 & 0 & r & 0 & 0 \\ 1 & r+2 & 1 & 0 & r & 0 \\ 0 & 1 & r+1 & 0 & 0 & r \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

cujo espectro é $\left\{0, r+1, \frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2}, \frac{r+4 \pm \sqrt{r^2+8r+4}}{2}\right\}$. Como 1 não faz parte deste espectro, obtemos desta forma o espectro laplaciano sem sinal de $C(3, r)$ que é igual à

$$\left\{0, 1^{(3r-3)}, r+1, \frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2}, \frac{r+4 \pm \sqrt{r^2+8r+4}}{2}\right\}.$$

Podemos, portanto, calcular a energia laplaciana sem sinal de $C(3, r)$, lembrando que $m = n - 1 = 3r + 2$, donde $\bar{d} = \frac{6r+4}{3r+3}$,

$$\begin{aligned} LE^+(C(3, r)) &= \frac{6r+4}{3r+3} + (3r-3) \cdot \left(\frac{6r+4}{3r+3} - 1\right) + \left(r+1 - \frac{6r+4}{3r+3}\right) \\ &+ \left(\frac{6r+4}{3r+3} - \frac{r+2 - \sqrt{r^2+4r}}{2}\right) + \left(\frac{6r+4}{3r+3} - \frac{r+4 - \sqrt{r^2+8r+4}}{2}\right) \\ &+ \left(\frac{r+2 + \sqrt{r^2+4r}}{2} - \frac{6r+4}{3r+3}\right) + \left(\frac{r+4 + \sqrt{r^2+8r+4}}{2} - \frac{6r+4}{3r+3}\right) \\ &= \frac{4r^2}{r+1} + \sqrt{r^2+4r} + \sqrt{r^2+8r+4}. \end{aligned}$$

Vamos agora adicionar uma aresta e ligando os vértices terminais do caminho obtendo o grafo da Figura 2.11.

Analogamente ao realizado acima temos que, pela Proposição 2.14, 1 é autovalor laplaciano sem sinal de $C(3, r) + e$ com multiplicidade $3r - 3$ e os outros autovalores laplacianos sem sinal de $C(3, r)$ podem ser obtidos pela Proposição 2.13

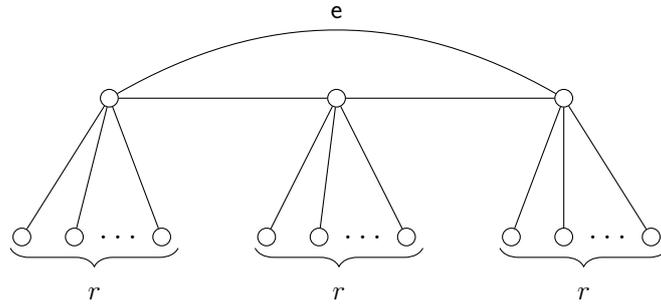


Figura 2.11: Grafo $C(3, r) + e$

reduzindo a matriz

$$L^+(C(3, r) + e) = \begin{bmatrix} r+2 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & r+2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & r+2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

à seguinte matriz

$$B(C(3, r) + e) = \begin{bmatrix} r+2 & 1 & 1 & r & 0 & 0 \\ 1 & r+2 & 1 & 0 & r & 0 \\ 1 & 1 & r+2 & 0 & 0 & r \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

cujo espectro é $\left\{ \left(\frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2} \right)^{(2)}, \frac{r+5 \pm \sqrt{r^2+10r+9}}{2} \right\}$. Como 1 não faz parte deste espectro, obtemos desta forma o espectro laplaciano sem sinal de $C(3, r) + e$ que é igual à

$$\left\{ 1^{(3r-3)}, \left(\frac{r+2 \pm \sqrt{r^2+4r}}{2} \right)^{(2)}, \frac{r+5 \pm \sqrt{r^2+10r+9}}{2} \right\}.$$

Podemos, portanto, calcular a energia laplaciana sem sinal de $C(3, r) + e$, lembrando que, neste caso, $m = n$, donde $\bar{d} = 2$,

$$\begin{aligned} LE^+(C(3, r) + e) &= 3r - 3 + 2 \cdot \left(2 - \frac{r+2 - \sqrt{r^2+4r}}{2} \right) \\ &\quad + \left(2 - \frac{r+5 - \sqrt{r^2+10r+9}}{2} \right) + 2 \cdot \left(\frac{r+2 + \sqrt{r^2+4r}}{2} - 2 \right) \\ &\quad + \left(\frac{r+5 + \sqrt{r^2+10r+9}}{2} - 2 \right) \\ &= 3r - 3 + 2\sqrt{r^2+4r} + \sqrt{r^2+10r+9}. \end{aligned}$$

Obtemos assim

$$LE^+(C(3, r) + e) - LE^+(C(3, r)) = -\frac{r^2+3}{r+1} + \sqrt{r^2+4r} + \sqrt{r^2+10r+9} - \sqrt{r^2+8r+4}.$$

Agora, fazendo $n \rightarrow \infty$, temos que $r \rightarrow \infty$, e neste caso

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (LE^+(C(3, r) + e) - LE^+(C(3, r))) = 4.$$

Portanto, o grafo $C(3, r)$ é um exemplo de grafo que prova que a cota em (2.20) não pode ser melhorada.

Vale destacar que, o grafo caterpillar $C(4, r)$ também é um grafo para o qual a cota em (2.20) não pode ser melhorada. A medida que aumentamos o valor de d , o cálculo dos autovalores laplacianos sem sinal do grafo $C(d, r)$, se torna cada vez mais complicado e, por esse motivo, não podemos concluir que todos os grafos caterpillar são exemplos de grafos para os quais a cota não pode ser melhorada, apesar de acreditarmos que tal fato seja verdadeiro.

3 GRAFOS UNICÍCLICOS

Nosso principal objetivo é estabelecer propriedades da energia laplaciana sem sinal de grafos quaisquer. Como os espectros laplaciano e laplaciano sem sinal de grafos bipartidos coincidem, conforme a Proposição 2.6, voltamos nossa atenção para a família dos grafos unicíclicos, que é possivelmente, a família de grafos conexos mais simples de se trabalhar depois das árvores. Neste capítulo, primeiramente estabelecemos uma cota superior para as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de qualquer grafo unicíclico conexo em função do número de vértices n e do número de autovalores maiores ou iguais ao grau médio 2 , σ e σ^+ . Essa cota será de fundamental importância na demonstração do principal resultado deste capítulo, que é provar qual é o grafo unicíclico conexo de energias laplaciana e laplaciana sem sinal máximas, sob determinadas condições de σ e σ^+ , respectivamente. Os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos em conjunto com Kinkar C. Das, Eliseu Fritscher e Vilmar Trevisan e fazem parte do nosso trabalho [13].

3.1 Nova cota superior para as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de grafos unicíclicos

A seguir iremos provar uma cota superior para as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo unicíclico conexo qualquer com $n \geq 4$ vértices. De fato, provaremos que LE e LE^+ são limitadas por $2n - \frac{4\sigma}{n}$ e $2n - \frac{4\sigma^+}{n}$, respectivamente. Essa cota nos será de fundamental importância na Seção 3.2, pois ela é o resultado que nos permite provar os Teoremas 3.5 e 3.6, onde estabelecemos o grafo unicíclico de energias laplaciana e laplaciana sem sinal máximas.

A cota por si só já é um resultado importante por ser um valor muito próximo (fator de $O\left(\frac{1}{n}\right)$) das energias (laplaciana e laplaciana sem sinal) dos grafos

candidatos a serem máximos. Lembrando que, em um grafo unicíclico conexo, o número de arestas é igual ao número de vértices, donde $\bar{d} = 2$.

Grafo	$LE^+(G)$	Cota $2n - \frac{4\sigma^+}{n}$	$LE(G)$	Cota $2n - \frac{4\sigma}{n}$
C_3	4	4, 66	4	3, 33
C_4	4	5	4	5
S'_4	5, 1231	6	6	6
C_5	6, 4721	7, 6	6, 4721	8, 4
S'_5	7, 3626	8, 4	8	8, 4
	7, 1069	8, 4	7, 8416	8, 4
	6, 7298	8, 4	6, 9623	7, 6
	6, 3401	7, 6	6, 3401	7, 6

Tabela 3.1: Grafos unicíclicos com até 5 vértices e suas energias laplaciana e laplaciana sem sinal

Teorema 3.1. *Sejam G um grafo unicíclico conexo de ordem n e σ^+ o número de autovalores laplacianos sem sinal de G maiores ou iguais a 2. Então*

$$LE^+(G) \leq 2n - \frac{4\sigma^+}{n}. \quad (3.1)$$

Demonstração. Nossa demonstração está estruturada da seguinte maneira: verificamos manualmente que a cota é válida para todos os grafos unicíclicos com $n = 3, 4, 5$ vértices. Para grafos unicíclicos G com $n \geq 6$ vértices, vamos separar a demonstração em dois casos: caso $G \cong S'_n$ é possível demonstrar a cota através do cálculo da maioria dos autovalores laplacianos sem sinal de S'_n ; caso $G \not\cong S'_n$, usaremos o Lema 2.16.

Existem 8 grafos unicíclicos com até 5 vértices, todos eles representados na Tabela 3.1. Note que, para todos esses grafos, a cota (3.1) é satisfeita. Em particular, para os grafos S'_4 e S'_5 a cota será novamente verificada no caso $G \cong S'_n$.

Seja S'_n o grafo obtido da estrela S_n pela adição de uma aresta. Pelo Teorema 2.8, temos que os autovalores laplacianos sem sinal de S'_n satisfazem

$$\begin{aligned} q_1(S'_n) &\geq q_1(S_n) \geq q_2(S'_n) \geq q_2(S_n) \geq q_3(S'_n) \geq q_3(S_n) \geq \cdots \geq q_{n-2}(S'_n) \geq \\ q_{n-2}(S_n) &\geq q_{n-1}(S'_n) \geq q_{n-1}(S_n) \geq q_n(S'_n) \geq q_n(S_n). \end{aligned}$$

Mas, o espectro laplaciano sem sinal de S_n é $\{0, 1^{(n-2)}, n\}$, donde

$$q_1(S'_n) \geq n \geq q_2(S'_n) \geq 1 \geq q_3(S'_n) \geq 1 \geq \cdots \geq q_{n-2}(S'_n) \geq 1 \geq q_{n-1}(S'_n) \geq 1 \geq q_n(S'_n) \geq 0.$$

Portanto, $q_3(S'_n) = q_4(S'_n) = \cdots = q_{n-1}(S'_n) = 1$ e para os outros autovalores laplacianos sem sinal temos as seguintes condições

$$q_1(S'_n) \geq n, \quad n \geq q_2(S'_n) \geq 1 \quad \text{and} \quad 1 \geq q_n(S'_n) \geq 0. \quad (3.2)$$

Precisamos saber quais desses autovalores são maiores do que 2 e quais são menores do que 2 para estimar a energia laplaciana sem sinal de S'_n . Para isso, usaremos a Proposição 2.13 a fim de obter o polinômio característico de $L^+(S'_n)$, que é o seguinte

$$f(x) = (x-1)^{n-3} (x^3 - (n+3)x^2 + 3nx - 4). \quad (3.3)$$

Note que os autovalores laplacianos sem sinal de S'_n distintos de 1, $q_1(S'_n)$, $q_2(S'_n)$ e $q_n(S'_n)$, são exatamente as raízes de $f_1(x) = x^3 - (n+3)x^2 + 3nx - 4$. Agora, por (3.2) temos que $q_1(S'_n) \geq n \geq 2$ e $q_n(S'_n) \leq 1 < 2$, resta portanto, saber se $q_2(S'_n) \geq 2$ ou $q_2(S'_n) < 2$. Para isso vamos avaliar a função $f_1(x)$ em números apropriados:

$$\begin{aligned} f_1(2) &= 2n - 8 \geq 0, \quad \text{se } n \geq 4, \\ f_1(3) &= -4 < 0. \end{aligned}$$

Portanto, $2 \leq q_2(S'_n) \leq 3$, se $n \geq 4$, e segue da Proposição 2.23 que

$$\begin{aligned} LE^+(S'_n) &= 2 \cdot (n-2) \cdot 2 - 2 \cdot (n-3 + q_n(S'_n)) \\ &= 2n - 2 - 2q_n(S'_n) \\ &\leq 2n - 2 \\ &\leq 2n - \frac{8}{n}, \quad \text{se } n \geq 4. \end{aligned}$$

Logo, se $n \geq 4$ e $G \cong S'_n$, temos que $\sigma^+ = 2$ e

$$LE^+(G) \leq 2n - \frac{4\sigma^+}{n}.$$

Para o outro caso, vamos primeiramente provar a seguinte afirmação: todos os grafos unicíclicos $G \not\cong S'_n$ de ordem $n \geq 6$ possuem uma aresta e tal que o diâmetro da árvore $T = G - e$ é no mínimo 4.

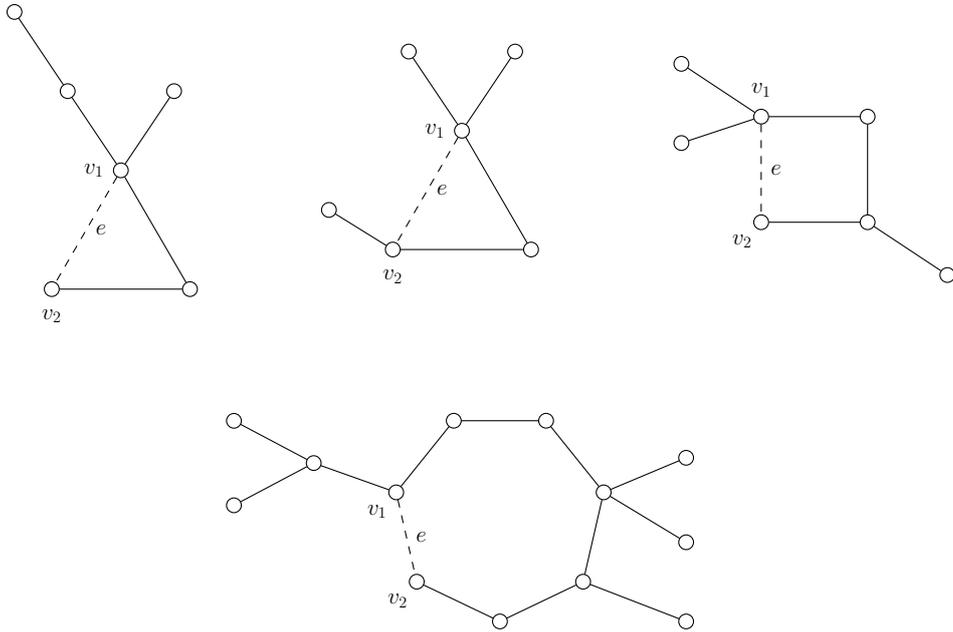


Figura 3.1: Possíveis árvores $T = G - e$, se $G \not\cong S'_n$

De fato, seja C_k o ciclo com k vértices que é subgrafo induzido do grafo G . Se $k \geq 5$, removendo qualquer aresta e de C_k , a árvore resultante $T = G - e$ possui como subgrafo induzido o caminho P_5 , donde T tem diâmetro maior ou igual

a 4 (veja o grafo da parte de baixo da Figura 3.1). Se $k = 4$, então um dos vértices do ciclo C_4 , digamos v_1 , é adjacente a outro vértice que está fora do ciclo. Removendo uma das arestas incidentes a v_1 no ciclo C_4 , obtemos uma árvore $T = G - e$ que tem diâmetro pelo menos 4 (o último grafo da parte superior da Figura 3.1 mostra esse caso). Se $k = 3$, como $G \not\cong S'_n$, existem dois possíveis casos: 1) existem pelo menos dois vértices do ciclo C_3 , digamos v_1 e v_2 , que são adjacentes a vértices que não pertencem ao ciclo. Removendo a aresta entre v_1 e v_2 , a árvore resultante $T = G - e$ tem diâmetro pelo menos 4 (o grafo central da parte superior da Figura 3.1 ilustra esse caso); 2) existe um vértice do ciclo C_3 , digamos v_1 , que é adjacente a pelo menos uma árvore de diâmetro maior ou igual a um. Removendo uma das arestas incidentes a v_1 no ciclo C_3 , obtemos uma árvore $T = G - e$ que tem diâmetro pelo menos 4 (veja o primeiro grafo da Figura 3.1). Portanto, existe sempre uma aresta e tal que $T = G - e$ tem diâmetro pelo menos 4.

Suponha que os vértices de G são enumerados de tal maneira que e é uma aresta entre os dois primeiros vértices. A matriz $L^+(G)$ pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}
L^+(G) &= \begin{bmatrix} d_1 & 1 & q_{13} & \cdots & q_{1n} \\ 1 & d_2 & q_{23} & \cdots & q_{2n} \\ q_{13} & q_{23} & d_3 & \cdots & q_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{1n} & q_{2n} & q_{3n} & \cdots & d_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} d_1 - 1 & 0 & q_{13} & \cdots & q_{1n} \\ 0 & d_2 - 1 & q_{23} & \cdots & q_{2n} \\ q_{13} & q_{23} & d_3 & \cdots & q_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{1n} & q_{2n} & q_{3n} & \cdots & d_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \\
&= L^+(T) + L^+(\mathbf{0} + e).
\end{aligned}$$

Agora, $\mathbf{0}+e$ é o grafo formado por uma aresta ligando dois vértices quaisquer e $n-2$ vértices isolados, cujo espectro laplaciano sem sinal pode ser facilmente calculado e é dado por $\{0^{(n-1)}, 2\}$.

Dado um inteiro positivo k ($1 \leq k \leq n$), podemos aplicar o Lema 2.15 para obter o seguinte

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k q_i(G) &\leq \sum_{i=1}^k q_i(T) + \sum_{i=1}^k q_i(\mathbf{0}+e) \\ &= \sum_{i=1}^k q_i(T) + 2 \\ &= \sum_{i=1}^k \mu_i(T) + 2 \end{aligned}$$

e usando o Lema 2.16 obtemos que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k q_i(G) &\leq \sum_{i=1}^k \mu_i(T) + 2 \\ &< n + 2k - \frac{2k}{n}. \end{aligned}$$

Utilizando a relação acima e a Proposição 2.22, obtemos que a energia laplaciana sem sinal pode ser escrita da seguinte maneira

$$\begin{aligned} LE^+(G) &= 2 \sum_{i=1}^{\sigma^+} q_i(G) - 2\sigma^+ \bar{d} \\ &< 2 \left(n + 2\sigma^+ - \frac{2\sigma^+}{n} \right) - 4\sigma^+ \\ &= 2n - \frac{4\sigma^+}{n}. \end{aligned}$$

□

Para o caso da energia laplaciana, a cota é a mesma, com exceção de que, neste caso, ela não vale para $n = 3$ e a igualdade é atingida para o grafo S'_4 . As etapas da demonstração são as mesmas que para o caso da laplaciana sem sinal, por isso a faremos de modo mais resumido.

Teorema 3.2. *Sejam G um grafo unicíclico conexo de ordem $n \geq 4$ e σ o número de autovalores laplacianos de G maiores ou iguais a 2. Então*

$$LE(G) \leq 2n - \frac{4\sigma}{n}, \quad (3.4)$$

com igualdade se, e somente se, $G = S'_4$.

Demonstração. Nossa demonstração está estruturada da seguinte maneira: verificamos algebricamente que a cota é válida para todos os grafos unicíclicos com 4 e 5 vértices. Para grafos unicíclicos G com $n \geq 6$ vértices, vamos separar a demonstração em dois casos: $G \cong S'_n$ em que é possível demonstrar a cota através do cálculo dos autovalores laplacianos de S'_n ; e $G \not\cong S'_n$, onde usaremos o Lema 2.16.

Existem 7 grafos unicíclicos com 4 e 5 vértices (veja Tabela 3.1) e para todos esses grafos a cota (3.4) é satisfeita. Em particular, para os grafos S'_4 e S'_5 , a cota será novamente verificada no caso $G \cong S'_n$.

Seja S'_n o grafo obtido da estrela S_n pela adição de uma aresta. O espectro laplaciano de S'_n é $\{0, 1^{(n-3)}, 3, n\}$, donde $\sigma = 2$. Pela Proposição 2.22, a energia laplaciana de S'_n satisfaz

$$\begin{aligned} LE(S'_n) &= 2 \sum_{i=1}^2 \mu_i(S'_n) - 2 \cdot 2 \cdot 2 \\ &= 2(n+3) - 8 \\ &= 2n - 2 \\ &\leq 2n - \frac{8}{n}, \quad \text{pois } n \geq 4, \end{aligned}$$

com igualdade se, e somente se, $n = 4$.

Logo, se $n \geq 4$ e $G \cong S'_n$, temos que

$$LE(G) \leq 2n - \frac{4\sigma}{n}.$$

Para o caso em que $n \geq 6$ e $G \not\cong S'_n$, utilizaremos o mesmo fato utilizado na demonstração para a cota da energia laplaciana sem sinal de que existe uma

aresta e de G tal que o diâmetro da árvore $T = G - e$ é no mínimo 4. Também, analogamente ao caso da laplaciana sem sinal, podemos supor que a aresta e é incidente aos dois primeiros vértices de G , donde a matriz $L(G)$ pode ser escrita na seguinte forma

$$L(G) = L(T) + L(\mathbf{0} + e).$$

Dado um inteiro positivo k ($1 \leq k \leq n$), podemos aplicar o Lema 2.15 para obter o seguinte

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \mu_i(G) &\leq \sum_{i=1}^k \mu_i(T) + \sum_{i=1}^k \mu_i(\mathbf{0} + e) \\ &= \sum_{i=1}^k \mu_i(T) + 2. \end{aligned}$$

e usando o Lema 2.16 obtemos que

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

Utilizando a relação acima e a Proposição 2.22 obtemos que a energia laplaciana pode ser escrita da seguinte maneira

$$\begin{aligned} LE(G) &= 2 \sum_{i=1}^{\sigma} \mu_i(G) - 2\sigma\bar{d} \\ &< 2 \left(n + 2\sigma - \frac{2\sigma}{n} \right) - 4\sigma \\ &= 2n - \frac{4\sigma}{n}. \end{aligned}$$

□

3.2 Grafos unicíclicos com energias laplaciana e laplaciana sem sinal máximas

Nesta seção, vamos formular a conjectura de qual é o grafo unicíclico conexo com energias laplaciana e laplaciana sem sinal máximas e vamos provar em parte tal conjectura. Primeiramente, vamos calcular e estimar as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de alguns grafos unicíclicos especiais, os quais chamaremos de *triângulos com pendentes balanceadamente distribuídos*. Esses grafos com n vértices são formados por triângulos (ciclos com três vértices) com $n - 3$ vértices são distribuídos equilibradamente como vértices pendentes incidentes aos três vértices do triângulo, dependendo do resto da divisão de $n - 3$ por 3. Denotaremos tais grafos por $H(n)$. Se a é um número natural, existem três triângulos deste tipo: aquele com a pendentes em cada um dos vértices do triângulo, o qual denotaremos por $H_0(a)$; aquele com a pendentes em dois dos vértices do triângulo e $a + 1$ pendentes no vértice restante, o qual denotaremos por $H_1(a)$; e aquele com a pendentes em apenas um dos vértices do triângulo e $a + 1$ pendentes nos outros dois vértices, o qual denotaremos por $H_2(a)$. Esses grafos estão representados na Figura 3.2.

Estamos interessados em estudar as propriedades de tais grafos, pois conjecturamos o seguinte.

Conjectura 3.3. *Se $n \geq 11$, o grafo conexo unicíclico com n vértices que tem a maior energia laplaciana e a maior energia laplaciana sem sinal é um grafo $H(n)$.*

Usando o software SAGE [50], através de um processo exaustivo, calculamos as energias laplaciana e laplaciana sem sinal de todos os grafos conexos unicíclicos com $n \leq 13$ vértices, e concluímos o seguinte.

Proposição 3.4. *Denote por G_L e G_{L^+} os grafos de ordem n com maior energia laplaciana e maior energia laplaciana sem sinal, respectivamente. Então:*

1. $G_L = G_{L^+} = C_n$, se $n = 3$;

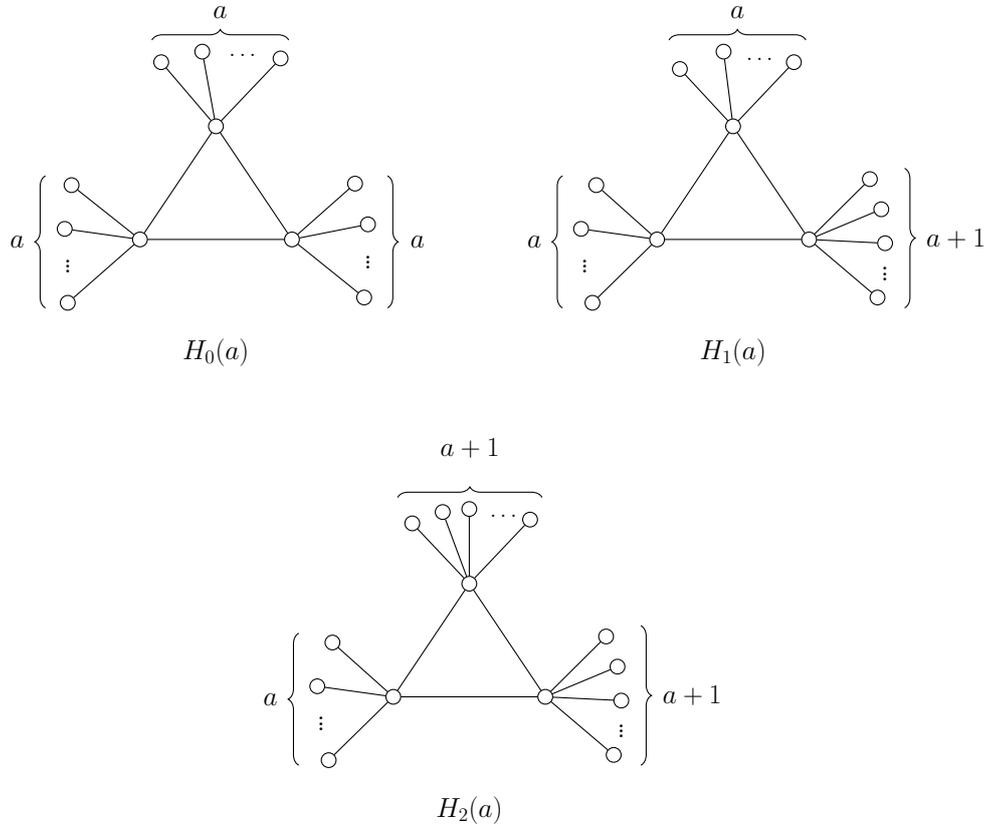


Figura 3.2: Grafos $H_i(a)$, com $n = 3a + i + 3$ vértices, $i=0, 1$ e 2

2. $G_L = G_{L^+} = S'_n$ se $4 \leq n \leq 9$;
3. $G_L = S'_n$ e $G_{L^+} = H_1(2)$, se $n = 10$;
4. $G_L = G_{L^+} = H(n)$, se $n = 11, 12$ e 13 .

Nesta seção, provaremos que alguns grafos têm energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor que a energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) do grafo $H(n)$, reforçando assim a Conjectura 3.3. Mais precisamente, provaremos os seguintes resultados.

Teorema 3.5. *Seja G um grafo conexo unicíclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma^+ \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que G .*

Teorema 3.6. *Seja G um grafo conexo unicíclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana maior do que G .*

Para provar tais resultados vamos, primeiramente, calcular e, quando não for possível calcular explicitamente, estimar as energias laplaciana e laplaciana sem sinal dos grafos $H_0(a)$, $H_1(a)$ e $H_2(a)$. No próximo lema estabelecemos o valor exato das energias laplaciana e laplaciana sem sinal de $H_0(a)$.

Lema 3.7. *Seja $n \geq 6$ um inteiro tal que $n \equiv 0 \pmod{3}$, ou seja, existe um inteiro $a \geq 1$ tal que $n = 3a + 3$. Então, as energias laplaciana e laplaciana sem sinal do grafo $H_0(a) = H_0\left(\frac{n-3}{3}\right)$ são dadas, respectivamente, por*

$$LE(H_0(a)) = \frac{4n - 18}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{n^2 + 18n - 27}, \quad (3.5)$$

$$LE^+(H_0(a)) = n - 6 + \frac{1}{3} \left[\sqrt{n^2 + 24n} + 2 \sqrt{n^2 + 6n - 27} \right]. \quad (3.6)$$

Demonstração. Vamos primeiramente calcular a energia laplaciana sem sinal de $H_0(a)$, iniciando com o cálculo dos autovalores de $L^+(H_0(a))$ e para isso iremos utilizar as Proposições 2.13 e 2.14. Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano sem sinal de $H_0(a)$ com multiplicidade $3a - 3 = n - 6$. Agora, note

que podemos escrever e particionar a matriz $L^+(H_0(a))$ da seguinte forma

$$L^+(H_0(a)) = \begin{bmatrix} a+2 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & a+2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & a+2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Essa é uma partição equilibrada donde, pela Proposição 2.13, o espectro de $L^+(H_0(a))$ contém o espectro da seguinte matriz

$$B(H_0(a)) = \begin{bmatrix} a+2 & 1 & 1 & a & 0 & 0 \\ 1 & a+2 & 1 & 0 & a & 0 \\ 1 & 1 & a+2 & 0 & 0 & a \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico de $B(H_0(a))$ pode ser facilmente calculado e é dado por

$$g_0(x) = (x^2 - (a+2)x + 1)^2 (x^2 - (a+5)x + 4).$$

Note que 1 não é raiz deste polinômio, donde $g_0(x)$ determina exatamente os seis autovalores de $L^+(H_0(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio característico de $L^+(H_0(a))$ é dado por

$$h_0(x) = (x - 1)^{n-6} (x^2 - (a + 2)x + 1)^2 (x^2 - (a + 5)x + 4),$$

ou seja, o espectro laplaciano sem sinal de $H_0(a)$ é dado por

$$\left\{ 1^{(3a-3)}, a_1 = \frac{a + 5 - \sqrt{a^2 + 10a + 9}}{2}, a_2 = \frac{a + 5 + \sqrt{a^2 + 10a + 9}}{2}, \right. \\ \left. b_1^{(2)} = \left(\frac{a + 2 - \sqrt{a^2 + 4a}}{2} \right)^{(2)}, b_2^{(2)} = \left(\frac{a + 2 + \sqrt{a^2 + 4a}}{2} \right)^{(2)} \right\}.$$

É fácil ver que $a_1, b_1 < 2$ e $a_2, b_2 \geq 2$. Então, pela Proposição 2.22 e lembrando que $a = \frac{n-3}{3}$ obtemos

$$\begin{aligned} LE^+(H_0(a)) &= 2 \cdot (a_2 + 2b_2) - 2 \cdot 3 \cdot 2 \\ &= a + 5 + \sqrt{a^2 + 10a + 9} + 2a + 4 + 2\sqrt{a^2 + 4a} - 12 \\ &= n - 6 + \frac{1}{3} \left[\sqrt{n^2 + 24n} + 2\sqrt{n^2 + 6n - 27} \right]. \end{aligned}$$

Para o caso da energia laplaciana, pelo fato das contas serem muito parecidas, faremos algo um pouco mais direto. Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano de $H_0(a)$ com multiplicidade $3a - 3 = n - 6$. Agora, note que o que diferencia a matriz $L(H_0(a))$ da matriz $L^+(H_0(a))$ é que, fora da diagonal, onde tínhamos 1, agora teremos -1 . Podemos ainda utilizar a Proposição 2.13, obtendo, neste caso, uma matriz reduzida na seguinte forma.

$$B_L(H_0(a)) = \begin{bmatrix} a+2 & -1 & -1 & -a & 0 & 0 \\ -1 & a+2 & -1 & 0 & -a & 0 \\ -1 & -1 & a+2 & 0 & 0 & -a \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

O polinômio característico de $B_L(H_0(a))$ é dado por

$$g_{0,L}(x) = x(x - a - 1)(x^2 - (a + 4)x + 3)^2.$$

Note que 1 não é raiz deste polinômio, donde $g_{0,L}(x)$ determina exatamente os seis autovalores de $L(H_0(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio característico de $L(H_0(a))$ é dado por

$$h_{0,L}(x) = x(x - 1)^{n-6}(x - a - 1)(x^2 - (a + 4)x + 3)^2,$$

ou seja, o espectro laplaciano de $H_0(a)$ é dado por

$$\left\{ 0, 1^{(3a-3)}, a + 1, a_1^{(2)} = \left(\frac{a + 4 - \sqrt{a^2 + 8a + 4}}{2} \right)^{(2)}, a_2^{(2)} = \left(\frac{a + 4 + \sqrt{a^2 + 8a + 4}}{2} \right)^{(2)} \right\}.$$

É fácil ver que $a + 1 \geq 2$, $a_1 < 2$ e $a_2 \geq 2$. Então, pela Proposição 2.22 e lembrando que $a = \frac{n-3}{3}$ obtemos

$$\begin{aligned} LE(H_0(a)) &= 2 \cdot (a + 1 + 2a_2) - 2 \cdot 3 \cdot 2 \\ &= 2a + 2 + 2a + 8 + 2\sqrt{a^2 + 8a + 4} - 12 \\ &= \frac{4n - 18}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{n^2 + 18n - 27}. \end{aligned}$$

□

Nos dois lemas a seguir, vamos estimar as energias laplaciana e laplaciana sem sinal dos grafos $H_1(a)$ e $H_2(a)$.

Lema 3.8. *Seja $n \geq 13$ um inteiro tal que $n \equiv 1 \pmod{3}$, ou seja, existe um inteiro $a \geq 3$ tal que $n = 3a + 4$. Então, as energias laplaciana e laplaciana sem sinal do grafo $H_1(a) = H_1\left(\frac{n-4}{3}\right)$ satisfazem, respectivamente*

$$LE(H_1(a)) > \frac{5n - 8}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2 + 16n - 44} - \frac{18}{n - 4} + \frac{90}{(n - 4)^2}, \quad (3.7)$$

$$LE^+(H_1(a)) > \frac{5n - 2}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2 + 4n - 32} - \frac{30}{n - 4} + \frac{126}{(n - 4)^2}. \quad (3.8)$$

Demonstração. Vamos estimar primeiramente a energia laplaciana sem sinal de $H_1(a)$, calculando os autovalores laplacianos sem sinal de $H_1(a)$ de modo análogo ao que foi feito no Lema 3.7. Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano sem sinal de $H_1(a)$ com multiplicidade $3a - 2 = n - 6$. Agora, note que podemos escrever e particionar a matriz $L^+(H_1(a))$ da seguinte forma

$$L^+(H_1(a)) = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c} a+3 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 1 & a+2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 1 & 1 & a+2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \hline \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{array} \right].$$

Essa é uma partição equilibrada donde, pela Proposição 2.13, o espectro de $L^+(H_1(a))$ contém o espectro da seguinte matriz

$$B(H_1(a)) = \begin{bmatrix} a+3 & 1 & 1 & a+1 & 0 & 0 \\ 1 & a+2 & 1 & 0 & a & 0 \\ 1 & 1 & a+2 & 0 & 0 & a \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico de $B(H_1(a))$ pode ser facilmente calculado e é dado por

$$g_1(x) = (x^2 - (a+2)x + 1) \cdot f_1(x),$$

onde $f_1(x) = x^4 - (2a+8)x^3 + (a^2+8a+19)x^2 - (5a+16)x + 4$.

Note que 1 não é raiz deste polinômio, donde $g_1(x)$ determina exatamente os seis autovalores de $L^+(H_1(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio característico de $L^+(H_1(a))$ é dado por

$$h_1(x) = (x-1)^{n-6} (x^2 - (a+2)x + 1) \cdot f_1(x),$$

ou seja, o espectro laplaciano sem sinal de $H_1(a)$ é dado por

$$\left\{ 1^{(3a-2)}, c_1 = \frac{a+2-\sqrt{a^2+4a}}{2}, c_2 = \frac{a+2+\sqrt{a^2+4a}}{2}, x_1, x_2, x_3, x_4 \right\},$$

onde $x_1 \geq x_2 \geq x_3 \geq x_4$ são as raízes de $f_1(x)$.

Vamos agora obter cotas para os autovalores x_1, x_2, x_3 e x_4 a fim de aproximar melhor o valor para a energia laplaciana sem sinal de $H_1(a)$. Se $a \geq 3$, temos que

$$\begin{aligned} f_1(0) &= 4 > 0, \\ f_1\left(\frac{1}{a}\right) &= -\frac{8a^3 - 17a^2 + 8a - 1}{a^4} < 0, \\ f_1\left(\frac{4}{a} - \frac{7}{a^2}\right) &= \frac{43a^7 - 111a^6 - 512a^5 + 2699a^4 - 5810a^3 + 7448a^2 - 5488a + 2401}{a^8} \\ &> 0. \end{aligned}$$

Isso significa que existem uma raiz ou três raízes de $f_1(x)$ no intervalo $(0, \frac{1}{a})$ e também, existem uma raiz ou três raízes de $f_1(x)$ no intervalo $(\frac{1}{a}, \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2})$.

Afirmção: Existe somente uma raiz de $f_1(x)$ em cada um dos intervalos $(0, \frac{1}{a})$ e $(\frac{1}{a}, \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2})$. De fato, se existissem três raízes de $f_1(x)$ no intervalo $(0, \frac{1}{a})$, x_4, x_3 e

x_2 , então, necessariamente $x_1 \in (\frac{1}{a}, \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2})$, o que contradiz a propriedade da soma das raízes de $f_1(x)$. Também teríamos uma contradição se existissem três raízes de $f_1(x)$ no intervalo $(\frac{1}{a}, \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2})$.

Então

$$0 < x_4 < \frac{1}{a} \quad \text{e} \quad \frac{1}{a} < x_3 < \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2}.$$

Vejamos agora quais são as condições sobre x_1 e x_2 . Se $a \geq 3$, temos que

$$f_1(a) = 14a^2 - 16a + 4 > 0,$$

$$f_1(3a) = 36a^4 - 144a^3 + 156a^2 - 48a + 4 > 0,$$

donde, concluímos que: ou não existe nenhuma raiz de $f_1(x)$ no intervalo $(a, 3a)$ ou existem duas raízes de $f_1(x)$ no intervalo $(a, 3a)$.

Afirmção: Existem duas raízes, x_1 e x_2 , de $f_1(x)$ no intervalo $(a, 3a)$. De fato, suponha por absurdo que não existe nenhuma raiz de $f_1(x)$ entre a e $3a$, donde, ou $x_1, x_2 \leq a$ ou $x_1, x_2 \geq 3a$. Mas em qualquer um desses casos chegamos à uma contradição com a propriedade da soma das raízes de $f_1(x)$.

Agora, utilizando as cotas obtidas no passo anterior e lembrando que $2a + 8 = x_1 + x_2 + x_3 + x_4$, obtemos

$$x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 2a + 8 - 2 \cdot (x_3 + x_4) > 2a + 8 - \frac{10}{a} + \frac{14}{a^2}.$$

Note que $c_1 = \frac{a+2-\sqrt{a^2+4a}}{2} < 2$ e $c_2 = \frac{a+2+\sqrt{a^2+4a}}{2} \geq 2$, e pelas cotas obtidas anteriormente temos que $x_1, x_2 > 2$ e $x_3, x_4 < 2$. Logo, a energia laplaciana

sem sinal de $H_1(a)$ é dada por

$$\begin{aligned}
LE^+(H_1(a)) &= \sum_{i=1}^n |q_i(H_1(a)) - 2| \\
&= (n-6) \cdot |1-2| + 2 - c_1 + c_2 - 2 + x_1 - 2 + x_2 - 2 + 2 - x_3 + 2 - x_4 \\
&= n - 6 + c_2 - c_1 + x_1 + x_2 - x_3 - x_4 \\
&> n - 6 + \sqrt{a^2 + 4a} + 2a + 8 - \frac{10}{a} + \frac{14}{a^2} \\
&= \frac{5n-2}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2 + 4n - 32} - \frac{30}{n-4} + \frac{126}{(n-4)^2}.
\end{aligned}$$

O processo para o cálculo da energia laplaciana é basicamente o mesmo, por isso o faremos de modo mais resumido. Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano de $H_1(a)$ com multiplicidade $3a - 2 = n - 6$. Agora, o que diferencia a matriz $L(H_1(a))$ da matriz $L^+(H_1(a))$ é que, fora da diagonal, onde tínhamos o valor 1, agora teremos -1 . Podemos ainda utilizar a Proposição 2.13, obtendo, neste caso, uma matriz reduzida da seguinte forma

$$B_L(H_1(a)) = \begin{bmatrix} a+3 & -1 & -1 & -a-1 & 0 & 0 \\ -1 & a+2 & -1 & 0 & -a & 0 \\ -1 & -1 & a+2 & 0 & 0 & -a \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico de $B_L(H_1(a))$ pode ser facilmente calculado e é dado por

$$g_{1,L}(x) = x(x^2 - (a+4)x + 3) \cdot f_{1,L}(x),$$

onde $f_{1,L}(x) = x^3 - (2a+6)x^2 + (a^2+6a+9)x - 3a-4$.

Note que 1 não é raiz deste polinômio, donde $g_{1,L}(x)$ determina exatamente os seis autovalores de $L(H_1(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio carac-

terístico de $L(H_1(a))$ é dado por

$$h_{1,L}(x) = x \cdot (x-1)^{n-6} \cdot (x^2 - (a+4)x + 3) \cdot f_{1,L}(x),$$

ou seja, o espectro laplaciano de $H_1(a)$ é dado por

$$\left\{ 0, 1^{(3a-2)}, c_1 = \frac{a+4 - \sqrt{a^2+8a+4}}{2}, c_2 = \frac{a+4 + \sqrt{a^2+8a+4}}{2}, x_1, x_2, x_3 \right\},$$

onde $x_1 \geq x_2 \geq x_3$ são as raízes de $f_{1,L}(x)$.

Analogamente aos cálculos realizados para o caso da laplaciana sem sinal, temos que, se $a \geq 3$, então

$$0 < x_3 < \frac{3}{a} - \frac{5}{a^2} \quad \text{e} \quad x_1 \geq x_2 \geq a.$$

Agora, utilizando essas cotas e lembrando que $2a + 6 = x_1 + x_2 + x_3$, obtemos

$$x_1 + x_2 - x_3 = 2a + 6 - 2x_3 > 2a + 6 - \frac{6}{a} + \frac{10}{a^2}.$$

Note que $c_1 = \frac{a+4 - \sqrt{a^2+8a+4}}{2} < 2$ e $c_2 = \frac{a+4 + \sqrt{a^2+8a+4}}{2} \geq 2$, e pelas cotas obtidas acima temos que $x_1, x_2 > 2$ e $x_3 < 2$. Logo, a energia laplaciana de $H_1(a)$ é dada por

$$\begin{aligned} LE(H_1(a)) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i(H_1(a)) - 2| \\ &= (n-6) \cdot |1-2| + 2 + 2 - c_1 + c_2 - 2 + x_1 - 2 + x_2 - 2 + 2 - x_3 \\ &= n - 6 + c_2 - c_1 + x_1 + x_2 - x_3 \\ &> n - 6 + \sqrt{a^2 + 8a + 4} + 2a + 6 - \frac{6}{a} + \frac{10}{a^2} \\ &= \frac{5n-8}{3} + \frac{1}{3} \sqrt{n^2 + 16n - 44} - \frac{18}{n-4} + \frac{90}{(n-4)^2}. \end{aligned}$$

□

Vale destacar aqui que o resultado não é válido para $n = 10$ no caso da energia laplaciana sem sinal, uma vez que a energia laplaciana sem sinal do grafo $H_1(2)$ é igual a 17,81 e a cota à direita em (3.8) é igual a 17,96.

Lema 3.9. *Seja $n \geq 14$ um inteiro tal que $n \equiv 2 \pmod{3}$, ou seja, existe um inteiro $a \geq 3$ tal que $n = 3a + 5$. Então, as energias laplaciana e laplaciana sem sinal do grafo $H_2(a) = H_2\left(\frac{n-5}{3}\right)$ satisfazem, respectivamente*

$$LE(H_2(a)) > \frac{5n-10}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2+20n-8} - \frac{18}{n-5} + \frac{90}{(n-5)^2}, \quad (3.9)$$

$$LE^+(H_2(a)) > \frac{5n-4}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2+8n-20} - \frac{30}{n-5} + \frac{126}{(n-5)^2}. \quad (3.10)$$

Demonstração. A demonstração deste lema é análoga a do lema anterior. Para estimar a energia laplaciana sem sinal de $H_2(a)$, vamos calcular os autovalores da matriz laplaciana sem sinal de $H_2(a)$, $L^+(H_2(a))$. Neste caso, a matriz $L^+(H_2(a))$, pela Proposição 2.13, contém o espectro da seguinte matriz

$$B(H_2(a)) = \begin{bmatrix} a+3 & 1 & 1 & a+1 & 0 & 0 \\ 1 & a+3 & 1 & 0 & a+1 & 0 \\ 1 & 1 & a+2 & 0 & 0 & a \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico de $B(H_2(a))$ pode ser facilmente calculado e é dado por

$$g_2(x) = (x^2 - (a+3)x + 1) \cdot f_2(x),$$

onde $f_2(x) = x^4 - (2a+8)x^3 + (a^2+8a+18)x^2 - (5a+15)x + 4$.

Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano sem sinal de $H_2(a)$ com multiplicidade $3a-1 = n-6$. Além disso, 1 não é raiz de $g_2(x)$, donde

este polinômio determina exatamente os seis autovalores de $L^+(H_2(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio característico de $L^+(H_2(a))$ é dado por

$$h_2(x) = (x - 1)^{n-6} (x^2 - (a + 3)x + 1) \cdot f_2(x),$$

ou seja, o espectro laplaciano sem sinal de $H_2(a)$ é dado por

$$\left\{ 1^{(3a-1)}, d_1 = \frac{a + 3 - \sqrt{a^2 + 6a + 5}}{2}, d_2 = \frac{a + 3 + \sqrt{a^2 + 6a + 5}}{2}, y_1, y_2, y_3, y_4 \right\},$$

onde $y_1 \geq y_2 \geq y_3 \geq y_4$ são as raízes de $f_2(x)$.

Vamos agora obter cotas para os autovalores y_1, y_2, y_3 e y_4 a fim de aproximar melhor o valor para a energia laplaciana sem sinal de $H_2(a)$. Se $a \geq 3$, temos que

$$\begin{aligned} f_2(0) &= 4 > 0, \\ f_2\left(\frac{1}{a}\right) &= -\frac{7a^3 - 16a^2 + 8a - 1}{a^4} < 0, \\ f_2\left(\frac{4}{a} - \frac{7}{a^2}\right) &= \frac{47a^7 - 134a^6 - 456a^5 + 2650a^4 - 5810a^3 + 7448a^2 - 5488a + 2401}{a^8} \\ &> 0. \end{aligned}$$

Analogamente ao argumentado no lema anterior, temos que

$$0 < y_4 < \frac{1}{a} \quad \text{e} \quad \frac{1}{a} < y_3 < \frac{4}{a} - \frac{7}{a^2}.$$

Se $a \geq 3$, temos que

$$\begin{aligned} f_2(a) &= 13a^2 - 15a + 4 > 0, \\ f_2(3a) &= 36a^4 - 144a^3 + 147a^2 - 45a + 4 > 0, \end{aligned}$$

e utilizando o mesmo argumento do lema anterior, obtemos que

$$y_1, y_2 \in (a, 3a).$$

Agora, utilizando as cotas obtidas no passo anterior e lembrando que $2a + 8 = y_1 + y_2 + y_3 + y_4$, obtemos

$$y_1 + y_2 - y_3 - y_4 = 2a + 8 - 2 \cdot (y_3 + y_4) > 2a + 8 - \frac{10}{a} + \frac{14}{a^2}.$$

Note que $d_1 = \frac{a+3-\sqrt{a^2+6a+5}}{2} < 2$ e $d_2 = \frac{a+3+\sqrt{a^2+6a+5}}{2} \geq 2$, e pelas cotas obtidas anteriormente temos que $y_1, y_2 > 2$ e $y_3, y_4 < 2$. Logo, a energia laplaciana sem sinal de $H_2(a)$ é dada por

$$\begin{aligned} LE^+(H_2(a)) &= \sum_{i=1}^n |q_i(H_2(a)) - 2| \\ &= (n-6) \cdot |1-2| + 2 - d_1 + d_2 - 2 + y_1 - 2 + y_2 - 2 + 2 - y_3 + 2 - y_4 \\ &= n - 6 + d_2 - d_1 + y_1 + y_2 - y_3 - y_4 \\ &> n - 6 + \sqrt{a^2 + 6a + 5} + 2a + 8 - \frac{10}{a} + \frac{14}{a^2} \\ &= \frac{5n-4}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{n^2 + 8n - 20} - \frac{30}{n-5} + \frac{126}{(n-5)^2}. \end{aligned}$$

O processo para o cálculo da energia laplaciana é basicamente o mesmo, por isso o faremos de modo mais resumido. Pela Proposição 2.14, temos que 1 é um autovalor laplaciano de $H_2(a)$ com multiplicidade $3a - 1 = n - 6$. Agora, o que diferencia a matriz $L(H_2(a))$ da matriz $L^+(H_2(a))$ é que, fora da diagonal, onde tínhamos o valor 1, agora teremos -1 . Podemos ainda utilizar a Proposição 2.13, obtendo, neste caso, uma matriz reduzida na seguinte forma.

$$B_L(H_2(a)) = \begin{bmatrix} a+3 & -1 & -1 & -a-1 & 0 & 0 \\ -1 & a+3 & -1 & 0 & -a-1 & 0 \\ -1 & -1 & a+2 & 0 & 0 & -a \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico de $B_L(H_2(a))$ pode ser facilmente calculado e é dado por

$$g_{2,L}(x) = x(x^2 - (a+5)x + 3) \cdot f_{2,L}(x),$$

onde $f_{2,L}(x) = x^3 - (2a+6)x^2 + (a^2+6a+10)x - 3a - 5$.

Note que 1 não é raiz deste polinômio, donde $g_{2,L}(x)$ determina exatamente os seis autovalores de $L(H_2(a))$ distintos de 1. Portanto o polinômio característico de $L(H_2(a))$ é dado por

$$h_{2,L}(x) = x \cdot (x-1)^{n-6} \cdot (x^2 - (a+5)x + 3) \cdot f_{2,L}(x),$$

ou seja, o espectro laplaciano de $H_2(a)$ é dado por

$$\left\{ 0, 1^{(3a-1)}, d_1 = \frac{a+5-\sqrt{a^2+10a+13}}{2}, d_2 = \frac{a+5+\sqrt{a^2+10a+13}}{2}, y_1, y_2, y_3 \right\},$$

onde $y_1 \geq y_2 \geq y_3$ são as raízes de $f_{2,L}(x)$.

Analogamente aos cálculos realizados para o caso da laplaciana sem sinal, temos que, se $a \geq 3$, então

$$0 < y_3 < \frac{3}{a} - \frac{5}{a^2} \quad \text{e} \quad y_1 \geq y_2 \geq a.$$

Agora, utilizando essas cotas e lembrando que $2a+6 = y_1 + y_2 + y_3$, obtemos

$$y_1 + y_2 - y_3 = 2a + 6 - 2y_3 > 2a + 6 - \frac{6}{a} + \frac{10}{a^2}.$$

Note que $d_1 = \frac{a+5-\sqrt{a^2+10a+13}}{2} < 2$ e $d_2 = \frac{a+5+\sqrt{a^2+10a+13}}{2} \geq 2$, e pelas cotas obtidas anteriormente temos que $y_1, y_2 \geq 2$ e $y_3 < 2$. Logo, a energia laplaciana

de $H_2(a)$ é dada por

$$\begin{aligned}
LE(H_2(a)) &= \sum_{i=1}^n |\mu_i(H_2(a)) - 2| \\
&= 2 + (n - 6) \cdot |1 - 2| + 2 - d_1 + d_2 - 2 + y_1 - 2 + y_2 - 2 + 2 - y_3 \\
&= n - 6 + d_2 - d_1 + y_1 + y_2 - y_3 \\
&> n - 6 + \sqrt{a^2 + 10a + 13} + 2a + 6 - \frac{6}{a} + \frac{10}{a^2} \\
&= \frac{5n - 10}{3} + \frac{1}{3} \sqrt{n^2 + 20n - 8} - \frac{18}{n - 5} + \frac{90}{(n - 5)^2}.
\end{aligned}$$

□

Vale destacar aqui que o resultado não é válido para $n = 11$, uma vez que a energia laplaciana do grafo $H_2(2)$ é igual a 20,03 e a cota à direita em (3.9) é igual a 20,58 e a energia laplaciana sem sinal de $H_2(2)$ é igual a 19,95 e a cota à direita em (3.10) é igual a 20,08.

Vamos agora demonstrar o Teorema 3.5, o qual relembramos abaixo.

Teorema 3.5. *Seja G um grafo conexo unicyclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma^+ \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que G .*

Demonstração. A demonstração será dividida em três casos, dependendo do resto da divisão de n por 3. Nos três casos iremos utilizar a seguinte consequência da Série Binomial: se $x > 0$, então

$$\sqrt{1 + x} > 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2. \quad (3.11)$$

(i) Seja $n = 3a + 3$, com $a \geq 3$. Da relação (3.11) temos que

$$\sqrt{1 + \frac{24}{n}} > 1 + \frac{12}{n} - \frac{72}{n^2}.$$

Também da relação (3.11), obtemos

$$\begin{aligned}\sqrt{1 + \frac{6}{n} - \frac{27}{n^2}} &> 1 + \frac{3}{n} - \frac{18}{n^2} + \frac{81}{2n^3} - \frac{729}{8n^4} \\ &> 1 + \frac{3}{n} - \frac{18}{n^2}, \quad \text{pois } n \geq 12.\end{aligned}$$

Podemos assim estimar as raízes quadradas da expressão (3.6)

$$\begin{aligned}LE^+(H_0(a)) &> n - 6 + \frac{1}{3} \left[n \cdot \left(1 + \frac{12}{n} - \frac{72}{n^2} \right) + 2n \cdot \left(1 + \frac{3}{n} - \frac{18}{n^2} \right) \right] \\ &= 2n - \frac{36}{n}\end{aligned}$$

Se $\sigma^+ \geq 9$, temos que

$$2n - \frac{36}{n} \geq 2n - \frac{4\sigma^+}{n}. \quad (3.12)$$

Assim, pelo Teorema 3.1, se G é um grafo com $n = 3a + 3 \geq 12$ vértices e com $\sigma^+ \geq 9$, então $H_0\left(\frac{n-3}{3}\right)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que G .

(ii) Se $n = 3a + 4$, com $a \geq 3$, vamos usar a relação (3.11) para estimar a raiz quadrada da expressão (3.8):

$$\begin{aligned}\sqrt{1 + \frac{4}{n} \left(1 - \frac{8}{n} \right)} &> 1 + \frac{2}{n} \left(1 - \frac{8}{n} \right) - \frac{2}{n^2} \left(1 - \frac{8}{n} \right)^2 \\ &= 1 + \frac{2}{n} - \frac{18}{n^2} + \frac{32}{n^3} - \frac{128}{n^4} \\ &> 1 + \frac{2}{n} - \frac{18}{n^2}, \quad \text{pois } n \geq 13.\end{aligned}$$

Utilizando essa cota em (3.8), obtemos

$$\begin{aligned}LE^+(H_1(a)) &> \frac{5n-2}{3} + \frac{n}{3} \left(1 + \frac{2}{n} - \frac{18}{n^2} \right) - \frac{30}{n-4} + \frac{126}{(n-4)^2} \\ &= 2n - \frac{6}{n} - \frac{30}{n-4} + \frac{126}{(n-4)^2}.\end{aligned}$$

Vamos ver sob que condições (em termos de σ^+ e n) teremos

$$2n - \frac{6}{n} - \frac{30}{n-4} + \frac{126}{(n-4)^2} \geq 2n - \frac{4\sigma^+}{n}. \quad (3.13)$$

A inequação acima é equivalente à seguinte relação

$$(2\sigma^+ - 18)n^2 - (16\sigma^+ - 147)n + 32\sigma^+ - 48 \geq 0, \quad (3.14)$$

que é uma inequação do segundo grau em n . Temos alguns casos para analisar, dependendo do valor de $2\sigma^+ - 18$ e de $\Delta = 18153 - 2016\sigma^+$.

Primeiramente, $\Delta \leq 0$ se, e somente se, $\sigma^+ \geq 10$ e no caso de $\sigma^+ \geq 10$, teremos $2\sigma^+ - 18 \geq 0$, o que implica que a desigualdade (3.14) é válida. Agora, se $\sigma^+ = 9$, a equação (3.14) se resume a

$$3n + 240 \geq 0,$$

o que é sempre verdade, pois $n \geq 13$.

Portanto, se $\sigma^+ \geq 9$, a relação (3.13) é válida, o que significa, usando o Teorema 3.1, que o grafo $H_1\left(\frac{n-4}{3}\right)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que qualquer grafo G com $n = 3a + 4 \geq 13$ vértices e com $\sigma^+ \geq 9$.

(iii) Se $n = 3a + 5$, com $a \geq 3$, vamos usar a relação (3.11) para estimar a raiz quadrada da expressão (3.10):

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \left(\frac{8}{n} - \frac{20}{n^2}\right)} &> 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{8}{n} - \frac{20}{n^2}\right) - \frac{1}{8} \left(\frac{8}{n} - \frac{20}{n^2}\right)^2 \\ &> 1 + \frac{4}{n} - \frac{18}{n^2} + \frac{40}{n^3} - \frac{50}{n^4} \\ &> 1 + \frac{4}{n} - \frac{18}{n^2}. \end{aligned}$$

Usando essa cota em (3.10), obtemos

$$\begin{aligned} LE^+(H_2(a)) &> \frac{5n-4}{3} + \frac{n}{3} \left(1 + \frac{4}{n} - \frac{18}{n^2}\right) - \frac{30}{n-5} + \frac{126}{(n-5)^2} \\ &= 2n - \frac{6}{n} - \frac{30}{n-5} + \frac{126}{(n-5)^2}. \end{aligned}$$

O procedimento neste caso é exatamente o mesmo que no caso (ii). Faremos ele resumidamente aqui. Precisamos verificar quando teremos

$$2n - \frac{6}{n} - \frac{30}{n-5} + \frac{126}{(n-5)^2} \geq 2n - \frac{4\sigma^+}{n},$$

o que é equivalente à relação

$$(2\sigma^+ - 18)n^2 - (20\sigma^+ - 168)n + 50\sigma^+ - 75 \geq 0, \quad (3.15)$$

que também é uma inequação do segundo grau em n . Analogamente ao realizado acima, obtemos que se $\sigma^+ \geq 9$ a relação (3.15) é válida, o que significa, usando o Teorema 3.1, que o grafo $H_2\left(\frac{n-5}{3}\right)$ tem energia laplaciana sem sinal maior do que qualquer grafo G com $n = 3a + 5 \geq 14$ vértices e com $\sigma^+ \geq 9$. \square

Como no resultado anterior estamos considerando $n \geq 12$, nas relações (3.14) e (3.15) não teremos resultados significativos quando considerarmos $\sigma^+ \leq 8$. Esse é o motivo pelo qual provamos o resultado somente para os casos em que $\sigma^+ \geq 9$.

A demonstração do Teorema 3.6 é análoga a do Teorema 3.5, por isso a faremos de modo mais direto.

Teorema 3.6. *Seja G um grafo conexo unicíclico de ordem $n \geq 12$. Se $\sigma \geq 9$, então $H(n)$ tem energia laplaciana maior do que G .*

Demonstração. Como na demonstração do Teorema 3.5, aqui também dividiremos a prova em três casos, dependendo do resto da divisão de n por 3. Nos três casos iremos utilizar a mesma consequência da Série Binomial utilizada anteriormente: a relação (3.11).

(i) Se $n = 3a + 3$, com $a \geq 3$, vamos usar a relação (3.11) para estimar a raiz quadrada da expressão (3.5):

$$\begin{aligned}\sqrt{1 + \frac{18}{n} - \frac{27}{n^2}} &> 1 + \frac{9}{n} - \frac{54}{n^2} + \frac{243}{2n^3} - \frac{729}{8n^4} \\ &> 1 + \frac{9}{n} - \frac{54}{n^2}, \quad \text{pois } n \geq 12.\end{aligned}$$

Usando este resultado em (3.5), obtemos

$$\begin{aligned}LE(H_0(a)) &> \frac{4n-18}{3} + \frac{2n}{3} \left(1 + \frac{9}{n} - \frac{54}{n^2}\right) \\ &= 2n - \frac{36}{n}.\end{aligned}$$

Se $\sigma \geq 9$, temos que

$$2n - \frac{36}{n} \geq 2n - \frac{4\sigma}{n}. \quad (3.16)$$

Assim, pelo Teorema 3.2, se G é um grafo com $n = 3a + 3 \geq 12$ vértices e com $\sigma \geq 9$, então $H_0\left(\frac{n-3}{3}\right)$ tem energia laplaciana maior do que G .

(ii) Se $n = 3a + 4$, com $a \geq 3$, vamos usar a relação (3.11) para estimar a raiz quadrada da expressão (3.7):

$$\begin{aligned}\sqrt{1 + \frac{4}{n} \left(4 - \frac{11}{n}\right)} &> 1 + \frac{8}{n} - \frac{54}{n^2} + \frac{176}{n^3} - \frac{242}{n^4} \\ &> 1 + \frac{8}{n} - \frac{54}{n^2}, \quad \text{pois } n \geq 13.\end{aligned}$$

Usando este resultado em (3.7), obtemos

$$\begin{aligned}LE(H_1(a)) &> \frac{5n-8}{3} + \frac{n}{3} \left(1 + \frac{8}{n} - \frac{54}{n^2}\right) - \frac{18}{n-4} + \frac{90}{(n-4)^2} \\ &= 2n - \frac{18}{n} - \frac{18}{n-4} + \frac{90}{(n-4)^2}.\end{aligned}$$

Vamos ver sob que condições (sob σ e n) teremos

$$2n - \frac{18}{n} - \frac{18}{n-4} + \frac{90}{(n-4)^2} \geq 2n - \frac{4\sigma}{n}. \quad (3.17)$$

A inequação acima é equivalente à seguinte relação

$$(2\sigma - 18)n^2 - (16\sigma - 153)n + 32\sigma - 144 \geq 0, \quad (3.18)$$

que é uma inequação do segundo grau em n . Temos alguns casos para analisar, dependendo do valor de $2\sigma - 18$ e de $\Delta = 13041 - 1440\sigma$.

Analogamente ao realizado na demonstração do teorema anterior, vamos analisar os possíveis sinais de $2\sigma - 18$ e Δ . Primeiramente, $\Delta \leq 0$ se, e somente se, $\sigma \geq 10$ e nesse caso teremos $2\sigma - 18 \geq 0$, o que implica que a relação (3.18) é verdadeira. Agora, se $\sigma = 9$, a equação (3.18) se resume à

$$9n + 144 \geq 0,$$

o que é sempre verdade, pois $n \geq 13$.

Portanto, se $\sigma \geq 9$, a relação (3.17) é válida, o que significa, usando o Teorema 3.2, que o grafo $H_1\left(\frac{n-4}{3}\right)$ tem energia laplaciana maior do que qualquer grafo G com $n = 3a + 4 \geq 13$ vértices e com $\sigma \geq 9$.

(iii) Se $n = 3a + 5$, com $a \geq 3$, vamos usar a relação (3.11) para estimar a raiz quadrada da expressão (3.9):

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \frac{4}{n} \left(5 - \frac{2}{n}\right)} &> 1 + \frac{10}{n} - \frac{54}{n^2} + \frac{40}{n^3} - \frac{8}{n^4} \\ &> 1 + \frac{10}{n} - \frac{54}{n^2}, \quad \text{pois } n \geq 14. \end{aligned}$$

Utilizando essa cota em (3.9), obtemos

$$\begin{aligned} LE(H_2(a)) &> \frac{5n-10}{3} + \frac{n}{3} \left(1 + \frac{10}{n} - \frac{54}{n^2}\right) - \frac{18}{n-5} + \frac{90}{(n-5)^2} \\ &= 2n - \frac{18}{n} - \frac{18}{n-5} + \frac{90}{(n-5)^2}. \end{aligned}$$

O procedimento neste caso é exatamente o mesmo que no caso (ii).

Faremos ele resumidamente aqui. Precisamos verificar quando teremos

$$2n - \frac{18}{n} - \frac{18}{n-5} + \frac{90}{(n-5)^2} \geq 2n - \frac{4\sigma}{n},$$

o que é equivalente à relação

$$(2\sigma - 18)n^2 - (20\sigma - 180)n + 50\sigma - 225 \geq 0, \quad (3.19)$$

que também é uma inequação do segundo grau em n . Obtemos que, se $\sigma \geq 9$, a relação (3.19) é válida, o que significa, usando o Teorema 3.1, que o grafo $H_2\left(\frac{n-5}{3}\right)$ tem energia laplaciana maior do que qualquer grafo G com $n = 3a + 5 \geq 14$ vértices e com $\sigma \geq 9$. \square

Da mesma forma que no caso da laplaciana sem sinal, no resultado anterior não teremos resultados significativos nas relações (3.14) e (3.15) quando considerarmos $\sigma \leq 8$, uma vez que $n \geq 12$. Esse é o motivo pelo qual provamos o resultado somente para os casos em que $\sigma \geq 9$.

Veremos agora algumas condições suficientes para que um grafo unicíclico G satisfaça $\sigma^+ \geq 9$ e $\sigma \geq 9$. Vejamos primeiramente uma definição que nos será útil.

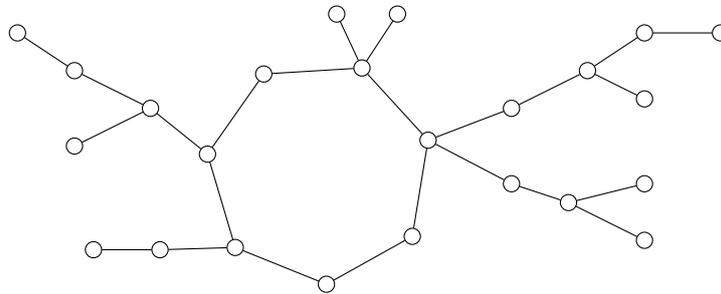


Figura 3.3: Grafo com 6 árvores pendentes

Se G é um grafo unicíclico, chamamos de *árvore pendente* uma das árvores da floresta obtida pela remoção de todos os vértices do ciclo de G . O grafo na Figura 3.3 tem seis árvores pendentes: duas delas são adjacentes ao mesmo vértice do ciclo, uma com 4 vértices e outra com 5 vértices; dois vértices isolados que também eram adjacentes ao mesmo vértice do ciclo; e outras duas restantes, uma com 4 vértices e outra com 2. Note que as arestas pendentes do ciclo de G são árvores pendentes formadas por um único vértice.

O próximo resultado é consequência da Proposição 2.12.

Proposição 3.10. *Seja G um grafo unicíclico com cintura g e com t árvores pendentes. Para $i = 1, \dots, t$, denote por T_i as árvores pendentes e por $d(T_i)$ o diâmetro de cada árvore. Então*

$$\sigma^+, \sigma \geq \left\lfloor \frac{g}{2} \right\rfloor + \sum_{i=1}^t \left\lfloor \frac{d(T_i) + 1}{2} \right\rfloor. \quad (3.20)$$

Demonstração. Removendo todas as arestas que ligam os vértices do ciclo de G às árvores pendentes de G , obtemos um subgrafo formado pela união disjunta das árvores pendentes T_i e do ciclo de G . Lembrando que o comprimento do maior caminho contido em uma árvore é igual ao diâmetro da árvore acrescido de uma unidade, podemos aplicar a Proposição 2.12, no caso da laplaciana sem sinal (para σ^+) e no caso da laplaciana (para σ), a cada uma das árvores T_i , obtendo dessa forma que o número σ é no mínimo $\sum_{i=1}^t \left\lfloor \frac{d(T_i)+1}{2} \right\rfloor$. Podemos obter ainda mais um caminho contido em G (além dos que já estão contidos em cada uma das árvores T_i), de comprimento igual à g , pela remoção de uma aresta do ciclo de G (maior caminho contido no ciclo), concluindo assim o resultado. \square

Esse resultado nos fornece uma caracterização bem interessante dos números σ^+ e σ , uma vez que, quanto maior é o diâmetro das árvores pendentes T_i ou quanto maior é a cintura g , maior serão os números σ^+ e σ . Portanto, para que tenhamos $\sigma^+ \geq 9$ ou $\sigma \geq 9$, é suficiente que o grafo G contenha, por exemplo, uma árvore pendente de diâmetro maior ou igual a 17 ou contenha um ciclo de cintura maior ou igual a 18. Note que os vértices pendentes do ciclo de G não contribuem para aumentar o valor de σ , uma vez que o diâmetro $d(T_i)$ dessas árvores pendentes é zero.

Exemplo 3.11. *Aplicando a Proposição 3.10 ao grafo da Figura 3.3, obtemos nesse caso,*

$$\sigma, \sigma^+ \geq \left\lfloor \frac{7}{2} \right\rfloor + \left(\left\lfloor \frac{3+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{3+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{2+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{1+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{0+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{0+1}{2} \right\rfloor \right) = 9,$$

onde as parcelas entre parênteses representam o diâmetro de cada uma das 6 árvores pendentes do grafo dado.

Esse é um exemplo de grafo que possui energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor ou igual a energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) do grafo $H(24)$, uma vez que tal grafo se encaixa na hipótese do Teorema 3.6 (respectivamente, Teorema 3.5).

Note que, em alguns casos, essa não é a melhor maneira de desconectar o grafo G se estamos interessados em obter um valor maior de σ (ou σ^+). A proposição anterior separa o grafo unicíclico em T_i árvores mais o ciclo de G , para então aplicar a Proposição 2.12 a cada uma dessas partes. No exemplo a seguir vemos que esta não é a melhor maneira de desconectar o grafo dado, pois existe uma separação que nos fornece um valor maior para a cota do número σ (e σ^+). De qualquer forma, a Proposição 3.10 nos fornece uma caracterização geral, enquanto grafos como o do exemplo abaixo precisam ser analisados caso a caso.

Exemplo 3.12. *Considere o grafo dado pela Figura 3.4. Pela Proposição 3.10 obtemos a seguinte cota para os números σ e σ^+*

$$\sigma, \sigma^+ \geq \left\lfloor \frac{7}{2} \right\rfloor + \left(\left\lfloor \frac{4+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{2+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{1+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{0+1}{2} \right\rfloor \right) = 7,$$

onde as parcelas entre parênteses representam o diâmetro de cada uma das 4 árvores pendentes do grafo dado.

No entanto, se removermos as arestas $\{v_2, v_3\}$, $\{v_4, v_5\}$ e $\{v_6, v_7\}$, obtemos três componentes de diâmetro 7, 5 e 3. Aplicando a Proposição 2.12 à cada uma dessas componentes, obtemos $\sigma, \sigma^+ \geq 9$. Então, utilizando a Proposição 3.10, não conseguiríamos concluir que o grafo dado tem energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor do que a energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) do grafo $H(19)$. Mas utilizando outro artifício é possível concluir que tal grafo tem energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor

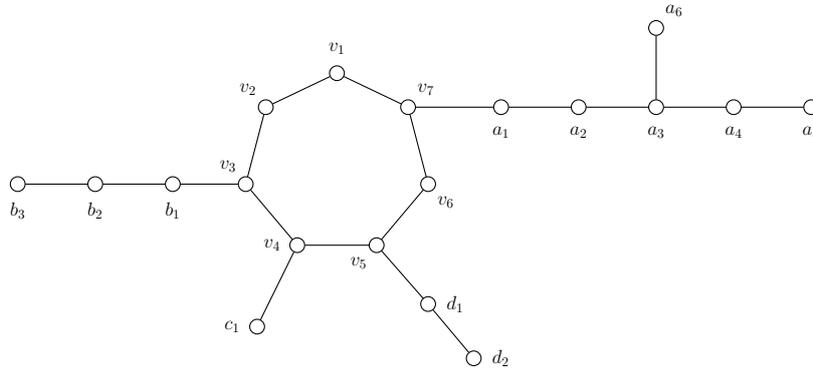


Figura 3.4: Grafo G com cintura $g = 7$ e 4 árvores pendentes

do que a energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) de $H(19)$, tudo isso baseado no Teorema 3.6 (respectivamente, Teorema 3.5).

4 GRAFOS THRESHOLD

Neste capítulo, trabalharemos com a classe de grafos threshold. Existem diversas maneiras equivalentes de se definir um grafo threshold, por isso usaremos aqui a mais conveniente para os nossos propósitos e faremos algumas observações em relação às outras caracterizações. Posteriormente às formalidades iniciais, veremos alguns resultados nos quais trazemos propriedades dos autovalores laplacianos sem sinal dos grafos threshold. Esses grafos serão utilizados no intuito de provar a conjectura a seguir, a qual formulamos durante o nosso estudo.

Conjectura 4.1. *O grafo de ordem n com maior energia laplaciana sem sinal é um grafo split completo formado por um conjunto independente de $\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ vértices e por uma clique de $\lfloor \frac{n+1}{3} \rfloor$ vértices.*

Essa conjectura foi confirmada computacionalmente na classe dos grafos threshold com $n \leq 31$ vértices. Na seção 4.2 provaremos que a conjectura é verdadeira na classe dos grafos split completos com n vértices.

Posteriormente, na seção 4.3, determinaremos algumas classes de grafos cuja energia laplaciana sem sinal é menor ou igual a energia laplaciana sem sinal do grafo candidato (grafo split completo citado na Conjectura 4.1). Em particular, provaremos que todas as árvores, todos os grafos unicíclicos e todos os grafos bicíclicos com n vértices têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Provaremos também condições sobre o valor de c para que o grafo c -cíclico com n vértices tenha energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Além disso, encontramos também algumas condições envolvendo o número de arestas e o número de autovalores laplacianos sem sinal menores ou iguais ao grau médio de modo que o grafo em questão satisfaça a conjectura.

Os resultados deste capítulo fazem parte de nosso trabalho [45].

4.1 Definição e propriedades iniciais

Os grafos threshold foram introduzidos em 1977 por Chvátal e Haemers [8]. Talvez a referência mais completa sobre os grafos threshold seja o livro de Mahadev e Peled [41], onde podem ser encontradas as caracterizações apresentadas aqui, além de outras propriedades dos grafos threshold. Em termos de propriedades espectrais dos grafos threshold, podemos citar [32, 36, 37, 52]. Uma das caracterizações dos grafos threshold é através de sequências binárias, a qual adotaremos como definição. Essa caracterização é útil pois permite definir o grafo threshold através de um processo recursivo.

Definição 4.2. *Um grafo G com n vértices é um grafo threshold se ele pode ser definido através de uma sequência binária da seguinte forma. Dada uma sequência $(a_i) = a_1 a_2 \dots a_n$ de 0's e 1's, o grafo threshold associado a (a_i) é um grafo de n vértices construído recursivamente, começando com um grafo vazio, e para cada $i = 1, \dots, n$, uma das seguintes operações é realizada*

- *adição de um vértice isolado, caso $a_i = 0$;*
- *adição de um vértice adjacente a todos os vértices anteriores (ou seja, um vértice dominante), caso $a_i = 1$.*

É importante fazer a seguinte observação: não existe diferença na construção do grafo threshold se considerarmos a_1 igual a 0 ou 1, mas, para simplificar a notação futura, consideraremos $a_1 = a_2$ (embora a maioria das referências utilize $a_1 = 0$). Além disso, note que, se $a_n = 1$, o grafo considerado será conexo, e se $a_n = 0$ o grafo será desconexo, A Figura 4.1 representa um grafo threshold cuja sequência binária é $(a_i) = 110011$.

Outro fato interessante é que, com a hipótese de que $a_1 = a_2$, dois grafos threshold são isomorfos se, e somente se, eles são codificados pela mesma sequência.

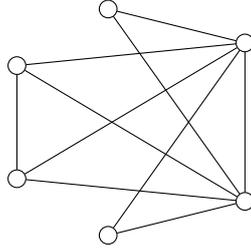


Figura 4.1: Grafo threshold com sequência $(a_i) = 110011$

Um grafo threshold pode também ser representado através de uma *estrutura de blocos* da seguinte maneira: $(b_i^{s_i}) := b_1^{s_1} \dots b_r^{s_r}$ onde cada $b_k \in \{0, 1\}$ e $s_k \in \mathbb{N}$ representa o número de repetições do dígito b_k , para $k = 1, \dots, r$. Além disso, a sequência b_k é alternante, isto é, $b_k + b_{k+1} = 1$, para $k = 1, \dots, r - 1$, e todos os vértices construídos pelo dígito do bloco k possuem o mesmo grau, que denotaremos por p_k . Por exemplo, a sequência binária 00111011 pode ser escrita como $0^2 1^3 0^1 1^2$ com grau dos blocos $p_1 = 5$, $p_2 = 6$, $p_3 = 2$ e $p_4 = 7$.

Veremos a seguir um resultado que nos permite determinar diretamente uma grande quantidade de autovalores laplacianos sem sinal de um grafo threshold através das repetições dos dígitos 0 ou 1 na sequência binária. É possível determinar $n - r$ autovalores laplacianos sem sinal de um grafo threshold cuja sequência binária é dada no modo $b_1^{s_1} \dots b_r^{s_r}$.

Teorema 4.3. [24] *Seja G um grafo threshold com n vértices, com sequência binária em blocos dada por $b_1^{s_1} \dots b_r^{s_r}$ e com graus dos blocos iguais a p_k , com $k = 1, \dots, r$. Para $k \in \{1, \dots, r\}$, $p_k - b_k$ é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $s_k - 1$.*

Além disso, ainda conforme Fritscher e Trevisan [24], os outros r autovalores laplacianos sem sinal de G são os autovalores da matriz

$$\begin{bmatrix} p_1 + b_1(s_1 - 1) & b_2\sqrt{s_1s_2} & b_3\sqrt{s_1s_3} & \dots & b_r\sqrt{s_1s_r} \\ b_2\sqrt{s_1s_2} & p_2 + b_2(s_2 - 1) & b_3\sqrt{s_2s_3} & \dots & b_r\sqrt{s_2s_r} \\ b_3\sqrt{s_1s_3} & b_3\sqrt{s_2s_3} & p_3 + b_3(s_3 - 1) & \dots & b_r\sqrt{s_3s_r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_r\sqrt{s_1s_r} & b_r\sqrt{s_2s_r} & b_r\sqrt{s_3s_r} & \dots & p_r + b_r(s_r - 1) \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Esses resultados só fazem sentido no caso em que pelo menos um dos blocos da sequência binária de G tem tamanho maior ou igual a 2, ou seja, $s_i \geq 2$, para algum $i \in \{1, 2, \dots, r\}$. De fato, se $s_1 = s_2 = \dots = s_r = 1$, então $r = n$ e o Teorema 4.3 não determina nenhum autovalor laplaciano sem sinal de G . Além disso, neste caso a matriz em (4.1) é $L^+(G)$.

Exemplo 4.4. *Considere o grafo threshold G dado pela sequência binária 0^21^301 . Vamos identificar os elementos necessários para determinar os autovalores laplacianos sem sinal que são dados pelo Teorema 4.3 e construir a matriz (4.1). Temos que $r = 4$ e*

$$b_1 = 0, \quad b_2 = 1, \quad b_3 = 0 \quad e \quad b_4 = 1,$$

$$s_1 = 2, \quad s_2 = 3, \quad s_3 = 1 \quad e \quad s_4 = 1,$$

$$p_1 = 4, \quad p_2 = 5, \quad p_3 = 1 \quad e \quad p_4 = 6.$$

Pelo Teorema 4.3, $p_1 - b_1 = 4$ é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $s_1 - 1 = 1$ e $p_2 - b_2 = 4$ é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade pelo menos $s_2 - 1 = 2$. Para os outros dois blocos, não temos autovalores determinados pelo Teorema 4.3, pois $s_3 = s_4 = 1$. Portanto, 4 é autovalor laplaciano sem sinal de G com multiplicidade 3 e os outros autovalores

laplacianos sem sinal de G são os autovalores da matriz

$$\begin{bmatrix} 4 + 0(2 - 1) & 1\sqrt{2 \cdot 3} & 0\sqrt{2 \cdot 1} & 1\sqrt{2 \cdot 1} \\ 1\sqrt{2 \cdot 3} & 5 + 1(3 - 1) & 0\sqrt{3 \cdot 1} & 1\sqrt{3 \cdot 1} \\ 0\sqrt{2 \cdot 1} & 0\sqrt{3 \cdot 1} & 1 + 0(1 - 1) & 1\sqrt{1 \cdot 1} \\ 1\sqrt{2 \cdot 1} & 1\sqrt{3 \cdot 1} & 1\sqrt{1 \cdot 1} & 6 + 1(1 - 1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{6} & 7 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{3} & 1 & 6 \end{bmatrix}.$$

4.2 A energia laplaciana sem sinal do grafo split completo

Nesta seção, iremos calcular a energia laplaciana sem sinal dos grafos split completos e provaremos qual é o grafo split completo com a maior energia laplaciana sem sinal. A principal razão para estarmos estudando tal classe de grafos é que conjecturamos que o grafo candidato a ter maior energia laplaciana sem sinal dentre todos os grafos com n vértices pertence a essa classe.

Conforme experimentos computacionais realizados com a ajuda do Professor João Batista Carvalho, foi constatado que, na classe dos grafos threshold, é um grafo split completo que possui a maior energia laplaciana sem sinal para todos os valores de $n \leq 31$. Os experimentos envolveram o cálculo do espectro dos grafos threshold, conseguindo dessa forma calcular as energias laplaciana sem sinal dos grafos com determinado número de vértices. Posteriormente, realizou-se a comparação entre todos esses valores para encontrar qual era o grafo threshold com a maior energia laplaciana sem sinal. Como o processo se torna extenuante conforme o número de vértices aumenta, tais experimentos não puderam ser estendidos para valores maiores de n .

Conforme definimos no Capítulo 2, um grafo G com $n \geq 2$ vértices é split completo se G é formado por um conjunto independente de k vértices e uma clique com $n - k$ vértices, com $k \in \{1, \dots, n\}$, onde todos os k vértices do conjunto independente são adjacentes aos $n - k$ vértices da clique. Além disso, o grafo split completo com $n \geq 2$ vértices é um grafo threshold com sequência binária dada por

$0^k 1^{n-k}$. Denotaremos tais grafos por $G(k)$, $k \in \{1, \dots, n\}$. A Figura 4.2 representa um grafo $G(k)$.

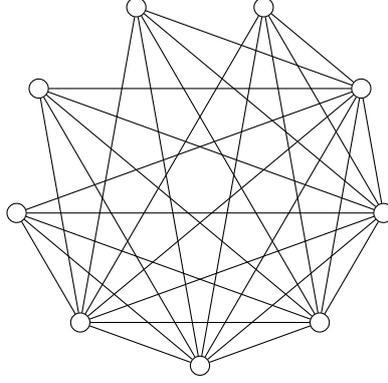


Figura 4.2: Grafo $G(4)$

Iremos inicialmente calcular a energia laplaciana sem sinal dos grafos split completos.

Teorema 4.5. *A energia laplaciana sem sinal do grafo split completo $G(k)$ de ordem $n \geq 2$, com $k \in \{1, \dots, n\}$, é dada por:*

$$LE^+(G(k)) = \begin{cases} \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{2k^2 - 2kn - 2k + n^2}{n}, & \text{se } k < \frac{1 + \sqrt{4n+1}}{2}. \\ \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{2nk^2 - 2kn - 2k^3 + 2k^2 + 2n - n^2}{n}, & \text{se } k \geq \frac{1 + \sqrt{4n+1}}{2}. \end{cases}$$

Demonstração. Vamos primeiramente calcular os autovalores laplacianos sem sinal de $G(k)$. Os vértices correspondentes ao bloco 0^k têm todos o mesmo grau $n-k$ e os vértices correspondentes ao bloco 1^{n-k} têm todos o mesmo grau $n-1$. Pelo Teorema 4.3, $n-k$ e $n-2$ são autovalores laplacianos sem sinal de $G(k)$ com multiplicidades $k-1$ e $n-k-1$, respectivamente.

Os outros dois autovalores laplacianos sem sinal são os autovalores da matriz (4.1) que, neste caso, é dada por

$$\begin{bmatrix} n-k & \sqrt{k(n-k)} \\ \sqrt{k(n-k)} & 2n-k-2 \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

os quais podem ser facilmente calculados e são iguais a

$$l_1 = l_1(k) := \frac{3n - 2k - 2 - \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)}}{2}$$

e

$$l_2 = l_2(k) := \frac{3n - 2k - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)}}{2}.$$

(Usaremos a notação $l_1(k)$ ou $l_2(k)$ quando for necessária a menção de que os autovalores l_1 e l_2 são funções de k .)

Vamos agora calcular o grau médio do grafo $G(k)$ e, logo após, localizar os autovalores que são maiores e os que são menores que o grau médio. Temos que

$$\begin{aligned} \bar{d} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i \\ &= \frac{1}{n} \cdot (k(n-k) + (n-k)(n-1)) \\ &= \frac{n^2 - n - k^2 + k}{n}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Se $k = 1$, então o grafo é $G(1) = K_n$, cujo espectro laplaciano sem sinal é $\{(n-2)^{(n-1)}, (2n-2)^{(1)}\}$. Neste caso, $\bar{d} = n-1$ e, utilizando a Proposição 2.22 temos que

$$\begin{aligned} LE^+(G(1)) &= 2 \cdot (2n-2) - 2 \cdot (n-1) \cdot 1 \\ &= 2n-2. \end{aligned}$$

Consideremos agora o caso em que $k \geq 2$. É possível verificar que $l_1 < n-k \leq \bar{d}$ e $\bar{d} \leq l_2$. Já para o autovalor $n-2$, temos duas possibilidades:

- (i) Se $k^2 < n+k$, temos que $\bar{d} > n-2$;
- (ii) Se $k^2 \geq n+k$, temos que $\bar{d} \leq n-2$.

Ou seja, precisamos separar o cálculo da energia laplaciana sem sinal de $G(k)$ em dois casos: (i) $n-2 < \bar{d}$ e (ii) $n-2 \geq \bar{d}$.

(i) Se $n - 2 < \bar{d}$, usando a Proposição 2.22 e lembrando que $\bar{d} = \frac{n^2 - n - k^2 + k}{n}$ e $l_2 = \frac{3n - 2k - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)}}{2}$, obtemos

$$\begin{aligned} LE^+(G(k)) &= 2l_2 - 2\bar{d} \\ &= 3n - 2k - 2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} - \frac{2n^2 - 2n - 2k^2 + 2k}{n} \\ &= \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{n^2 + 2k^2 - 2nk - 2k}{n}. \end{aligned}$$

Está provado dessa forma o caso (i). O caso (ii) é provado de modo análogo, por isso o faremos aqui de modo mais reduzido. Se $n - 2 \geq \bar{d}$, utilizando agora a Proposição 2.23, temos

$$\begin{aligned} LE^+(G(k)) &= 2k\bar{d} - 2(l_1 + (k-1) \cdot (n-k)) \\ &= 2k \frac{n^2 - n - k^2 + k}{n} - 3n + 2k + 2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \\ &\quad - 2nk + 2k^2 + 2n - 2k \\ &= \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{2nk^2 - 2kn - 2k^3 + 2k^2 + 2n - n^2}{n}. \end{aligned}$$

□

Note que, em ambos os casos acima poderíamos ter utilizado tanto a Proposição 2.22, quanto a Proposição 2.23. O resultado obtido seria exatamente o mesmo.

Agora que já sabemos qual é a energia laplaciana sem sinal de um grafo $G(k)$, vamos provar o seguinte resultado.

Teorema 4.6. *Se $n < 6$, o grafo split completo com n vértices que tem a maior energia laplaciana sem sinal é o grafo completo $K_n = G(1)$. Se $n \geq 6$, o grafo split completo com n vértices que tem a maior energia laplaciana sem sinal é $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Vamos inicialmente provar alguns lemas auxiliares a fim de facilitar a demonstração do teorema. Como a energia laplaciana sem sinal do grafo $G(k)$ possui

dois possíveis valores conforme o valor de k , utilizaremos a seguinte notação

$$LE_1^+(k) := \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{n^2 + 2k^2 - 2kn - 2k}{n}$$

e

$$LE_2^+(k) := \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{2nk^2 - 2kn - 2k^3 + 2k^2 + 2n - n^2}{n}.$$

Lembrando que, nos resultados a seguir, vamos considerar $LE_1^+(k)$ e $LE_2^+(k)$ como funções que assumem valores em todos os números reais maiores ou iguais a zero, mas na verdade estamos somente interessados nos casos em que k é um número natural.

Lema 4.7. *O autovalor laplaciano sem sinal $l_1(k) = \frac{3n-2k-2-\sqrt{(n-2)^2+4k(n-k)}}{2}$ de $G(k)$ é não-crescente como função de k (com $1 \leq k \leq n$).*

Demonstração. Precisamos ver sob que condições teremos $l_1(k-1) - l_1(k) \geq 0$. Para que isso ocorra, devemos ter

$$2 + \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} \geq \sqrt{(n-2)^2 + 4(k-1)(n-k+1)}$$

o que é equivalente a

$$\sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + n - 2k + 2 \geq 0.$$

Se $k = n$, temos que a desigualdade acima é válida. Consideremos, portanto, $k \leq n - 1$. Neste caso, $n - k + 2 \geq 0$ e basta provarmos que

$$\sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} - k \geq 0,$$

mas essa desigualdade é equivalente a

$$n^2 - 4n + 4nk - 5k^2 + 4 \geq 0$$

que pode ser escrita como

$$(n-k)(n-k-4) + 4 + 2k(3n-3k-2) \geq 0.$$

Agora, note que $(n - k)(n - k - 4) + 4 \geq 0$ e $2k(3n - 3k - 2) \geq 0$, donde a desigualdade acima é verdadeira para qualquer valor de $k \leq n - 1$, provando que $l_1(k)$ é não-crescente em k . \square

Lema 4.8. *Se $n \geq 6$, a função $LE_1^+(k)$ atinge seu máximo em $k = 1$.*

Demonstração. Primeiramente, plotamos o gráfico de $LE_1^+(k)$ para alguns valores de n e obtemos o comportamento apresentado no gráfico da Figura 4.3. Note que, o valor máximo da função $LE_1^+(k)$ realmente parece ocorrer em $k = 1$. A seguir confirmaremos tal fato.

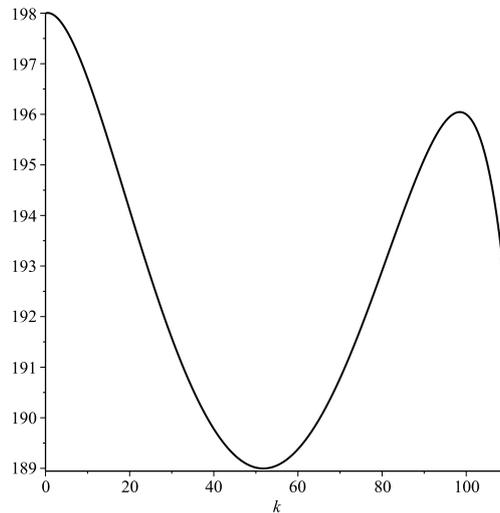


Figura 4.3: Gráfico da função $LE_1^+(k)$ com $n = 100$

Para $k = 1$, o grafo $G(1)$ é o grafo completo K_n com n vértices, o qual sabemos que satisfaz $LE_1^+(K_n) = 2n - 2$. Agora, se $k \geq 2$, precisamos ver sob que condições teremos

$$LE_1^+(k) \leq 2n - 2,$$

ou seja,

$$\sqrt{(n - 2)^2 + 4k(n - k)} + \frac{n^2 + 2k^2 - 2kn - 2k}{n} \leq 2n - 2.$$

Fazendo as simplificações necessárias, chegamos que a desigualdade acima é equivalente à desigualdade

$$4k(k-1)(-k^2 + (2n+1)k - n^2 - 2n) \leq 0.$$

Como $k \geq 2$, a desigualdade acima é válida se, e somente se,

$$k^2 - (2n+1)k + n^2 + 2n \geq 0.$$

A equação do segundo grau em k à esquerda não possui raízes reais, donde a desigualdade desejada é sempre verdadeira, para qualquer $2 \leq k \leq n$. \square

Para a função $LE_2^+(k)$, inicialmente plotamos o seu gráfico para alguns valores de n e obtemos o comportamento apresentado no gráfico da Figura 4.4, o qual plotamos com $n = 100$. Note que, o valor máximo da função $LE_2^+(k)$ parece ocorrer para k entre 60 e 70, conforme o que esperamos, uma vez que $\lceil \frac{2 \cdot 100 - 1}{3} \rceil = 67$. Nos lemas a seguir confirmaremos tal fato.

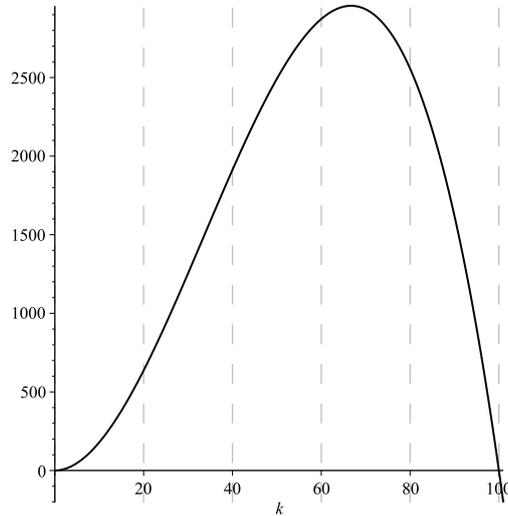


Figura 4.4: Gráfico da função $LE_2^+(k)$ com $n = 100$

Lema 4.9. *Se $n \geq 6$, temos que $LE_2^+(k)$ é não-decrescente como função de k no intervalo $[2, \frac{2n-1}{3}]$.*

Demonstração. Vamos reescrever a fórmula para $LE_2^+(k)$ de modo a facilitar as contas. Olhando para a demonstração do Teorema 4.5, usaremos uma fórmula para $LE_2^+(k)$ na qual não substituímos o valor de $l_1(=l_1(k))$, a qual é a seguinte

$$\begin{aligned} LE_2^+(k) &= 2k \cdot \frac{n^2 - n - k^2 + k}{n} - 2l_1(k) - 2nk + 2k^2 + 2n - 2k \\ &= \frac{-2nl_1(k) - 2k^3 - 4nk + 2k^2 + 2nk^2 + 2n^2}{n}. \end{aligned}$$

Agora, substituindo k por $k - 1$ na fórmula acima obtemos

$$LE_2^+(k - 1) = \frac{-2nl_1(k - 1) - 2k^3 + 8k^2 - 10k - 8nk + 6n + 2nk^2 + 2n^2 + 4}{n}.$$

Para verificar sob que condições teremos $LE_2^+(k)$ não-decrescente, devemos encontrar os valores de k para os quais $LE_2^+(k) - LE_2^+(k - 1) \geq 0$, ou seja, devemos encontrar os valores de k para os quais

$$\frac{2n(l_1(k - 1) - l_1(k)) - 6k^2 + 10k + 4nk - 6n - 4}{n} \geq 0.$$

A desigualdade acima é equivalente a

$$2n(l_1(k - 1) - l_1(k)) - 6k^2 + (4n + 10)k - 6n - 4 \geq 0.$$

Pelo Lema 4.7 temos que $l_1(k - 1) - l_1(k) \geq 0$, portanto para verificar quando a desigualdade acima é verdadeira, precisamos verificar quando teremos

$$-6k^2 + (4n + 10)k - 6n - 4 \geq 0. \quad (4.4)$$

As raízes da equação do segundo grau em k , $-6k^2 + (4n + 10)k - 6n - 4 = 0$, são dadas por

$$k_{1,2} = \frac{2n + 5 \pm \sqrt{4n^2 - 16n + 1}}{6}, \quad (k_1 < k_2).$$

Fazendo a análise de sinais, temos que a inequação (4.4) é verdadeira se, e somente se

$$k_1 \leq k \leq k_2.$$

É possível provar que, se $n \geq 5$, então $k_1 < 2$ e $k_2 > \frac{2n-1}{3}$, provando assim, que se k está entre 2 e $\frac{2n-1}{3}$, $LE_2^+(k)$ é não-decrescente em k . \square

Lema 4.10. *Se $n \geq 6$, temos que $LE_2^+(k)$ é não-crescente como função de k no intervalo $[\frac{2n-1}{3} + 2, n]$.*

Demonstração. Vamos utilizar as mesmas relações obtidas no lema anterior e para verificar sob que condições teremos $LE_2^+(k)$ não-crescente, devemos encontrar os valores de k para os quais $LE_2^+(k) - LE_2^+(k-1) \leq 0$, ou seja, devemos encontrar os valores de k para os quais

$$\frac{2n(l_1(k-1) - l_1(k)) - 6k^2 + 10k + 4nk - 6n - 4}{n} \leq 0.$$

A desigualdade acima é equivalente a

$$2n(l_1(k-1) - l_1(k) - 3) - 6k^2 + (4n+10)k - 4 \leq 0. \quad (4.5)$$

Vamos provar inicialmente que $l_1(k-1) - l_1(k) - 3 < 0$, o que é equivalente à

$$\sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} < 4 + \sqrt{(n-2)^2 + 4(k-1)(n-k+1)}.$$

Elevando ambos os lados ao quadrado e fazendo as devidas simplificações, a desigualdade acima se torna

$$20k^2 - (20n+20)k - 3n^2 + 26n + 9 < 0,$$

que é uma inequação do segundo grau em k , a qual é satisfeita se, e somente se,

$$k_1 := \frac{5n+5 - 2\sqrt{10n^2 - 20n - 5}}{10} < k < \frac{5n+5 + 2\sqrt{10n^2 - 20n - 5}}{10} := k_2.$$

Agora, se $n \geq 4$ é possível provar que $k_1 < 1$ e $k_2 > n$, ou seja, para qualquer valor de k entre 1 e n teremos $l_1(k-1) - l_1(k) - 3 < 0$.

Voltando em (4.5) resta verificar quais são as condições necessárias para que tenhamos

$$-6k^2 + (4n + 10)k - 4 \leq 0. \quad (4.6)$$

As raízes da equação do segundo grau em k , $-6k^2 + (4n + 10)k - 4 = 0$, são

$$k_{3,4} := \frac{2n + 5 \pm \sqrt{4n^2 + 20n + 1}}{6}, \quad (k_3 < k_4),$$

ou seja, a inequação (4.6) é satisfeita se, e somente se, $k \leq k_3$ ou $k \geq k_4$. Mas, é possível provar que, para qualquer valor de n , temos $k_3 < 1$ e $k_4 < \frac{2n-1}{3} + 2$. Portanto, se $k \geq \frac{2n-1}{3} + 2$ a desigualdade (4.5) é satisfeita, donde $LE_2^+(k)$ é não-crescente para esses valores de k . \square

Lema 4.11. *Se $n \geq 6$, a função $LE_2^+(k)$ atinge seu máximo em $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$.*

Demonstração. Pelos Lemas 4.9 e 4.10, o máximo ocorre para algum ponto no intervalo

$$I = \left[\frac{2n-1}{3} - 1, \frac{2n-1}{3} + 3 \right].$$

Aqui, precisamos levar em conta que k assume somente valores inteiros (o que não era levado em conta nos lemas anteriores), e por isso, precisamos adicionar um ponto acima e um abaixo no intervalo I . Agora, para cada um dos possíveis valores inteiros no intervalo I , dependendo do valor de n , vamos calcular $LE_2^+(k)$ e verificar por comparação qual é o valor máximo. Conforme o valor de n uma, e somente uma, das três seguintes possibilidades é satisfeita

- (i) $\frac{2n-1}{3}$ é um número inteiro;
- (ii) $\frac{2n}{3}$ é um número inteiro;
- (iii) $\frac{2n+1}{3}$ é um número inteiro.

Para cada uma dessas possibilidades precisamos verificar quais são os números inteiros pertencentes ao intervalo I e, para cada um desses números, calcular o valor de $LE_2^+(k)$. Por fim, resta comparar esses valores e verificar qual é o maior. Por exemplo, se ocorre (i) acima, os valores inteiros pertencentes ao intervalo I são

$$\frac{2n-1}{3} - 1, \quad \frac{2n-1}{3}, \quad \frac{2n-1}{3} + 1, \quad \frac{2n-1}{3} + 2 \quad \text{e} \quad \frac{2n-1}{3} + 3.$$

Agora, calcula-se o valor de $LE_2^+(k)$ para cada um desses valores

$$\begin{aligned} LE_2^+\left(\frac{2n-4}{3}\right) &= \frac{1}{27} \cdot \left(8n^2 - 39n - 66 + 9\sqrt{17n^2 - 20n - 28} + \frac{224}{n}\right) \\ LE_2^+\left(\frac{2n-1}{3}\right) &= \frac{1}{27} \cdot \left(8n^2 - 39n + 42 + 9\sqrt{17n^2 - 32n + 32} + \frac{8}{n}\right) \\ LE_2^+\left(\frac{2n+2}{3}\right) &= \frac{1}{27} \cdot \left(8n^2 - 39n + 42 + 9\sqrt{17n^2 - 44n + 20} + \frac{8}{n}\right) \\ LE_2^+\left(\frac{2n+5}{3}\right) &= \frac{1}{27} \cdot \left(8n^2 - 39n - 66 + 9\sqrt{17n^2 - 56n - 64} - \frac{100}{n}\right) \\ LE_2^+\left(\frac{2n+8}{3}\right) &= \frac{1}{27} \cdot \left(8n^2 - 39n - 282 + 9\sqrt{17n^2 - 68n - 220} - \frac{640}{n}\right). \end{aligned}$$

Comparando esses valores, é possível verificar que $LE_2^+\left(\frac{2n-1}{3}\right)$ é o maior de todos, se $n \geq 5$. Procedendo de modo análogo para os casos (ii) e (iii) obtemos, respectivamente, que $LE_2^+\left(\frac{2n}{3}\right)$ e $LE_2^+\left(\frac{2n+1}{3}\right)$ são máximos, provando assim que $LE_2^+(k)$ atinge seu máximo em $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$. \square

Agora, combinando os Lemas 4.8 e 4.11 demonstramos facilmente o Teorema 4.6.

Demonstração. (Teorema 4.6) Para demonstrar o resultado para $n < 6$, calculamos a energia laplaciana sem sinal dos 10 possíveis grafos split completos $G(k)$ com $n < 6$ vértices e verificamos que o grafo completo $G(1)$ é o grafo com maior energia laplaciana sem sinal para cada um dos valores de n .

Para $n \geq 6$, como $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ satisfaz $k \geq \frac{1+\sqrt{4n+1}}{2}$, basta provarmos que $LE_2^+(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$ é maior do que $2n - 2$, que é o maior valor que $LE_1^+(k)$ pode assumir, o que finaliza a demonstração do resultado. Mas isso pode ser verificado facilmente, por comparação direta, nos casos em que $\frac{2n-1}{3}$, $\frac{2n}{3}$ ou $\frac{2n+1}{3}$ é inteiro. \square

4.3 Algumas classes de grafos que satisfazem a conjectura

Nesta seção vamos determinar algumas classes de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Dado um grafo G com n vértices e m arestas, nosso objetivo é determinar sob que condições teremos $LE^+(G) \leq LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$. Para isso, a nossa estratégia é encontrar uma cota superior “ a ” para $LE^+(G)$ e uma cota inferior “ b ” para $LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$ e, posteriormente comparar os valores a e b a fim de verificar quando $a \leq b$ (veja Figura 4.5).

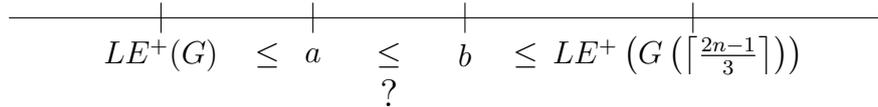


Figura 4.5: Comparando os valores $LE^+(G)$ e $LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$

Pela Proposição 2.23, temos que

$$LE^+(G) = 2\alpha^{\bar{d}} - 2 \sum_{q_i \leq \bar{d}} q_i.$$

Como a matriz L^+ é positiva semidefinida, temos que $q_i \geq 0$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$, donde

$$LE^+(G) \leq 2\alpha^+\bar{d} - 2 \sum_{q_i \leq \bar{d}} 0 = 2\alpha^+\bar{d}.$$

Obtemos dessa forma a cota $a = 2\alpha^+\bar{d}$.

Na Seção 4.2 provamos que, se $n \geq 6$, a energia laplaciana sem sinal do grafo $G(k)$, $k = 1, \dots, n$, é máxima para $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ e, neste caso, esta energia é dada por

$$L(k) := LE_2^+(k) = \sqrt{(n-2)^2 + 4k(n-k)} + \frac{2nk^2 - 2kn - 2k^3 + 2k^2 + 2n - n^2}{n}.$$

Dado $n \geq 6$, note que $k = \lceil \frac{2n-1}{3} \rceil$ pode ser igual a $\frac{2n-1}{3}$, $\frac{2n}{3}$ ou $\frac{2n+1}{3}$, e para estes valores, a função $L(k)$ definida acima, é dada por

$$\begin{aligned} L\left(\frac{2n-1}{3}\right) &= \frac{8n^3 + 9n\sqrt{17n^2 - 32n + 32} - 39n^2 + 42n + 8}{27n}, \\ L\left(\frac{2n}{3}\right) &= \frac{8n^2 + 9\sqrt{17n^2 - 36n + 36} - 39n + 54}{27} \quad e \\ L\left(\frac{2n+1}{3}\right) &= \frac{8n^3 + 9n\sqrt{17n^2 - 40n + 32} - 39n^2 + 54n + 4}{27n}. \end{aligned}$$

É fácil ver que

$$L\left(\frac{2n-1}{3}\right) \leq L\left(\frac{2n+1}{3}\right) \leq L\left(\frac{2n}{3}\right) \quad (4.7)$$

e, além disso,

$$\begin{aligned} L\left(\frac{2n-1}{3}\right) &= \frac{8n^3 + 9\sqrt{17n^2 - 32n + 32} - 39n^2 + 42n + 8}{27n} \\ &\geq \frac{8n^3 + 9\sqrt{16n^2 - 48n + 36} - 39n^2 + 42n + 8}{27n} \\ &= \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n}. \end{aligned}$$

Portanto, da relação (4.7), temos que

$$\frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n} \leq L\left(\frac{2n-1}{3}\right) \leq L\left(\left\lceil \frac{2n-1}{3} \right\rceil\right). \quad (4.8)$$

Obtemos dessa forma a cota $b = \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n}$. Portanto, estamos procurando condições sobre α^+ , m e n a fim de que tenhamos

$$2\alpha^+ \bar{d} \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n}$$

(veja Figura 4.6).

$$LE^+(G) \leq 2\alpha^+ \bar{d} \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n} \leq LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$$

?

Figura 4.6: Condições para verificar se $LE^+(G) \leq LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$

Substituindo \bar{d} por $\frac{2m}{n}$ na relação acima e isolando α^+ obtemos

$$\alpha^+ \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{108m} := f_1(n, m). \quad (4.9)$$

Provamos dessa forma o seguinte resultado.

Teorema 4.12. *Seja G um grafo com $n \geq 6$ vértices e m arestas, e denote por α^+ o número de autovalores laplacianos sem sinal de G que são menores ou iguais ao grau médio. Se*

$$\alpha^+ \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{108m},$$

então a energia laplaciana sem sinal de G é menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Exemplo 4.13. *Os grafos com número de vértices n , número de arestas m e número de autovalores laplacianos sem sinal menores ou iguais ao grau médio α^+ dados pela Tabela 4.1 são exemplos de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Número de vértices	Número de arestas	α^+
$n = 21$	$m = 50$	$\alpha^+ \leq 13$
$n = 21$	$m = 80$	$\alpha^+ \leq 8$
$n = 40$	$m = 150$	$\alpha^+ \leq 31$
$n = 40$	$m = 300$	$\alpha^+ \leq 15$
$n = 100$	$m = 1000$	$\alpha^+ \leq 73$
$n = 100$	$m = 1500$	$\alpha^+ \leq 49$
$n = 500$	$m = 20000$	$\alpha^+ \leq 462$
$n = 500$	$m = 30000$	$\alpha^+ \leq 308$

Tabela 4.1: Parâmetros n , m e α^+ de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato

Como $\alpha^+ \leq n$, se $f_1(n, m) \geq n$, qualquer grafo com n vértices e m arestas terá energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Mas, por (4.9), $f_1(n, m) \geq n$ se, e somente se,

$$m \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{108n}.$$

Com isso, provamos o seguinte resultado.

Teorema 4.14. *Seja G um grafo com $n \geq 6$ vértices e m arestas. Se*

$$m \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{108n} := f_2(n) \tag{4.10}$$

então a energia laplaciana sem sinal de G é menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Note que, para qualquer grafo G , o número de arestas m é no máximo igual a $\frac{n(n-1)}{2}$, e a expressão a direita em (4.10) é de ordem $\frac{2n^2}{27}$, donde o Teorema 4.14 implica que uma grande quantidade de grafos tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Exemplo 4.15. *Os grafos com número de vértices n e número de arestas m dados pela Tabela 4.2 são exemplos de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Número de vértices	Número de arestas
$n = 20$	$m \leq 28$
$n = 30$	$m \leq 65$
$n = 40$	$m \leq 117$
$n = 70$	$m \leq 360$
$n = 100$	$m \leq 737$
$n = 200$	$m \leq 2957$
$n = 500$	$m \leq 18504$
$n = 1000$	$m \leq 74046$

Tabela 4.2: Parâmetros n e m de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato

4.3.1 Árvores

Pela Proposição 2.6, temos que a energia laplaciana sem sinal de qualquer árvore é igual a energia laplaciana dessa árvore, uma vez que as árvores são grafos bipartidos. Portanto, o resultado a seguir é consequência direta dos resultados de [22].

Teorema 4.16. *Seja G uma árvore com n vértices. Então G tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Demonstração. Fritscher et al. [22] provaram que a estrela S_n com n vértices tem a maior energia laplaciana (por consequência, laplaciana sem sinal) dentre todas as árvores com n vértices. Além disso, a energia laplaciana (sem sinal) de S_n é dada

por

$$LE^+(S_n) = LE(S_n) = 2n - 4 + \frac{4}{n}.$$

Comparando esse valor com o lado esquerdo da expressão (4.8), temos que

$$2n - 4 + \frac{4}{n} \leq \frac{8n^3 - 3n^2 - 12n + 8}{27n}$$

se, e somente se, $n \geq 6$. Para $n < 6$, o resultado pode ser obtido por comparação direta. Isso prova que, dado n , qualquer árvore com n vértices tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$. \square

4.3.2 Grafos c -cíclicos

Um grafo c -cíclico G com n vértices é um grafo que possui exatamente $n + c - 1$ arestas, $c > 0$. Vamos ver agora algumas condições sobre c de modo que um grafo c -cíclico tenha energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato.

Usando o Teorema 4.14, precisamos verificar quando $n + c - 1 \leq f_2(n)$. É fácil obter o seguinte resultado.

Teorema 4.17. *Seja G um grafo c -cíclico com $n \geq 6$ vértices. Se*

$$c \leq \frac{8n^3 - 111n^2 + 96n + 8}{108n} \tag{4.11}$$

então G tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Exemplo 4.18. *Os grafos c -cíclicos com número de vértices n e valor de c dados pela Tabela 4.3 são exemplos de grafos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Número de vértices	Valor de c
$n = 20$	$c \leq 9$
$n = 30$	$c \leq 36$
$n = 40$	$c \leq 78$
$n = 70$	$c \leq 291$
$n = 100$	$c \leq 638$
$n = 200$	$c \leq 2758$
$n = 500$	$c \leq 18005$
$n = 1000$	$c \leq 73047$

Tabela 4.3: Parâmetros n e c de grafos c -cíclicos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato

Fixando agora o valor de c e deixando variável o valor de n , obtemos outros parâmetros para que um grafo c -cíclico com número de vértices n tenha energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.

Valor de c	Número de vértices
$c = 1$	$n \geq 14$
$c = 2$	$n \geq 15$
$c = 3$	$n \geq 16$
$c = 10$	$n \geq 20$
$c = 50$	$n \geq 33$
$c = 100$	$n \geq 44$
$c = 500$	$n \geq 90$
$c = 1000$	$n \geq 124$

Tabela 4.4: Parâmetros c e n de grafos c -cíclicos que têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato

Em particular, para grafos unicíclicos e bicíclicos temos os seguintes corolários.

Corolário 4.19. *Se G é um grafo unicíclico conexo com n vértices, então G tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Demonstração. Usando o Teorema 4.17 com $c = 1$, obtemos o resultados para $n \geq 14$. Se $n < 14$, na Proposição 3.4 encontramos quais são os grafos unicíclicos com a maior energia laplaciana sem sinal. Por comparação direta entre os valores dessas energias com a energia $LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$, provamos o resultado nesse caso. \square

Corolário 4.20. *Se G é um grafo bicíclico com n vértices, então G tem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal de $G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil)$.*

Demonstração. Usando o Teorema 4.17 com $c = 2$, o resultado segue no caso em que $n \geq 15$. Se $n < 15$, usando o software SAGE [50], encontramos os grafos com a maior energia laplaciana sem sinal dentre os grafos bicíclicos. A partir disso, por comparação direta desses valores com $LE^+(G(\lceil \frac{2n-1}{3} \rceil))$, obtemos o resultado neste caso. \square

5 CONCLUSÃO

Os artigos tratando da energia laplaciana sem sinal que já existiam até o momento em que começamos os estudos referentes a essa tese eram mais básicos, no sentido de que, ou tratavam principalmente de resultados equivalentes aos existentes para a energia laplaciana, ou relacionavam algumas propriedades das energias usual, laplaciana e laplaciana sem sinal de um grafo. Dessa forma, podemos afirmar que tal tese é um dos trabalhos pioneiros com enfoque principal na energia laplaciana sem sinal.

Neste trabalho estudamos, principalmente, a teoria extremal para o caso da energia laplaciana sem sinal, teoria essa que já é clássica quando se trata das outras energias associadas a um mesmo grafo.

Para se calcular a energia laplaciana sem sinal de um grafo é necessário calcular o espectro da matriz laplaciana sem sinal desse grafo. No entanto, como é sabido, não é nada fácil calcular tal espectro, uma vez que para isso é preciso encontrar as raízes de um polinômio de grau n , onde n é o número de vértices do grafo em questão.

Por essa razão, quando trabalhamos com a energia laplaciana sem sinal é mais comum e, algumas vezes mais fácil, se procurar por cotas inferiores ou superiores bem como determinar grafos extremais para tal parâmetro.

Nesse sentido, trabalhamos em um primeiro momento na classe de grafos unicíclicos conexos onde, além de determinarmos uma cota justa para a energia laplaciana sem sinal, também formulamos a conjectura de qual o grafo unicíclico conexo que possui a maior energia laplaciana sem sinal. Além disso, reforçamos tal conjectura provando que uma grande quantidade de grafos possui energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato.

Posteriormente verificamos que, com meras adaptações, os resultados obtidos para a energia laplaciana sem sinal também eram válidos para a energia laplaciana. Assim, também estudamos o problema extremal na classe dos grafos unicíclicos conexos para a energia laplaciana.

De fato, se um grafo G possui pelo menos 12 vértices e pelo menos 9 autovalores laplacianos (respectivamente, laplacianos sem sinal) maiores ou iguais ao grau médio, então G tem energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor do que a energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) do grafo candidato. Esses resultados acerca dos grafos unicíclicos deram origem ao artigo [13].

Ainda com relação ao problema extremal, estabelecemos a conjectura de qual é o grafo dentre todos os grafos com n vértices que possui a maior energia laplaciana sem sinal. Além disso, reforçamos tal conjectura provando que alguns grafos com determinada quantidade de vértices, de arestas, de autovalores menores que o grau médio e de ciclos possuem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. Em particular, provamos que as árvores, os grafos unicíclicos e bicíclicos têm energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato. O artigo [45] reúne esses resultados acerca da teoria extremal para a energia laplaciana sem sinal.

Existe muito trabalho para ser feito ainda, principalmente com relação ao problema geral. É preciso provar que outras classes de grafos possuem energia laplaciana sem sinal menor ou igual à energia laplaciana sem sinal do grafo candidato ou encontrar outras formas de provar que a conjectura é verdadeira. Na classe dos grafos unicíclicos, resta provar que os grafos que possuem até 9 autovalores laplacianos (respectivamente, laplacianos sem sinal) maiores ou iguais ao grau médio, possuem energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) menor ou igual à energia laplaciana (respectivamente, laplaciana sem sinal) do grafo candidato.

Além disso, nesse trabalho destacamos somente o problema extremal máximo. Com relação ao grafo que possui a menor energia laplaciana sem sinal dentre todos os grafos com determinado número de vértices, ou mesmo em classes mais restritas como, por exemplo, na classe dos grafos unicíclicos, nada foi estudado até o momento.

Como trabalhos futuros pretendemos estudar o problema extremal mínimo, bem como tentar outras técnicas para demonstrar os casos restantes no problema extremal máximo.

Espectro complementar de um grafo

Durante o último ano de doutorado, iniciamos o estudo do problema de autovalor complementar sob o ponto de vista da Teoria Espectral de Grafos. Dada uma matriz simétrica A de ordem n , o problema que consiste em encontrar um número real λ e um vetor $x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ satisfazendo

$$w = Ax - \lambda x \tag{5.1}$$

$$x \geq 0, w \geq 0 \tag{5.2}$$

$$x^T w = 0 \tag{5.3}$$

com $w \in \mathbb{R}^n$, é denominado *problema de autovalor complementar*. Se $\lambda \in \mathbb{R}$ e $x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ satisfazem o problema de autovalor complementar (5.1)-(5.3), λ é dito *autovalor complementar* e x é um *autovetor complementar* associado.

Note que, se $w = 0$ e não impomos condição sobre o vetor x , então o problema de autovalor complementar se reduz ao problema clássico de autovalor $Ax = \lambda x$.

No caso em que A é a matriz de adjacência de um grafo qualquer G , se λ satisfaz o problema de autovalor complementar (5.1)-(5.3), dizemos que λ é

um *autovalor complementar do grafo* G e o conjunto de todos os autovalores complementares distintos de um grafo G é chamado de *espectro complementar do grafo* G .

Um dos motivos pelos quais estamos interessados nesse problema foi exposto por Seeger em [48]. Segundo ele, o espectro complementar de um grafo G parece representar melhor um grafo em relação aos outros espectros clássicos associados a um grafo qualquer (espectro usual, espectro laplaciano, espectro laplaciano sem sinal...), uma vez que não existem pares coespectrais com relação ao espectro complementar para grafos com até 7 vértices ([48]). Além disso, baseados em alguns experimentos que estamos realizando, acreditamos que para grafos com 8 vértices também não existam pares coespectrais com relação ao espectro complementar.

Em Fernandes et al. [21] foi provado que o espectro complementar de G é formado pelos raios espectrais (maior autovalor da matriz de adjacência) dos subgrafos induzidos de G , sem contar as multiplicidades.

Se G é um grafo desconexo o raio espectral de G é o máximo dos raios espectrais de cada uma das componentes conexas de G , uma vez que o espectro de um grafo desconexo é a união do espectro das componentes conexas de G . Portanto, é suficiente considerar G um grafo conexo. Além disso, também é suficiente considerarmos somente os subgrafos induzidos conexos de G para o cálculo do espectro complementar de G , exatamente pelo mesmo motivo: o raio espectral de um subgrafo induzido desconexo é o maior dos raios espectrais das componentes conexas desse subgrafo.

Assim, a fim de determinar o espectro complementar de um grafo, é necessário determinar o raio espectral do grafo em questão, bem como de todos os seus subgrafos induzidos conexos. Vale destacar que, à priori, não temos conhecimento acerca do número de autovalores complementares de um grafo, uma vez que esse número está associado à quantidade de subgrafos induzidos conexos que possuem

raios espectrais distintos entre si. Esse é um fator negativo no estudo do espectro complementar comparado aos outros espectros associados a um grafo, onde sabemos exatamente qual é o número de autovalores em questão.

Note que, se os grafos de uma determinada classe possuem raios espectrais distintos entre si, então os espectros complementares dos grafos dessa classe também serão distintos entre si. Portanto, nosso objetivo inicial é procurar por classes de grafos onde os raios espectrais são distintos.

Nesse sentido, durante nosso estudo conseguimos determinar um ordenamento pelo raio espectral na classe das lollipops (grafo obtido anexando um ciclo C_k a um vértice pendente de um caminho P_{n-k} , com $3 \leq k \leq n$), onde o grafo lollipop com o maior raio espectral é aquele formado por um triângulo C_3 e um caminho P_{n-3} , e o grafo lollipop que tem o menor raio espectral é o ciclo C_n . Assim, os grafos lollipops com n vértices têm raios espectrais distintos entre si e, por consequência, os grafos dessa classe possuem espectros complementares distintos entre si.

Como trabalhos futuros pretendemos dar prosseguimento ao estudo sobre o espectro complementar de um grafo, estabelecendo principalmente classes de grafos que são determinados por esse espectro ou que possuam diferentes espectros entre os seus grafos, bem como trabalhar para encontrar outras propriedades de tal espectro.

Referências Bibliográficas

- [1] ABREU, N., CARDOSO, D. M., GUTMAN, I., MARTINS, E. A., AND ROBBIANO, M. Bounds for the signless Laplacian energy. *Linear Algebra and its Applications* 435, 10 (2011), 2365–2374.
- [2] ABREU, N., DEL-VECCHIO, R. R., VINAGRE, C. T., AND TREVISAN, V. Teoria Espectral de Grafos - Uma introdução. *III Colóquio de Matemática Aplicada da Região Sul, Universidade Federal de Santa Catarina* (2014).
- [3] ALLEM, L. E., JACOBS, D. P., AND TREVISAN, V. Normalized Laplacian energy change and edge deletion. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 75, 2 (2016), 343–353.
- [4] BROUWER, A. E., AND HAEMERS, W. H. *Spectra of graphs*. Springer Science & Business Media, 2011.
- [5] BRUALDI, R., HOGBEN, L., AND SHADER, B. Spectra of Families of Matrices Described by Graphs, Digraphs, and Sign Patterns Final Report: Mathematical results (revised). In *Workshop webpage: <http://aimath.org/pastworkshops/matrixspectrum.html>* (2006), no. (last accessed 29/12/17).
- [6] CAPOROSSI, G., CVETKOVIĆ, D., GUTMAN, I., AND HANSEN, P. Variable neighborhood search for extremal graphs. 2. Finding graphs with extremal energy. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 39, 6 (1999), 984–996.
- [7] CARVALHO, J., SOUZA, B. S., TREVISAN, V., AND TURA, F. C. Exponentially many graphs have a Q -cospectral mate. *Discrete Mathematics* 340, 9 (2017), 2079–2085.

- [8] CHVÁTAL, V., AND HAMMER, P. L. Aggregation of Inequalities in Integer Programming. In *Studies in Integer Programming*, vol. 1 of *Annals of Discrete Mathematics*. Elsevier, 1977, pp. 145 – 162.
- [9] CVETKOVIĆ, D., ROWLINSON, P., AND SIMIĆ, S. K. Signless Laplacians of finite graphs. *Linear Algebra and its Applications* 423, 1 (2007), 155 – 171.
- [10] CVETKOVIĆ, D., AND SIMIĆ, S. K. Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, I. *Publications de l'Institut Mathématique* 85, 99 (2009), 19–33.
- [11] CVETKOVIĆ, D. M. Graphs and their spectra. *Publikacije Elektrotehničkog fakulteta. Serija Matematika i fizika*, 354/356 (1971), 1–50.
- [12] DAHL, G. The Laplacian energy of threshold graphs and majorization. *Linear Algebra and its Applications* 469 (2015), 518–530.
- [13] DAS, K. C., FRITSCHER, E., PINHEIRO, L. K., AND TREVISAN, V. Maximum Laplacian energy of unicyclic graphs. *Discrete Applied Mathematics* 218 (2017), 71–81.
- [14] DAS, K. C., GUTMAN, I., CEVIK, A. S., AND ZHOU, B. On laplacian energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 70, 2 (2013), 689–696.
- [15] DAS, K. C., AND MOJALLAL, S. A. On Laplacian energy of graphs. *Discrete Mathematics* 325 (2014), 52–64.
- [16] DAS, K. C., AND MOJALLAL, S. A. Relation between energy and (signless) Laplacian energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 74, 2 (2015), 359–366.
- [17] DAS, K. C., AND MOJALLAL, S. A. Relation between signless Laplacian energy, energy of graph and its line graph. *Linear Algebra and its Applications* 493 (2016), 91–107.

- [18] DAS, K. C., MOJALLAL, S. A., AND GUTMAN, I. On energy of line graphs. *Linear Algebra and its Applications* 499 (2016), 79–89.
- [19] DAY, J., AND SO, W. Graph energy change due to edge deletion. *Linear Algebra and its Applications* 428, 8-9 (2008), 2070–2078.
- [20] FAN, K. Maximum properties and inequalities for the eigenvalues of completely continuous operators. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 37 (1951), 760 – 766.
- [21] FERNANDES, R., JUDICE, J., AND TREVISAN, V. Complementary eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 527 (2017), 216–231.
- [22] FRITSCHER, E., HOPPEN, C., ROCHA, I., AND TREVISAN, V. On the sum of the Laplacian eigenvalues of a tree. *Linear Algebra and its Applications* 435, 2 (2011), 371–399.
- [23] FRITSCHER, E., HOPPEN, C., ROCHA, I., AND TREVISAN, V. Characterizing trees with large Laplacian energy. *Linear Algebra and its Applications* 442 (2014), 20–49.
- [24] FRITSCHER, E., AND TREVISAN, V. Exploring symmetries to decompose matrices and graphs preserving the spectrum. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 37, 1 (2016), 260–289.
- [25] GUTMAN, I. Acyclic systems with extremal Hückel π -electron energy. *Theoretica chimica acta* 45, 2 (1977), 79–87.
- [26] GUTMAN, I. The energy of a graph. *Ber. Math.-Statist. Sect. Forsch. Graz*, 100–105 (1978), Ber. No. 103, 22. 10. Steiermärkisches Mathematisches Symposium.
- [27] GUTMAN, I. The energy of a graph: old and new results. In *Algebraic Combinatorics and Applications*. Springer, 2001, pp. 196–211.

- [28] GUTMAN, I. Topology and stability of conjugated hydrocarbons. The dependence of total π -electron energy on molecular topology. *J. Serb. Chem. Soc* 70, 3 (2005), 441–456.
- [29] GUTMAN, I., FURTULA, B., AND HUA, H. Bipartite unicyclic graphs with maximal, second-maximal, and third-maximal energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem* 58 (2007), 85–92.
- [30] GUTMAN, I., ROBBIANO, M., MARTINS, E. A., CARDOSO, D. M., MEDINA, L., AND ROJO, O. Energy of line graphs. *Linear Algebra and Its Applications* 433, 7 (2010), 1312–1323.
- [31] GUTMAN, I., AND ZHOU, B. Laplacian energy of a graph. *Linear Algebra and its Applications* 414, 1 (2006), 29–37.
- [32] HELMBERG, C., AND TREVISAN, V. Threshold graphs of maximal Laplacian energy. *Discrete Mathematics* 338, 7 (2015), 1075–1084.
- [33] HELMBERG, C., AND TREVISAN, V. Spectral threshold dominance, Brouwer’s conjecture and maximality of Laplacian energy. *Linear Algebra and its Applications* 512 (2017), 18–31.
- [34] HORN, R. A., AND JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. Cambridge university press, 2012.
- [35] HOU, Y. Unicyclic graphs with minimal energy. *Journal of Mathematical Chemistry* 29, 3 (2001), 163–168.
- [36] JACOBS, D. P., TREVISAN, V., AND TURA, F. Eigenvalue location in threshold graphs. *Linear Algebra and its Applications* 439, 10 (2013), 2762 – 2773.
- [37] JACOBS, D. P., TREVISAN, V., AND TURA, F. Eigenvalues and energy in threshold graphs. *Linear Algebra and its Applications* 465 (2015), 412 – 425.

- [38] KOOLEN, J. H., AND MOULTON, V. Maximal energy graphs. *Advances in Applied Mathematics* 26, 1 (2001), 47–52.
- [39] KOOLEN, J. H., AND MOULTON, V. Maximal energy bipartite graphs. *Graphs and Combinatorics* 19, 1 (2003), 131–135.
- [40] LI, X., SHI, Y., AND GUTMAN, I. *Graph energy*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [41] MAHADEV, N. V. R., AND PELED, U. N. *Threshold graphs and related topics*. Elsevier, 1995.
- [42] MERRIS, R. The number of eigenvalues greater than two in the Laplacian spectrum of a graph. *Portugaliae Mathematica* 48, 3 (1991), 345–349.
- [43] NIKIFOROV, V. The energy of graphs and matrices. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 326 (2007), 1472 – 1475.
- [44] NIKIFOROV, V. Revisiting two classical results on graph spectra. *The electronic journal of combinatorics* 14, 1 (2007), R14.
- [45] PINHEIRO, L. K., AND TREVISAN, V. Maximality of the signless Laplacian energy. *Discrete Mathematics* 341, 1 (2018), 33–41.
- [46] RADENKOVIĆ, S., AND GUTMAN, I. Total π -electron energy and Laplacian energy: How far the analogy goes? *Journal of the Serbian Chemical Society* 72, 12 (2007), 1343–1350.
- [47] ROBBIANO, M., AND JIMÉNEZ, R. Applications of a theorem by Ky Fan in the theory of Laplacian energy of graphs. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 62, 3 (2009), 537–552.
- [48] SEEGER, A. Complementarity eigenvalue analysis of connected graphs. *Linear Algebra and its Applications* 543 (2018), 205–225.

- [49] SOUZA, B. S. Produtos e coespectralidade de grafos. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, 2016.
- [50] STEIN, W. A., ET AL. Sage Mathematics Software (Version 7.0), 2016. *The Sage Development Team* (URL: <http://www.sagemath.org>).
- [51] VAN DEN HEUVEL, J. Hamilton cycles and eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 226 (1995), 723–730.
- [52] VINAGRE, C. T., DEL-VECCHIO, R. R., JUSTO, D. A., AND TREVISAN, V. Maximum Laplacian energy among threshold graphs. *Linear Algebra and its Applications* 439, 5 (2013), 1479 – 1495.
- [53] WIELANDT, H. An extremum property of sums of eigenvalues. *Proceedings of the American Mathematical Society* 6, 1 (1955), 106–110.
- [54] ZHOU, B. New upper bounds for Laplacian energy. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 62, 3 (2009), 553–560.

Índice Remissivo

- árvore, 15
 - pendente, 65
- aresta, 11
 - incidente, 11
 - pendente, 13
- caminho, 13
 - comprimento de um, 13
- ciclo, 13
 - comprimento de um, 13
- cintura de um grafo, 16
- clique, 15
- componente conexa, 14
- conjunto independente, 12
- diâmetro, 14
- distância entre dois vértices, 14
- energia
 - de um grafo, 24
 - de uma matriz, 26
 - laplaciana, 24
 - laplaciana sem sinal, 25
- estrela, 15
- floresta, 15
- folha, 15
- grafo, 11
 - c -cíclico, 16, 89
 - k -regular, 14
 - bipartido, 16
 - caterpillar, 30
 - complementar, 12
 - completo, 14
 - conexo, 13
 - desconexo, 13
 - nulo, 12
 - split, 16
 - split completo, 16
 - threshold, 70
 - unicíclico, 16
- grau de um vértice, 12
- grau médio, 13
- matriz
 - de adjacência, 17
 - laplaciana, 17
 - laplaciana sem sinal, 17
- partição equilibrada, 22
- passeio, 13
 - comprimento de um, 13
 - fechado, 13
- polinômio característico de um grafo, 18
- subgrafo, 12
 - induzido, 12
- vértice, 11

adjacente, 11
dominante, 12
isolado, 12
pendente, 13
quase-pendente, 13
valores singulares, 26